

Emerson Luiz de Moraes

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE ESCOAMENTOS
LAMINARES OBTIDAS COM O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS
E MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS**

CURITIBA
2004

Emerson Luiz de Moraes

**VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE ESCOAMENTOS
LAMINARES OBTIDAS COM O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS
E MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Carlos H. Marchi, Dr. Eng.

Co-orientador: Prof. Fábio A. Schneider, M. Eng.

CURITIBA
2004

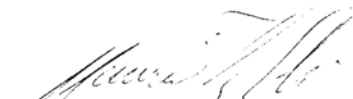
TERMO DE APROVAÇÃO

EMERSON LUIZ DE MORAIS

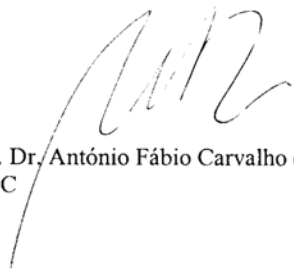
VERIFICAÇÃO DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE ESCOAMENTOS LAMINARES OBTIDAS COM MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS E MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção de grau de Mestre em Engenharia Mecânica, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

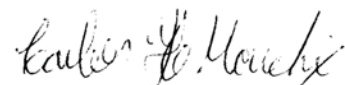
Banca Examinadora:



Prof. Dr. Mauricio Felga Gobbi
UFPR



Prof. Dr. Antônio Fábio Carvalho da Silva
UFSC



Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi
PG-MEC / UFPR
Presidente

Curitiba, 13 de dezembro de 2004

Aos meus pais,
A quem mais devo,
dedico este trabalho.

AGRADECIMENTOS

Todo o trabalho é fruto de um conjunto de fatores e pessoas que têm um objetivo em comum. Agradecer a estas pessoas é um dever de alguém que está finalizando um trabalho qualquer.

Particularmente, eu gostaria de agradecer, em especial, à orientação quase paternal do Prof. Carlos H. Marchi, que não poupou esforços e “puxões de orelha” para que este trabalho fosse finalizado e à dedicação do Prof. Fábio A. Schneider.

Ao Instituto de Tecnologia para o Desenvolvimento – LACTEC pelo apoio financeiro e pela possibilidade de utilizar os seus recursos computacionais, sem os quais este trabalho não se realizaria.

Aos “amigos-chefes” Luiz Alberto J. Procopiak e Renato de Arruda Penteado Neto não só por me deixarem fazer este trabalho, mas, principalmente, por todo o apoio dado, principalmente nos momentos mais difíceis.

Aos colegas do LACTEC, que independentemente de cargo, título, ou qualquer outra distinção, me apoiaram com sua amizade e companheirismo.

E a minha família já que tudo começa, caminha e termina nela.

RESUMO

O presente trabalho versa sobre o uso dos estimadores de erro Extrapolação de Richardson e *Grid Convergence Index* – GCI, baseados tanto na ordem aparente quanto na ordem assintótica, na solução das equações de Navier-Stokes aplicadas a escoamentos laminares com solução analítica conhecida. Para tal se usa um *software* comercial que utiliza o Método dos Volumes Finitos baseados em Elementos com malhas não-estruturadas, o CFX. Todas as malhas usadas para a solução dos problemas apresentados são tetraédricas. Os problemas escolhidos para o estudo foram: escoamento recirculante na cavidade quadrada e o escoamento completamente desenvolvido entre duas placas planas paralelas. Esta escolha se deve ao fato de se querer testar o comportamento das soluções com o refino de malha, bem como as previsões de incerteza com os erros numéricos das soluções, avaliando a efetividade destas. Outro objetivo do estudo é o de se verificar o comportamento dos estimadores de erro para uma mesma variável em diferentes pontos de uma malha bidimensional, bem como quando esta é obtida a partir de diferentes variáveis de base. Os resultados para o problema da cavidade quadrada se comportaram como o esperado com sobre-estimativas bastante significativas. Para o outro problema, os resultados mostraram uma elevada sensibilidade da ordem aparente às variações nas soluções obtidas. No problema do escoamento entre placas planas verificou-se a total dependência das estimativas de erro para diferentes pontos da malha assim como que diferentes variáveis de base levam a diferentes estimativas de erro, bem como diferentes comportamentos destas estimativas com o refino de malha.

Palavras-chave: Incerteza numérica; Mecânica dos Fluidos Computacional.

ABSTRACT

The present work is about the use of the Richardson's Extrapolation and the Grid Convergence Index – GCI error estimators, based on both apparent and asymptotic orders, on the solution of the Navier-Stokes equations applied to laminar flows with known analytical solutions. For this purpose, commercial software that uses the Element-based Finite Volume Method, with unstructured meshes called CFX was used. All grids used for the solution of the proposed problems were formed with tetrahedrons. The chosen problems for this study were: recirculating flow on a square cavity and the completely developed flow between two flat plates. This choice was made because we aimed to test the behavior of the solutions with the mesh refinement as well the numerical uncertainty with the numerical errors of the obtained solutions, evaluating its effectiveness. Another target of this work was to verify the error estimator's behavior for the same variable at different points on a two-dimensional mesh, as well as when this variable is obtained from different base-variables. The results for the first problem behave as expected with significant over estimation, especially for the GCI error estimator. For the other problem, the results showed a high sensitivity of the apparent order to the variations of the obtained solutions. On the flow between two flat plates problem we verified a dependency of the error estimate with the geometric point where the solution was evaluated. Results obtained with different base-variables showed different error estimative and behavior of those with mesh refinement.

Keywords: Numerical uncertainty; Computational Fluid Dynamics.

SUMÁRIO

RESUMO.....	6
ABSTRACT	7
LISTA DE FIGURAS.....	11
LISTA DE TABELAS.....	14
LISTA DE SÍMBOLOS	16
1. INTRODUÇÃO	19
1.1 INTRODUÇÃO	19
1.2 MOTIVAÇÃO	20
1.3 OBJETIVOS.....	22
1.4 TERMINOLOGIA BÁSICA.....	22
1.4.1 Erro: Definição, Tipos e Suas Origens.	22
1.4.2 Verificação e Validação.....	25
1.4.3 Malhas Estruturadas e Não-Estruturadas.....	25
1.5 A ESTRUTURA DO TRABALHO.....	26
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	28
2.1 INTRODUÇÃO	28
2.2 EQUAÇÕES GOVERNANTES.....	28
2.3 MÉTODO NUMÉRICO.....	30
2.3.1 Discretização do Domínio de Cálculo	30
2.3.1.1 Elemento.....	31
2.3.1.2 Volume de Controle	34
2.3.2 Discretização das Equações Governantes	36
2.3.3 Acoplamento Pressão-Velocidade.....	40
2.3.4 Aplicação das Condições de Contorno.....	41
2.3.4.1 Fronteira Impermeável – θ Prescrito.....	42
2.3.4.2 Fronteira Impermeável – Fluxo de θ Prescrito.....	43

2.3.4.3	Fronteira Permeável com Fluxo de Massa Entrando no Volume de Controle.	43
2.3.4.4	Fronteira Permeável com Fluxo de Massa Saindo do Volume de Controle.	44
2.4	O CFX-5	44
2.4.1	A Estrutura do CFX-5.	45
2.4.2	O Gerador de Malha.	45
2.4.3	O CFX-5 Pre.....	48
2.4.4	O CFX-5 Solver.	49
2.4.5	CFX-5 Solver Manager	52
2.4.6	CFX-5 Post.....	53
2.5	OS MÉTODOS PARA A ESTIMATIVA DE INCERTEZA NUMÉRICA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON E <i>GRID CONVERGENCE INDEX - GCI</i>	53
2.5.1	O Estimador de Richardson	55
2.5.2	Ordem Aparente	57
2.5.3	Grid Convergence Index - <i>GCI</i>	59
2.5.4	Ordem Efetiva.....	60
3	ESCOAMENTO RECIRCULANTE NA CAVIDADE QUADRADA	62
3.1	INTRODUÇÃO E DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	62
3.2	O MODELO NUMÉRICO.....	65
3.3	RESULTADOS OBTIDOS	68
3.3.1	Variáveis Locais	68
3.3.2	Variáveis Integradas	71
3.3.2.1.	Obtenção das variáveis integradas.....	71
3.3.2.2.	Análise dos resultados obtidos	73
3.3.3	Os Erros Numéricos.	74
3.3.4	Ordem Aparente	76
3.3.5	Ordem Efetiva.....	78
3.3.6	Extrapolação de Richardson / Erro Numérico.....	78
3.3.7	Grid Convergence Index (<i>GCI</i>) / Erro Numérico.....	79
3.4	CONCLUSÃO	82
4	ESCOAMENTO ENTRE DUAS PLACAS PLANAS PARALELAS	84
4.1	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA.....	84
4.2	O MODELO NUMÉRICO.....	87

4.3	RESULTADOS OBTIDOS	89
4.3.1	<i>Variáveis de Interesse</i>	89
4.3.2	<i>Erro Numérico</i>	94
4.3.3	<i>Ordem Aparente</i>	96
4.3.4	<i>Ordem Efetiva</i>	97
4.3.5	<i>Extrapolação de Richardson / Erro Numérico</i>	98
4.3.6	<i>GCI / Erro Numérico</i>	101
4.4	CONCLUSÃO	103
5	CONCLUSÃO	105
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	108
	APÊNDICE - ESCOAMENTO SOBRE UMA PLACA PLANA	112

LISTA DE FIGURAS

- FIGURA 1.1 MÉTODOS USADOS PARA A REPRESENTAÇÃO DA REALIDADE FÍSICA, COM SUAS FASES E ERROS. ADAPTADO DE ITTC (2002)
- FIGURA 1.2 EXEMPLOS DE DISCRETIZAÇÃO ESTRUTURADA GENERALIZADA (A), CARTESIANA (B) E NÃO-ESTRUTURADA COM DOIS TIPOS DE ELEMENTOS (C).
- FIGURA 2.1 FORMAÇÃO DOS ELEMENTOS POR TRIANGULAÇÃO GERAL E OS VOLUMES DE CONTORNO (EM VERDE) PELO MÉTODO DAS MEDIANAS
- FIGURA 2.2 MAPEAMENTO DO ELEMENTO 123 NO ELEMENTO DE REFERÊNCIA.
- FIGURA 2.3 ELEMENTO FINITO E SEUS PONTOS DE INTEGRAÇÃO. NOTE QUE APENAS OS PONTOS DE INTEGRAÇÃO PI2 E PI3 CONTRIBUEM PARA O VOLUME CENTRADO NO NÓ 1.
- FIGURA 2.4 LINHA DE FLUXO PASSANDO PELO PONTO DE INTEGRAÇÃO 2 (PI2) DO ELEMENTO CENTRADO NO NÓ 1.
- FIGURA 2.5 APLICAÇÃO DE CONDIÇÃO DE CONTORNO EM UM VOLUME DE CONTROLE DE FRONTEIRA, CENTRADO NO NÓ 2.
- FIGURA 2.6 ESQUEMA GERAL DE FUNCIONAMENTO DO SOFTWARE CFX-5
- FIGURA 2.7 GEOMETRIA INICIAL PARA A GERAÇÃO DE MALHA.
- FIGURA 2.8 GEOMETRIA TOTALMENTE ENVOLVIDA POR TETRAEDROS, VISTA EM "WIRE FRAME".
- FIGURA 2.9 SEÇÃO TRANSVERSAL MOSTRANDO COMO OS TETRAEDROS SÃO POSTOS EM TORNO DA GEOMETRIA.
- FIGURA 2.10 MALHA ANTES DA CAPTURA DAS SUPERFÍCIES E SEPARAÇÃO DO VOLUME ÚTIL (EM AZUL E VERMELHO)
- FIGURA 2.11 MALHA APÓS O CORTE DOS ELEMENTOS DESNECESSÁRIOS, PORÉM ANTES DA SUAVIZAÇÃO.
- FIGURA 2.12 MALHA FINAL.
- FIGURA 2.13 TELA DO CFX-PRE MOSTRANDO UMA MALHA COM CONDIÇÃO DE CONTORNO IMPOSTA (SETAS SOBRE AS BORDAS DO DOMÍNIO)
- FIGURA 2.14 FLUXOGRAMA MOSTRANDO O FUNCIONAMENTO DO CFX-5 SOLVER.
- FIGURA 2.15 JANELA DO CFX-SOLVER MANAGER, MOSTRANDO A EVOLUÇÃO DOS RESÍDUOS POR ITERAÇÃO E OS RESULTADOS EM ALGUMAS DESTAS ITERAÇÕES.
- FIGURA 2.16 JANELA DO CFX-POST MOSTRANDO OS RESULTADOS DE UMA SIMULAÇÃO NUMÉRICA.
- FIGURA 3.1 DOMÍNIO DE CÁLCULO PARA O PROBLEMA DA CAVIDADE QUADRADA.
- FIGURA 3.2 VISTA FRONTAL DA MALHA OBTIDA COM 10 DIVISÕES NA LATERAL.
- FIGURA 3.3 VISTA FRONTAL DA MALHA OBTIDA COM 20 DIVISÕES NA LATERAL

FIGURA 3.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO APLICADAS AO DOMÍNIO DE CÁLCULO.

FIGURA 3.5 COMPARAÇÃO ENTRE AS VELOCIDADES OBTIDAS COM O ESQUEMA BLEND FACTOR = 1 E UPWIND. VARIÁVEL: VELOCIDADE U, MALHA C.

FIGURA 3.6 COMPARAÇÃO ENTRE AS VELOCIDADES OBTIDAS COM O ESQUEMA BLEND FACTOR = 1 E UPWIND. VARIÁVEL: VELOCIDADE U, MALHA D.

FIGURA 3.7 COMPARAÇÃO ENTRE AS VELOCIDADES OBTIDAS COM O ESQUEMA BLEND FACTOR = 1 E UPWIND. VARIÁVEL: VELOCIDADE V, MALHA C.

FIGURA 3.8 COMPARAÇÃO ENTRE AS VELOCIDADES OBTIDAS COM O ESQUEMA BLEND FACTOR = 1 E UPWIND. VARIÁVEL: VELOCIDADE V, MALHA D.

FIGURA 3.9 POSIÇÃO DAS LINHAS DE TOMADA DE DADOS PARA O CÁLCULO DOS RESULTADOS NUMÉRICOS.

FIGURA 3.10 COMPORTAMENTO DO FLUXO DE MASSA COM O REFINO DA MALHA.

FIGURA 3.11 COMPORTAMENTO DA FORÇA SOBRE A PLACA COM O REFINO DE MALHA.

FIGURA 3.12 COMPORTAMENTO DO ERRO VERDADEIRO COM O REFINO DE MALHA PARA A VARIÁVEL FLUXO DE MASSA.

FIGURA 3.13 COMPORTAMENTO DO ERRO VERDADEIRO COM O REFINO DE MALHA PARA A VARIÁVEL FORÇA SOBRE A PLACA.

FIGURA 3.14 INCERTEZA NUMÉRICA OBTIDA PELA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON PARA O FLUXO DE MASSA.

FIGURA 3.15 INCERTEZA NUMÉRICA OBTIDA PELA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON PARA A FORÇA NA PLACA.

FIGURA 3.16 RELAÇÃO GCI/ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL FLUXO DE MASSA.

FIGURA 3.17 RELAÇÃO GCI/ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL FORÇA SOBRE A PLACA.

FIGURA 4.1 DOMÍNIO DE CÁLCULO PARA O PROBLEMA DO ESCOAMENTO ENTRE DUAS PLACAS PLANAS.

FIGURA 4.2 MALHA B.

FIGURA 4.3 MALHA C.

FIGURA 4.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO APLICADAS AO DOMÍNIO DE CÁLCULO.

FIGURA 4.5 DISPOSIÇÃO DAS LINHAS DE TOMADA DE PONTOS NO DOMÍNIO DE CÁLCULO.

FIGURA 4.6 PERFIL DE VELOCIDADES OBTIDO COM BLEND-FACTOR = 1.

FIGURA 4.7 PERFIL DA TENSÃO DE CISALHAMENTO DO ESCOAMENTO. OBTIDO COM BLEND FACTOR = 1.

FIGURA 4.8 VARIAÇÃO DA VELOCIDADE MÁXIMA COM O TAMANHO MÉDIO DO ELEMENTO PARA OS TRÊS ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DO TERMO ADVECTIVO.

- FIGURA 4.9 TENSÃO DE CISALHAMENTO COM O REFINO DE MALHA PARA OS TRÊS ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO E PARA AS DUAS POSIÇÕES DE CÁLCULO.
- FIGURA 4.10 VARIAÇÃO DA TENSÃO DE CISALHAMENTO BASEADA NA VELOCIDADE COM O REFINO DE MALHA PARA OS TRÊS ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO E PARA AS DUAS POSIÇÕES DE CÁLCULO.
- FIGURA 4.11 RELAÇÃO ENTRE A ESTIMATIVA DE ERRO E O ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA.
- FIGURA 4.12 ESTIMADOR DE RICHARDSON / ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO BASEADA NO GRADIENTE DE PRESSÃO. A AUSÊNCIA DOS DADOS REFERENTES À ORDEM APARENTE SE DEVE AO FATO DE NÃO SER POSSÍVEL O CÁLCULO DESTA PARA AMBAS AS POSIÇÕES EM ESTUDO.
- FIGURA 4.13 RELAÇÃO ENTRE A ESTIMATIVA DE ERRO E O ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA
- FIGURA 4.14 GCI/ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA, LINHAS 1 E 3.
- FIGURA 4.15 GCI / ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE PRESSÃO.
- FIGURA 4.16 GCI / ERRO NUMÉRICO PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADE.

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 ESQUEMAS UTILIZADOS NA DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS ADVECTIVOS DA EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO LINEAR (ANSYS,2004).

TABELA 3.2 DISCRETIZAÇÕES USADAS NO ESTUDO DO PROBLEMA.

TABELA 3.3 RAZÃO DE REFINO BASEADO NO NÚMERO DE ELEMENTOS NA FACE.

TABELA 3.4 ERRO NUMÉRICO PARA O FLUXO DE MASSA.

TABELA 3.5 ERRO NUMÉRICO PARA A FORÇA SOBRE A PLACA.

TABELA 3.6 ORDENS APARENTES CALCULADAS CONFORME ROACHE (1997) PARA O FLUXO DE MASSA.

TABELA 3.7 ORDENS APARENTES CALCULADAS CONFORME ROACHE (1997) PARA A FORÇA SOBRE A PLACA.

TABELA 3.8 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL FLUXO DE MASSA

TABELA 3.9 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL FORÇA SOBRE A PLACA.

TABELA 4.1 VARIÁVEIS DE ENTRADA E SAÍDA PARA O PROBLEMA.

TABELA 4.2 DISCRETIZAÇÕES DO DOMÍNIO EM ESTUDO.

TABELA 4.3 RAZÃO DE REFINO BASEADO NO NÚMERO DE ELEMENTOS NA FACE.

TABELA 4.4 ERROS NUMÉRICOS PARA AS DIVERSAS MALHAS E ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA – LINHA 1.

TABELA 4.5 ERROS NUMÉRICOS PARA AS DIVERSAS MALHAS E ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA - LINHA 3.

TABELA 4.6 ERROS NUMÉRICOS PARA AS DIVERSAS MALHAS E ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL TENSÃO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE PRESSÃO LINHAS 1-2.

TABELA 4.7 ERROS NUMÉRICOS PARA AS DIVERSAS MALHAS E ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL TENSÃO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE PRESSÃO LINHAS 3-4.

TABELA 4.8 ERROS NUMÉRICOS PARA AS DIVERSAS MALHAS E ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL TENSÃO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADES LINHA 1.

TABELA 4.9 ERROS NUMÉRICOS PARA AS DIVERSAS MALHAS E ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DA VARIÁVEL TENSÃO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADES LINHA 3.

TABELA 4.10 ORDEM APARENTE CALCULADA PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA – LINHA 1.

TABELA 4.11 ORDEM APARENTE CALCULADA PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA – LINHA 3.

- TABELA 4.12 ORDEM APARENTE CALCULADA PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADE. LINHA 1.
- TABELA 4.13 ORDEM APARENTE CALCULADA PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADE. LINHA 3
- TABELA 4.14 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA. LINHA 1
- TABELA 4.15 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL VELOCIDADE MÁXIMA LINHAS 3
- TABELA 4.16 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE PRESSÃO. LINHAS 1-2
- TABELA 4.17 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE PRESSÃO. LINHAS 3-4
- TABELA 4.18 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADE. LINHA 1
- TABELA 4.19 ORDENS EFETIVAS PARA A VARIÁVEL TENSÃO DE CISALHAMENTO MÍNIMA BASEADA NO GRADIENTE DE VELOCIDADE. LINHA 3

LISTA DE SÍMBOLOS

ρ	Massa específica
t	Tempo
U_i	Vetor de velocidade
x_i	Vetor de posição
P	Pressão
μ	Viscosidade dinâmica do fluido
Θ	Escalar qualquer
Γ	Difusividade do fluido
S_Θ	Termo fonte da equação de transporte do escalar Θ
u	Componente da velocidade paralela ao eixo x
v	Componente da velocidade paralela ao eixo y
ν	Viscosidade cinemática do fluido
ξ, η	Eixos coordenados do plano de referência para o mapeamento dos elementos
$N(\xi, \eta)$	Função de interpolação
ϕ	Propriedade qualquer do escoamento; solução numérica de um sistema de equações diferenciais parciais ordinárias qualquer.
J	Jacobiano da transformação $(x, y) \rightarrow (\xi, \eta)$
SVC	Sub-volume de controle
PI	Ponto de integração
ΔA	Área do elemento
A_{SVC}	Área do sub-volume de controle
A_{VC}	Área do volume de controle
N_{SVC}	Número de sub-volumes de controle que formam um volume de controle
n_i	Vetor normal à superfície de controle
S	Área da superfície de controle
V	Volume do volume de controle
\dot{m}	Fluxo de massa na aresta de um volume de controle
β, BF	Fator de peso ou fator de mistura
Q_{pif}^A	Fluxo advectivo sobre um ponto de integração de fronteira;
Q_{pif}^D	Fluxo difusivo sobre um ponto de integração de fronteira;

Φ	Solução analítica de um sistema de equações diferenciais parciais qualquer
E	Erro de discretização
C_i	Coefficiente do erro de discretização
h	Tamanho dos elementos
p_v	Ordem verdadeira
p_L ou Pl	Ordem assintótica
U	Incerteza da solução numérica
ϕ_∞	Solução numérica para uma malha onde $h \rightarrow 0$
ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3	Solução numérica obtida com a malha fina, grossa e super-grossa, respectivamente
h_1, h_2, h_3	Tamanho do elemento para a malha fina, grossa e super-grossa, respectivamente
q_{ef}	Razão de refino efetiva
D	Número de dimensões do problema
h'	Tamanho representativo do elemento
N	Número de elementos na malha em estudo
p_U ou Pu	Ordem aparente
Ψ_U	Razão de convergência
ω	Fator de relaxação
$\phi_\infty^{p_U}$	Estimativa da solução analítica baseada na ordem aparente
$\phi_\infty^{p_L}$	Estimativa da solução analítica baseada na ordem assintótica
GCI^{p_U} ou GCI(Pu)	Estimativa de incerteza pelo estimador GCI baseado na ordem aparente
GCI^{p_L} ou GCI(Pl)	Estimativa de incerteza pelo estimador GCI baseado na ordem assintótica
FS	Fator de segurança aplicado ao estimador de Richardson
p_E	Ordem efetiva
B	Termo fonte aplicado no problema da cavidade quadrada
FM	Fluxo de massa
FP	Força sobre a placa
\bar{h}	Tamanho médio dos elementos
Δk	Valor representativo do domínio em estudo
$U_{RI}^{p_U}$ ou Uri(Pu)	Estimativa da incerteza obtida pelo estimador de Richardson baseado na

	ordem aparente
U_{RI}^{PL} ou $Uri(PI)$	Estimativa da incerteza obtida pelo estimador de Richardson baseado na ordem assintótica
U_0 ou Uo	Velocidade na entrada do domínio
τ	Tensão de cisalhamento

1. INTRODUÇÃO

1.1 Introdução

A utilização da simulação numérica como uma ferramenta de projeto ou de análise de problemas de engenharia é uma realidade em diversos setores da indústria brasileira e mundial. Hoje, simula-se desde estruturas de pontes e prédios até componentes eletrônicos verificando o comportamento físico destas peças às mais diversas situações de uso.

Esta tendência deve-se primordialmente a três fatores principais:

- Redução nos custos de *hardware* computacional (processadores, memórias, discos rígidos, etc.) com um aumento de performance bastante acentuado, tornando o gerenciamento de grandes bancos de dados (em nosso caso mais específico, matrizes) uma tarefa fácil e relativamente rápida;
- O amadurecimento dos *softwares* de simulação que passaram de códigos específicos para resolução de problemas acadêmicos, para *softwares* completos capazes de resolverem problemas de elevada complexidade geométrica e física. Estes programas computacionais ainda têm, para uma realidade brasileira, custos bastante elevados estando eles ainda restritos a companhias de grande porte ou a instituições de pesquisa, desenvolvimento e ensino as quais têm incentivos para a aquisição dos *softwares* por parte dos seus fabricantes;
- O aumento nos custos de projeto, instalação e manutenção de laboratórios especializados para a realização de ensaios e experimentos para o desenvolvimento de produtos e soluções de engenharia.

Com o amadurecimento dos *softwares* de simulação numérica começaram também a surgir indagações sobre a acurácia das simulações realizadas. Em problemas onde a solução analítica não era conhecida, eram realizados experimentos para se “*validar*” as simulações, ou seja, se fazia um processo para determinar o quão precisa era a representação do mundo real sob a perspectiva de intenção de uso de um modelo (Oberkampf e Trucano, 2002).

Por outro lado haviam problemas matemáticos que utilizavam as equações físicas (Equações de Navier-Stokes, Equações de Conservação de Energia, etc.) com condições de contorno específicas com as quais se podia obter uma solução analítica para o problema (por exemplo, Shih, *et. Al*, 1989). Nestes casos a validação do código não é possível, mas a “*verificação*”, isto é, determinar se um código computacional representa precisamente a

solução das equações matemáticas propostas (Logan e Nitta, 2002 citando Cafeo e Roache, 2002), é possível.

Mais recentemente houve a publicação de diversas soluções numéricas de referência, ou soluções de *benchmark*, (Ghia, *et al*, 1982; por exemplo) as quais também têm sido utilizadas para a verificação de códigos.

O propósito deste trabalho está em aplicar uma metodologia, já amplamente divulgada e aceita, de verificação de um código a um *software* comercial para problemas de escoamentos laminares cujas soluções analíticas estão disponíveis.

O *software* escolhido foi o CFX, o qual é baseado no Método de Volumes Finitos Baseado em Elementos (EbFVM – *Element-based Finite Volume Method*) (termo proposto por Maliska, 2004 em substituição ao termo *Control Volume-based Finite Element Method – CVFEM*), proposto por Raw (1985). Esta metodologia tem como principal atrativo a facilidade de discretização de geometrias de elevada complexidade trabalhando com malhas não-estruturadas e apresentando uma performance, no que diz respeito aos erros de convergência bastante boa (um estudo mais completo sobre esta metodologia pode ser vista em Souza, 2000; e no capítulo 2 deste trabalho). Assim, tem-se o primeiro objetivo deste trabalho: a avaliação dos erros de discretização, os quais serão definidos mais a frente e também no Capítulo 2, para o EbFVM implementado no CFX.

Um segundo objetivo deste trabalho é avaliar os Estimadores de Erro, Extrapolação de Richardson e *Grid Convergence Index – GCI*, para malhas não estruturadas assim como feito por Celik e Karatekin (2002).

Para isto foram estudados dois problemas laminares com solução analítica conhecida: escoamento recirculante em cavidade quadrada, proposto por Shih, *et al*. (1989); e o escoamento entre placas planas semi-infinitas.

1.2 Motivação

Nos meios acadêmicos ainda há muita controvérsia sobre a utilização dos chamados *softwares* comerciais para a solução de problemas de engenharia. Entretanto, esta utilização é uma realidade tanto no Brasil como em outros países. Não se objetiva neste trabalho defender a utilização ou não destes códigos. Entretanto, defende-se aqui que a utilização de qualquer código, comercial ou acadêmico, para a simulação de eventos físicos deve ser acompanhada de cuidados, principalmente no que tange à quantificação das incertezas envolvidas nestas simulações.

Esta preocupação pode ser explicada com uma frase de Ferziger (1993), que diz:

“Em cálculo, o pior desastre que pode ocorrer não é a instabilidade ou a perda de convergência, mas, resultados que são, simultaneamente, bons o suficiente para serem críveis e ruins o suficiente para causar-nos problemas”.

Atualmente, a quantificação da incerteza numérica de uma simulação é tida como um dos mais importantes tópicos da Dinâmica de Fluidos Computacional, ou CFD, como demonstrado por diversos fóruns como o AIAA (*American Institute of Aeronautics and Astronautics*), o ERCOFTAC (*European Research Community on Flow, Turbulence and Combustion*) e o ITTC (*International Towing Tank Conference*) além de controles rigorosos por parte de instituições de publicação de avanços na área como o *Journal of Fluid Engineering* da ASME e os numerosos artigos em revistas e congressos que são publicados anualmente.

A Divisão de Engenharia de Fluidos da *American Society of Mechanical Engineers* (ASME) vem fazendo trabalhos nas áreas de detecção, estimativa e controle da incerteza numérica e/ou do erro em CFD desde 1990. No entanto, um primeiro trabalho de controle de qualidade nesta área foi realizado em 1986 por Roache *et. al* e revisado em 1993, por Freitas. Uma revisão do procedimento de cálculo foi realizada por Celik em 2003, sendo esta a referência mais recente sobre este assunto que foi encontrada.

Embora a discussão sobre este assunto já tenha atingido um certo grau de maturidade com crescente atenção para a taxonomia, metodologias detalhadas e numerosos estudos de caso para diferentes tipos de problemas (por exemplo Marchi, 2001, Eça & Hoekstra, 2003, dentre outros), vários pontos de vista ainda não convergiram. Assim, será necessário, neste trabalho, fazer a definição dos termos utilizados, o que será realizado ainda neste capítulo inicial.

Outro motivador para este estudo é o fato de haver ainda pouco entendimento dos efeitos da utilização de malhas não-estruturadas sobre os erro numéricos e o desempenho dos estimadores de erros (Marchi, 2001). Busca-se neste trabalho, mostrar este desempenho para os dois problemas selecionados.

Além disto, poucos estudos da incerteza numérica para códigos baseados no Método de Volumes Finitos Baseado em Elementos (EbFVM – *Element-based Finite Volume Method*) (Maliska, 2004) foram encontrados. Os resultados apresentados por Souza, 2000, não trazem nenhum estudo de incerteza numérica, apesar de apresentar resultados em mais de uma malha para o problema da cavidade quadrada (Ghia, *et. al*, 1982) o foco do trabalho estava nos erros de iteração, ou de convergência.

1.3 Objetivos

Neste trabalho se apresenta a metodologia de cálculo da incerteza pelo método de *Grid Convergence Index* - GCI baseando-se nos trabalhos de Roache (1997), Marchi (2001) e Celik (2003) e a aplica a um código comercial baseado no EbFVM, o CFX.

O trabalho apresenta resultados somente para problemas laminares com solução analítica conhecida. Objetiva-se com isto verificar apenas o efeito da multidimensionalidade nos resultados assim como os efeitos da não-estruturação da malha sobre estes (trabalho também realizado por Celik e Karatekin, 2002).

1.4 Terminologia básica.

Em todos os objetivos deste trabalho se repete as palavras erros, verificação e malhas não-estruturadas, entretanto nenhuma definição destes termos ou suas fontes foram citadas. Esta definição será realizada agora.

2.3.1 Erro: Definição, Tipos e Suas Origens.

Há diferentes definições para o termo erro. Aqui serão apresentadas e discutidas algumas delas bem como os tipos de erros que podem ser encontrados em uma simulação numérica e suas origens.

Baseando-se na definição metrológica de erro, Stern *et alii* (1999), define *erro* como sendo a diferença entre o valor da simulação ou o valor da solução analítica e o valor verdadeiro de uma variável. Esta mesma definição é usada por Marchi (2001), citando Oberkampf e Blottner (1998); Roache (1997) e Ferziger e Perić (1999), para definir *erro de modelagem*.

A origem dos erros está intimamente ligada ao processo de análise e solução de um problema. Há dois grandes grupos de métodos para a análise e solução de problemas: os experimentais e os teóricos. Estes últimos, por sua vez podem ser divididos em dois grupos distintos os analíticos e os numéricos. Na Figura 1.1 é mostrada esta divisão entre os métodos de solução e os respectivos erros gerados em cada fase.

Neste trabalho não será feita a definição dos tipos de erros para os métodos experimentais uma vez que estamos tratando apenas de métodos de solução numérica de problemas, ou seja, apenas de métodos teóricos.

Para as soluções numéricas os erros podem ser classificados, de acordo com a sua origem, em (Marchi, 2001):

- Erro Numérico como sendo a diferença entre a solução analítica exata para uma variável de um problema qualquer e a sua solução numérica (Férziger e Peric, 1999). É composto de quatro parcelas a saber:
 - Erros de Truncamento: é definido como o resíduo que resulta da substituição da solução analítica exata de uma variável na equação discretizada do modelo matemático;
 - Erros de Iteração: é a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração. Este erro pode ser nulo caso se obtenha a solução do sistema de equações algébricas diretamente e a equação diferencial for linear;
 - Erros de Arredondamento: ocorrem devido à representação finita dos números reais utilizada nos cálculos em computador. Estes erros dependem de dois fatores: o compilador usado para gerar o código computacional e o processador que o executa e estão relacionados com o número máximo de algarismos que uma variável pode ser representada e armazenada na memória do computador;
 - Erros de Programação: incluem basicamente:
 - erros resultantes do uso incorreto do modelo numérico;
 - erros gerados na implementação do algoritmo do modelo numérico;
 - erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica;

Quando o erro numérico é gerado apenas por erros de truncamento, isto é, os demais erros (arredondamento, programação e iteração) são nulos ou desprezíveis, este erro é denominado erro de discretização (Férziger e Peric, 2002). Estes podem ser estimados de duas formas:

- A priori: proporcionam uma análise qualitativa do erro de discretização antes mesmo de se obter uma solução numérica;
- A posteriori: o erro de discretização é estimado a partir da solução numérica de uma ou mais malhas. No presente trabalho serão utilizados os resultados obtidos em diversas malhas para o cálculo do erro de discretização.

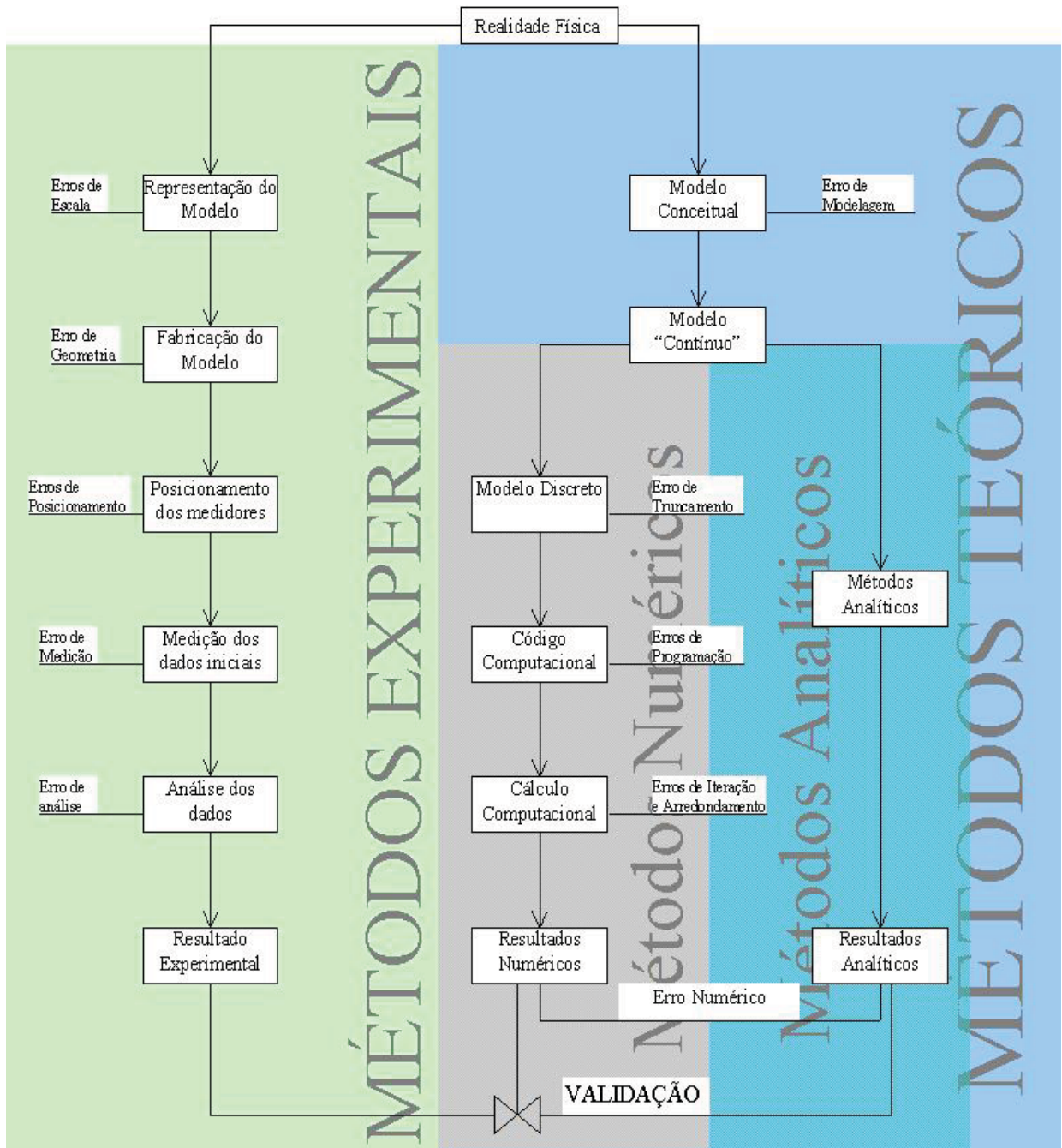


Figura 1.1 Métodos usados para a representação da realidade física, com suas fases e erros. Adaptado de ITTC (2002)

Note-se que na definição de erro numérico é necessário se conhecer a solução analítica do problema o que, na maioria das vezes, é desconhecido. Assim, não é possível se calcular o erro, mas sim uma estimativa do erro a partir da diferença entre uma solução analítica estimada e a solução numérica. Esta estimativa de erro é denominada de *incerteza*. A incerteza de uma solução numérica é calculada pelos estimadores de erro dos quais dois exemplos são os estimadores de Richardson e o GCI.

2.3.2 Verificação e Validação.

Várias são as possibilidades para as definições dos termos verificação e validação. Neste trabalho serão adotados os seguintes (Logan e Nitta, 2002, citando os autores):

Verificação (Roache, 1988): Resolver corretamente as equações.

Verificação de um Código (Cafeo e Roache, 2002): Processo que determina o quanto um código computacional representa precisamente as equações matemáticas.

Verificação de um Cálculo (Cafeo e Roache, 2002): Processo que determina o quão o cálculo computacional de um problema de interesse representa precisamente as soluções de um modelo matemático de equações.

A verificação assegura não apenas que respostas corretas terão sido obtidas de um código, mas também que usuários podem inferir os mesmos dados de entrada obtendo as mesmas respostas corretas. Portanto, a verificação deve ser um esforço prioritário e automatizado (Logan e Nitta, 2002).

Note-se que neste trabalho se realizará apenas a verificação do cálculo, já que a do *software* em estudo é bastante maior que o escopo deste trabalho.

Validação (Roache, 1998): Resolver as equações corretas.

Validação (AIAA, 1998): Processo de determinação do grau em que um modelo é preciso na representação do mundo real da perspectiva da intenção de uso do modelo.

Modelo Validado (Cafeo e Roache, 2002): é um modelo que tem os limites de confiança na saída. Um modelo validado tem as seguintes características:

- A quantidade de interesse;
- Uma estimativa da variação da quantidade de interesse;
- Um conjunto de limites de confiança.

2.3.3 Malhas Estruturadas e Não-Estruturadas.

Por último, porém não menos importante, ficou a definição dos tipos de malha que podem ser adotados para a discretização de um domínio qualquer. São elas (Maliska, 2004):

Malhas Estruturadas: quando os volumes de controle são obtidos com uma discretização que segue um sistema de coordenadas globais. Os volumes da malha possuem uma determinada lei de construção e sempre o mesmo número de vizinhos. Normalmente isto implica na utilização de uma numeração ordenada a fim de se obter matrizes diagonais (tri, penta e heptadiagonais para problemas uni, bi e tridimensionais, respectivamente)

possibilitando o uso de *solvers* mais eficientes para a solução do problema. Podem ser divididas em duas classes:

Cartesianas: quando seguem o sistema coordenado cartesiano (Figura 1.2(b));

Generalizada: quando seguem um sistema coordenado generalizado, normalmente coincidente com a fronteira do domínio (Figura 1.2(a)).

Malhas Não-Estruturadas: são aquelas malhas que não obedecem a nenhuma lei de construção e onde os volumes de controle não se alinham com um determinado sistema de coordenadas. Elas apresentam como grande atrativo a facilidade de adaptatividade e discretização de geometrias irregulares com cantos e saliências. Entretanto apresentam a dificuldade de ordenação o que dá origem a matrizes mais esparsas o que requer maior tempo computacional e algoritmos de resolução do sistema de equações mais elaborados e, normalmente, recursivos (Figura 1.2(c)).

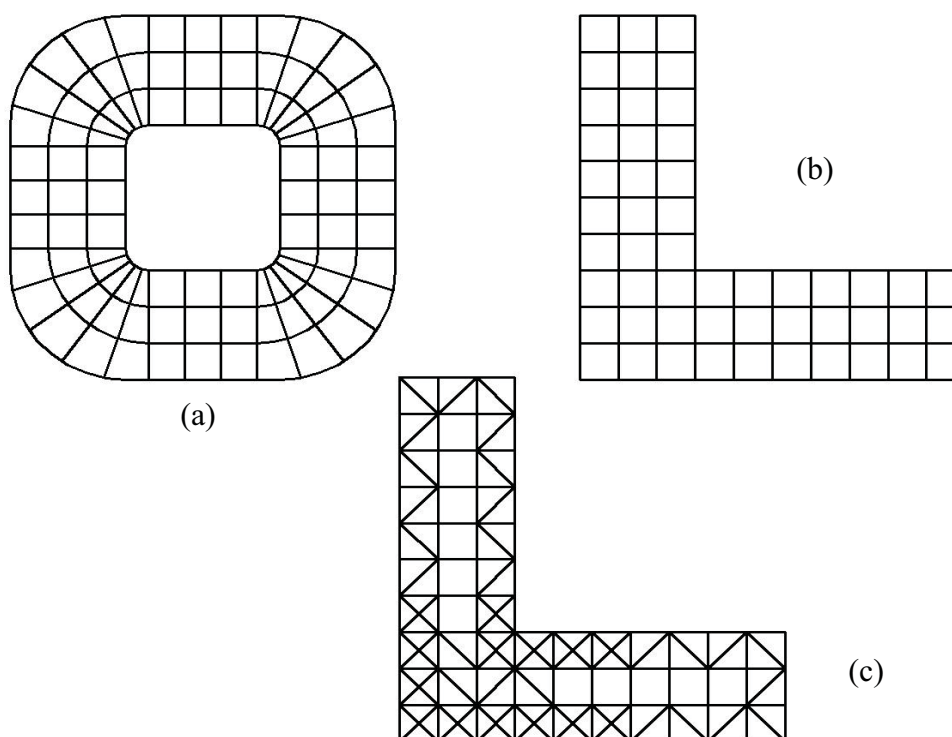


Figura 1.2 Exemplos de discretização estruturada generalizada (a), cartesiana (b) e não-estruturada com dois tipos de elementos (c).

1.5 A Estrutura do Trabalho.

Este trabalho está dividido em mais quatro capítulos, a saber, obedecendo à numeração dos próprios capítulos:

2. Revisão Bibliográfica: Apresenta-se a fundamentação teórica e matemática do trabalho sendo dividida em quatro partes:
 - Equações governantes;
 - Método numérico;
 - O CFX;
 - Os métodos para a estimativa de incerteza numérica Extrapolação de Richardson e *Grid Convergence Index - GCI*;
3. O Problema da Cavidade Quadrada: Apresenta-se, neste capítulo, a solução do problema da cavidade quadrada conforme Shih, *et al* (1989), comparando os resultados obtidos com a solução analítica do problema e o comportamento das incertezas numéricas.
4. O Problema do Escoamento entre Duas Placas Planas Paralelas;
5. Conclusão: a partir dos objetivos iniciais mostrados neste capítulo e dos resultados dos problemas estudados faz-se uma conclusão geral do trabalho, indicando outras possibilidades de estudo a partir deste.

Além dos capítulos acima descritos, coloca-se no Apêndice um estudo dos erros de discretização para o Escoamento sobre uma Placa Plana. Estes resultados têm um caráter apenas ilustrativo uma vez que a solução numérica obtida e a solução de referência utilizada (Solução de Blasius) não são compatíveis. Isto porque a solução de Blasius, por suas considerações, não conserva a massa o que é uma premissa básica do *software* utilizado. Assim a comparação dos resultados e, portanto, as análises referentes à eficiência dos estimadores de erro Extrapolação de Richardson e GCI não é possível.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Introdução

É abordada, neste capítulo, toda a teoria envolvida nas análises que são mostradas nos capítulos que se seguem. Também mostra-se como o *software* utilizado, o CFX, funciona e a metodologia de cálculo da incerteza numérica envolvida. Por isto o capítulo é dividido em quatro partes principais:

- Equações governantes;
- Método numérico;
- O CFX;
- Os métodos para a estimativa de incerteza numérica Extrapolação de Richardson e *Grid Convergence Index - GCI*.

2.2 Equações Governantes

Todos os escoamentos obedecem às leis de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia. Estas leis são, normalmente, descritas em sua forma diferencial a qual é aplicável a um ponto, podendo ser também descritas em sua forma integral aplicável a uma região (Kundu, 1990). Assim, é possível descrever qualquer escoamento a partir destas equações.

É apresentada, neste trabalho, apenas a descrição diferencial destas equações, primeiramente na forma completa e depois são feitas as simplificações necessárias para os problemas que são discutidos nos capítulos seguintes. A dedução destas não faz parte do escopo deste trabalho podendo ser facilmente encontradas em livros básicos de Mecânica dos Fluidos como Kundu (1990), Spurk (1997) e Fox e McDonald (2000), apenas para citar alguns exemplos.

Todos os problemas a serem resolvidos têm as seguintes características comuns:

- Regime permanente;
- Bidimensionais;
- Incompressíveis;
- Propriedades dos fluidos (massa específica e viscosidade) constantes;
- Efeitos gravitacionais podem ser desprezados.

As equações de conservação para escoamentos laminares, em notação indicial, ficam:

- Conservação da massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad (2.1)$$

- Conservação da quantidade de movimento linear

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right] \right\} + F_i \quad (2.2)$$

- Equação de transporte de um escalar

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \Theta) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \Theta) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \Gamma \left[\frac{\partial \Theta}{\partial x_j} \right] \right\} + S_\Theta \quad (2.3)$$

A aplicação das características acima implica em:

- Bidimensionais: apenas as componentes u e v das velocidades e x e y dos deslocamentos são necessários;
- Incompressíveis: deformações volumétricas nulas, ou seja:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.4)$$

- Propriedades dos fluidos (massa específica, viscosidade e difusividade) constantes: estas podem ser postas fora das derivadas;
- Efeitos gravitacionais podem ser desprezados: as forças de corpo podem ser desprezadas, isto não inclui termos fontes.

Com isto as equações (2.1) a (2.3) se tornam:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.5)$$

$$U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P_i}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right] + S_{U_i} \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial U_i \Theta}{\partial x_i} = -\alpha \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \Theta}{\partial x_i} \right] + S_{\Theta} \quad (2.7)$$

onde

$$\alpha = \frac{\Gamma}{\rho} \quad (2.8)$$

Dependendo do caso as equações (2.5) a (2.7) devem ser resolvidas simultaneamente (problemas de convecção natural, por exemplo) acoplando os campos de velocidade, pressão e de um escalar (temperatura, no nosso exemplo). Este acoplamento pode ser realizado por diversos métodos tais como o SIMPLE e o SIMPLER. Uma descrição básica do acoplamento pressão-velocidade para o Método dos Volumes Finitos baseados em Elementos é mostrada na seção 2.3.3. Para uma descrição mais detalhada destes recomenda-se Patankar (1980), Ferziger e Perić (2002) e Maliska (2004).

2.3 Método Numérico.

Soluções analíticas para as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e de transporte de escalares são conhecidas apenas para escoamentos bastante simples e com condições de contorno específicas. No entanto, a solução aproximada destes problemas a partir de equações algébricas próprias, que podem ser resolvidas por métodos numéricos, é possível. Para isto é necessário que tanto o domínio geométrico quanto as equações sejam discretizados. Este processo será descrito nas seções que se seguem.

2.3.1 Discretização do Domínio de Cálculo

No EbFVM (do inglês *Element-based Finite Volume Method*, ou Método dos Volumes Finitos Baseados em Elementos; Maliska, 2004) os elementos são criados a partir da união dos pontos distribuídos no domínio de cálculo, os nós, enquanto que os volumes de controle

são criados em torno destes pontos com contribuições de diversos elementos (Souza, 2000)¹. Por isto faremos aqui uma nova divisão: primeiramente se mostrará a obtenção dos valores das propriedades dentro de um elemento e depois as parcelas dos vários elementos dentro do volume.

2.3.1.1 Elemento

O conceito de elemento não é tradicionalmente usado no método dos volumes finitos, pois, para este método, basta, para efeito de integração, definir os volumes de controle. Entretanto, a utilização de elementos, como feito no método dos elementos finitos, para depois relacionar os volumes de controle aos elementos, permite uma série de generalizações o que resulta em um algoritmo que pode ser empregado para qualquer tipo de malha, estruturada ou não. (Maliska, 2004)

Apresenta-se, neste texto, uma forma de obtenção de uma propriedade qualquer e suas derivadas para um elemento triangular. A generalização para elementos tridimensionais apresenta dificuldades de natureza geométrica e computacional, mas o conceito continua o mesmo.

O gerador de malha fornece as coordenadas dos vértices e suas conexões com os nós adjacentes. Na Figura 2.1 é mostrada uma malha puramente triangular com os elementos 123, 134, 145, 156, 167, 178 e 182, também são mostrados os volumes A e B, a sua obtenção será explicada na próxima seção. Os nós estão identificados pelos círculos negros.

Agora, seja o elemento triangular qualquer 123, ele pode ser mapeado em um elemento triangular no plano de referência (ξ, η) como na Figura 2.2 a partir de funções de interpolação $N(\xi, \eta)$ com as seguintes propriedades (Ansys, 2004):

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nós}}} N_i(\xi, \eta) = 1 \quad (2.9)$$

$$\text{No nó } j, N_j = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.10)$$

¹ O algoritmo de geração de malha utilizado nas simulações deste trabalho é brevemente descrito na seção 2.4.2.

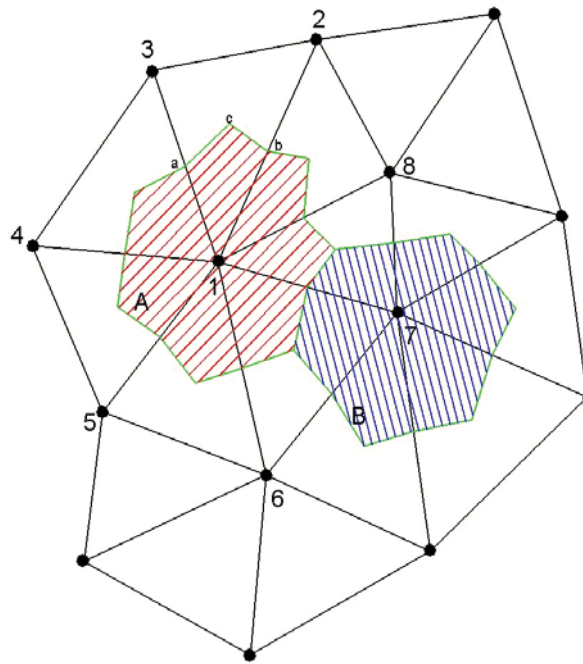


Figura 2.1 Formação dos elementos por triangulação geral e os volumes de contorno (em verde) pelo método das medianas

Para elementos triangulares, com a configuração no plano (ξ, η) mostrada na Figura 2.2, as funções de interpolação são:

$$N_1 = (1-\eta)(1-\xi) \quad (2.11)$$

$$N_2 = (1+\eta)\xi \quad (2.12)$$

$$N_3 = \eta(1+\xi) \quad (2.13)$$

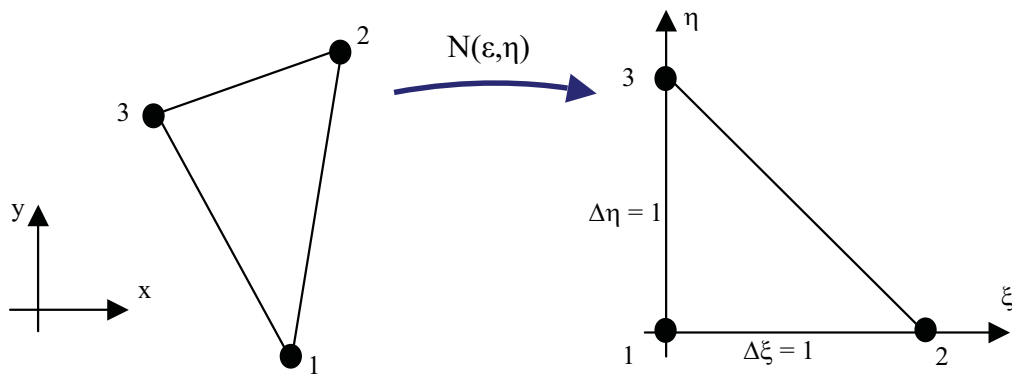


Figura 2.2 Mapeamento do elemento 123 no elemento de referência.

Assim, uma propriedade escalar qualquer, ϕ , pode ser interpolada dentro do elemento através de uma combinação linear das funções de interpolação, ou seja

$$\phi(\zeta, \eta) = \sum_{i=1}^3 N_i(\zeta, \eta) \phi_i \quad (2.14)$$

Como estas funções são contínuas dentro dos elementos, é possível diferenciá-las de tal maneira que:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \phi_i \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \phi_i \quad (2.16)$$

onde as derivadas da função de interpolação em relação às coordenadas ξ e η são obtidas por simples diferenciação das equações (2.11) a (2.13). Como alguns gradientes de propriedades também são necessários, é importante sabermos como a derivação da função ϕ em relação às coordenadas x e y é obtida. Considerando ainda a continuidade da função ϕ no elemento, estas podem ser diferenciadas resultando em:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial N_i}{\partial x} \phi_i \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial N_i}{\partial y} \phi_i \quad (2.18)$$

Entretanto, as derivadas das funções de interpolação N em relação a x e y também são desconhecidas. Para obtê-las utiliza-se a Regra da Cadeia, chegando a um sistema de equações cuja solução é:

$$\frac{\partial N_i}{\partial x} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \zeta} \right) \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial y} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial N_i}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \quad (2.20)$$

onde J é o jacobiano da transformação, dado por:

$$J = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (2.21)$$

As derivadas de x e y em relação de ξ e η são facilmente obtidas a partir da diferenciação mostrada pelas equações (2.15) e (2.16).

2.3.1.2 Volume de Controle

A criação dos volumes, conforme já dito, é feita com base nos elementos. Existem duas classes básicas de métodos de criação dos volumes, baseadas na relatividade geométrica entre o volume de controle (VC) e o elemento (Maliska, 2004):

- *Cell Center*: o centro do volume de controle coincide com o centro do elemento e as variáveis a serem determinadas ficam armazenadas no centro do VC. Esta é a abordagem clássica do Método dos Volumes Finitos para malhas estruturadas e não será abordada com mais profundidade neste trabalho;
- *Cell Vertex*: o centro do VC fica no vértice do elemento, ou seja, junto a um nó. Neste caso as variáveis a serem determinadas ficam armazenadas nos nós e o VC, definido agora como um ente geométrico onde serão realizados os balanços, é formado por partes (
- Figura 2.1) dos elementos vizinhos aos quais o nó onde a incógnita está sendo armazenada pertence. O volume de controle é construído ligando-se os centróides dos elementos ao ponto médio de suas faces, método conhecido como das medianas. Os pontos de integração, necessários para o cálculo do balanço, são colocados a meia-distância entre o centróide e a face do elemento, sobre a linha que os une.

Na Figura 2.3 é mostrado um elemento triangular sub-dividido em três subvolumes de controle (SVC). No elemento da Figura 2.3, apenas o SVC 1 entrará no balanço do volume centrado em 1, a partir dos pontos de integração PI2 e PI3. Os demais entrarão no balanço dos seus respectivos nós.

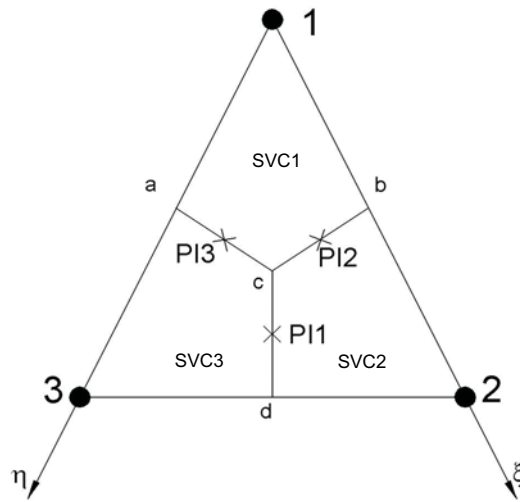


Figura 2.3 Elemento finito e seus pontos de integração. Note que apenas os pontos de integração PI2 e PI3 contribuem para o volume centrado no nó 1.

Conhece-se, até aqui, a forma de se obter qualquer grandeza a partir das contribuições de cada nó, no entanto não se conhece a forma de cálculo de um dos entes geométricos relativos aos volumes de controle, ou seja, a sua área.

A área física do elemento é dada por uma relação entre o jacobiano e a área do elemento no plano (ξ, η) . Para o elemento triangular da Figura 2.2 tem-se que:

$$\Delta A = \frac{1}{2} |J| \Delta \eta \Delta \xi = \frac{1}{2} |J| \quad (2.22)$$

O SVC 1 da Figura 2.3 é, na verdade, um quadrilátero criado a partir da união dos centróides com o ponto médio das arestas dos elementos e metade das arestas, assim a sua área é obtida através da integração da função de área entre 0 e $\frac{1}{2}$ em ambas as direções, o que resulta em:

$$A_{SVC1} = \int_0^{\frac{1}{2}} \int_0^{\frac{1}{2}} |J| d\eta d\xi \quad (2.23)$$

Note-se que a constante $\frac{1}{2}$ foi retirada do cálculo uma vez que estamos calculando a área de um quadrilátero e não de um triângulo. A área total de um volume de controle é a soma das áreas dos SVC's que compõem este volume. Ou seja,

$$A_{VC} = \sum_{i=1}^{N_{SVC}} A_{SVCi} \quad (2.24)$$

Uma vez que se têm todos os entes definidos pode-se agora passar a discretização das equações governantes do problema descritas na parte 2.2 deste capítulo.

2.3.2 Discretização das Equações Governantes

Considere-se as equações (2.5) a (2.7). Estas equações devem ser integradas sobre um volume de controle e o Teorema da Divergência de Gauss é aplicado para a conversão das integrais de volume em integrais de superfície. Assim, as equações (2.5) a (2.7) se tornam:

$$\int_S U_j dn_j = 0 \quad (2.25)$$

$$\int_S U_j U_i dn_j = - \int_S \frac{1}{\rho} P dn_j + \int_S v \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S_u dV \quad (2.26)$$

$$\int_S U_j \theta dn_j = \int_S \alpha \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_V S_\theta dV \quad (2.27)$$

onde V e S são, respectivamente, o volume e a área das regiões de integração e dn_j são as diferenciais das componentes cartesianas o vetor normal da superfície, definidas por:

$$dn_1 = dy \quad (2.28)$$

$$dn_2 = -dx$$

As integrais de superfície representam as integrações de fluxos enquanto que as integrais no volume representam termos fonte.

O primeiro passo na solução numérica destas equações, ainda contínuas, é aproximá-las usando funções discretas. Considerando, agora o elemento mostrado na Figura 2.3, os fluxos de superfície são representados discretamente pela avaliação destes termos diretamente

nos pontos de integração (PI), enquanto os termos fonte devem ser avaliados em todo o sub-volume de controle.

Assim, as equações discretizadas podem ser escritas como:

$$\sum_{k=1}^{N_{pi}} (\rho U_j \Delta n_j)_k = 0 \quad (2.29)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{pi}} \dot{m}_k(U_j)_k = -\sum_{k=1}^{N_{pi}} \left(\frac{1}{\rho} P \Delta n_i \right)_k + \sum_{k=1}^{N_{pi}} \left[v \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right]_k + \bar{S}_u V \quad (2.30)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{pi}} \dot{m}_k(\theta)_k = \sum_{k=1}^{N_{pi}} \left[\alpha \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) \Delta n_j \right]_k + \bar{S}_\theta V \quad (2.31)$$

onde o fluxo de massa que passa no ponto de integração k , ou seja, o fluxo de massa que passa pela aresta do volume de controle, é dado por:

$$\dot{m}_k = (U_j \Delta n_j)_k \quad (2.32)$$

Como os cálculos serão sempre realizados para os sub-volumes de controle, o termo fonte deve ser linearizado² na forma, para uma grandeza qualquer Φ :

$$S_\Phi = S_p^\Phi \Phi_p + S_c^\Phi \quad (2.33)$$

Olhando para as equações (2.29) a (2.31), pode-se ver que todos os fluxos estão referidos aos pontos de integração. No entanto, para criar uma equação aproximada, é necessário relacionar estes fluxos às variáveis nos pontos nodais.

Para esta tarefa, nos termos difusivo e de pressão é possível utilizarmos as funções de interpolação lineares (ou funções de forma) e suas derivadas mostradas no item anterior. Porém, o termo advectivo, devido à importância da velocidade no transporte das variáveis no domínio, não é possível a utilização destas funções de forma. Isto porque a aproximação resultante seria sempre linear, o que é, devido aos problemas de oscilação numérica, inapropriada para a modelação destes termos (Maliska, 2004).

Se mostra, agora, a forma de aproximação dos termos advectivos para uma variável ϕ qualquer. Em seguida se mostrará a forma final dos termos de pressão e difusivo e finalmente, a equação completa discretizada.

2.3.2.1 Funções de Interpolação para os Termos Advectivos de ϕ .

Seja o elemento da Figura 2.4 e uma linha de corrente que passa pelo ponto de integração PI2 e sobre o qual estão identificados os valores ϕ_m , ϕ_j e ϕ_{pi2} . Pode-se expandir o valor de ϕ_{pi2} qualquer em torno do seu valor a montante através da Série de Taylor como

$$\phi_{pi2} = \phi_m + \left[\frac{\partial \phi}{\partial s} \right]_{pi} ds + \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial s^2} \right]_{pi} ds^2 + \dots \quad (2.34)$$

onde ϕ_m é obtido por interpolação linear dos valores nos pontos nodais da aresta cortada pela linha de corrente (seguimento 1-3 na Figura 2.4). Os esquemas de interpolação normalmente usam (2.34) da seguinte maneira:

$$\phi_{pi2} = \phi_m + \beta \frac{\Delta \phi}{\Delta \eta} \cdot \Delta \eta \quad (2.35)$$

onde β é um coeficiente empregado para pesar a participação do termo de segunda ordem no cálculo da difusão. Alguns autores o denominam de “Fator de Mistura” ou “Fator de Peso”³. Por exemplo, se $\beta = 1$ ter-se-á, formalmente um esquema de segunda ordem o qual não é recomendado para problemas advectivos-dominantes devido ao problema de oscilação numérica que pode ocorrer (Ansys, 2004). Caso $\beta = 0$: se terá um esquema de primeira ordem, o UDS (*Upstream Differencing Scheme*)⁴, o qual proporciona estabilidade numérica porém introduz uma excessiva difusão numérica. Adotou-se, neste trabalho, a denominação original em inglês do termo, ou seja, *Blend Factor*, ou BF.

² O procedimento de linearização do termo fonte pode ser visto em Maliska (2004).

³ Os termos são traduções possíveis para o termo em inglês *Blend Factor*.

⁴ Foi encontrada na literatura a descrição de *Upwind Differencing Scheme* para UDS.

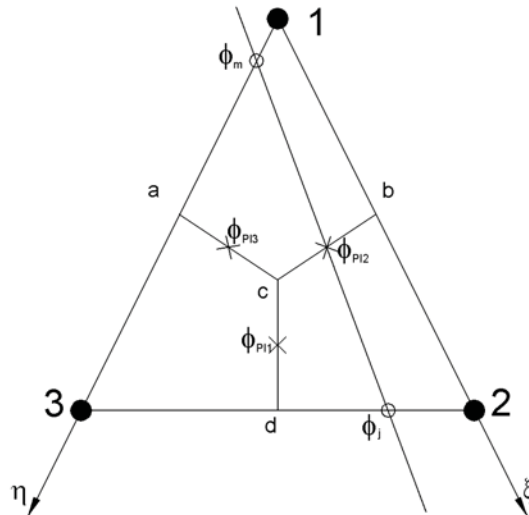


Figura 2.4 Linha de fluxo passando pelo ponto de integração 2 (PI2) do elemento centrado no nó 1.

2.3.2.2 Forma Final dos Termos de Avaliados nos Pontos de Integração.

Dos termos a serem avaliados nos pontos de integração ainda é necessário determinar a pressão e o termo difusivo nos pontos de integração em termos dos pontos nodais utilizando as funções de forma.

A pressão nos pontos de integração fica, então:

$$P_{pi} = \sum_i N_i(\xi_{pi}, \eta_{pi}) P_i \quad (2.36)$$

e o termo difusivo para uma variável ϕ qualquer como:

$$\sum_{k=1}^{N_{pi}} \left[\alpha^\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \Delta n_j \right]_k = \sum_{pi} \left(\alpha^\phi \sum_{l=1}^3 \frac{\partial N_l}{\partial x} \phi_l \Delta y - \alpha^\phi \sum_{l=1}^3 \frac{\partial N_l}{\partial y} \phi_l \Delta x \right)_k \quad (2.37)$$

Com isto se fecha a dedução de todos os termos da equação (2.31), a qual pode ser escrita, para o volume de controle centrado em 1, se mostrando apenas as contribuições do SVC 1, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
& \dot{m}_{pi2}(\theta)_{pi2} + \dot{m}_{pi3}(\theta)_{pi3} - \left[\alpha^\theta \sum_{l=1}^4 \frac{\partial N_l}{\partial x} \theta_l \Delta y \right]_{pi2} - \left[\alpha^\theta \sum_{l=1}^4 \frac{\partial N_l}{\partial x} \theta_l \Delta y \right]_{pi3} \\
& + \left[\alpha^\theta \sum_{l=1}^4 \frac{\partial N_l}{\partial y} \theta_l \Delta x \right]_{pi2} + \left[\alpha^\theta \sum_{l=1}^4 \frac{\partial N_l}{\partial y} \theta_l \Delta x \right]_{pi4} - S_p \theta_2 V_{SVC1} - S_c V_{SVC1} \\
& + \text{Contribuições de outros SVC's} = 0
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Colocando os termos de “Contribuições de outros SVC's” dentro de um somatório, podemos escrever a equação (2.38) acima da seguinte maneira:

$$A_p \theta_p = \sum_{Vi} A_{Vi} \theta_{Vi} + B \tag{2.39}$$

A equação aproximada para as componentes do vetor velocidade (equação de conservação da quantidade de movimento linear – eq. (2.30)) não terá a forma de (2.39) uma vez que aparecerão na mesma equação, implicitamente, todas as componentes do vetor velocidade e a pressão. Isto será tratado na seção que se segue.

2.3.3 Acoplamento Pressão-Velocidade.

Quando as equações de conservação são escritas na forma de (2.39) significa que apenas uma das variáveis foi escolhida para ser tratada implicitamente, com as outras variáveis sendo colocadas no termo fonte e, portanto, sendo tratadas de forma explícita. Com isto o sistema de equações a ser resolvido tem a seguinte forma, para uma situação bidimensional:

$$\begin{aligned}
A^u u &= B^u \\
A^v v &= B^v \\
A^P P &= B^P \\
A^\varphi \varphi &= B^\varphi
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Que é resolvido de forma segregada, tratando as não-linearidades e o acoplamento através de iterações nas matrizes de coeficientes, que são função das variáveis. Se o Método

SIMPLE for aplicado, deve-se criar equações de correção da velocidade para os pontos de integração substituindo-as na equação de conservação da massa para gerar uma equação de correção de pressão. Com esta solução corrigem-se os campos de velocidade, para que satisfaçam a conservação de massa, e de pressão. Uma descrição completa do Método SIMPLE e algumas de suas variações pode ser vistas em Maliska (2004) e Patankar (1980).

Em Rhie e Chow (1982) é apresentada uma outra metodologia de solução segregada do sistema (2.40), bastante similar ao SIMPLE, onde a correção da pressão é obtida a partir das equações de diferenças finitas para a equação de conservação da quantidade de movimento linear.

O CFX utiliza uma modificação da metodologia de Rhie e Chow (1982) na qual a equação da continuidade é uma aproximação por diferença central para a derivada de primeira ordem da velocidade alterada por uma derivada de ordem 4 da pressão a qual atua para redistribuir a pressão. Isto resulta na seguinte representação unidimensional (Ansys, 2004):

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^3 A}{4\dot{m}} \left(\frac{\partial^4 p}{\partial x^4}\right)_i = 0 \quad (2.41)$$

Onde

$$\dot{m} = \rho U_j \Delta n_j \quad (2.41a)$$

Note-se que com o refinamento da malha, o módulo do segundo termo em (2.41) vai a zero com uma taxa de Δx^3 relativo à derivada de velocidade, o que indica que a forma diferencial desejada para a equação da continuidade é rapidamente recuperada.

2.3.4 Aplicação das Condições de Contorno.

A aplicação de condições de contorno em um método de volumes finitos se resume em especificar os fluxos difusivo e advectivo nas fronteiras e substituí-los nas equações de conservação integradas, como a equação (2.31), para uma propriedade θ , qualquer. (Maliska, 2004).

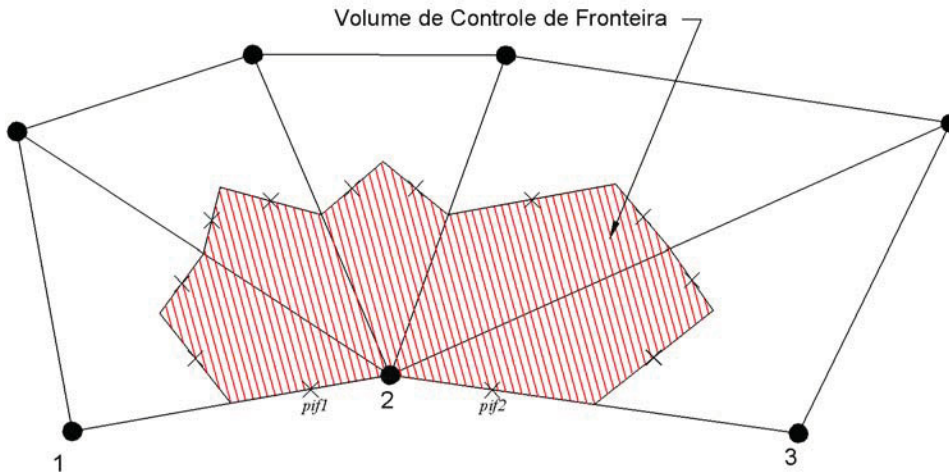


Figura 2.5 Aplicação de condição de contorno em um volume de controle de fronteira, centrado no nó 2.

A Figura 2.5 mostra um volume de fronteira, onde notamos que dois pontos de integração deste volume parcial estão sobre a fronteira. Nestes pontos é necessário especificar os fluxos advectivos e difusivos através, respectivamente, de:

$$Q_{pif}^A = \sum_{pif} \dot{m}_{pif} \theta_{pif} \quad (2.42)$$

$$Q_{pif}^D = \sum_{pif} \left(\Gamma^\theta \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{pif} \quad (2.43)$$

onde Γ^θ é a difusividade da propriedade θ e \dot{m}_{pif} é o fluxo de massa no ponto de integração da fronteira.

2.3.3.1 Fronteira Impermeável – θ Prescrito.

Quando a fronteira é impermeável, não existe fluxo advectivo, logo,

$$Q_{pif}^A = 0 \quad (2.44)$$

Neste caso, são conhecidos os valores de θ nos pontos nodais e o fluxo difusivo é determinado por:

$$Q_{pif}^D = \sum_{pif} \left[\left(\sum_{k=1}^3 \frac{\partial N_k}{\partial x_j} \theta_k \right) \Delta n_j \right]_{pif} \quad (2.45)$$

em que dois dos quatro valores de θ nos pontos nodais são conhecidos pelas condições de contorno. As equações (2.44) e (2.45) são então levadas à equação (2.31), somando-se as contribuições dos outros pontos de integração para formar a equação aproximada para o volume na forma de (2.39).

2.3.3.2 Fronteira Impermeável – Fluxo de θ Prescrito.

Para este caso ter-se-á o seguinte par de equações para os fluxos advectivo e difusivo:

$$Q_{pif}^A = 0 \quad (2.46)$$

$$Q_{pif}^D = \text{valor prescrito} \quad (2.47)$$

onde o mesmo procedimento do item anterior deve ser realizado.

2.3.3.3 Fronteira Permeável com Fluxo de Massa Entrando no Volume de Controle.

Este tipo de situação acontece quando o tamanho do domínio deveria ser grande o suficiente para que os efeitos difusivos deixassem de se propagar, mas que, devido a necessidade de se diminuir o tamanho do domínio computacional por economia de processamento e memória, foi arbitrado de tal forma que possamos admitir que θ é conhecido. Ao se fazer isto, admite-se que existe um determinado fluxo advectivo, conhecido, entrando pela fronteira e que o valor de θ nesta fronteira é tratado como especificado. Assim,

$$Q_{pi}^A = \sum_{pif} \dot{m}_{esp} \theta_{esp} \quad (2.48)$$

$$Q_{pif}^D = 0 \quad (2.49)$$

2.3.3.4 Fronteira Permeável com Fluxo de Massa Saindo do Volume de Controle.

A condição de contorno neste caso, para qualquer variável, requer a especificação do fluxo advectivo que deixa o volume de controle, dado por:

$$Q_{pif}^A = \dot{m}_{pif} \theta_{pif} \quad (2.50)$$

Se o fluxo de massa for especificado, os valores de velocidade são conhecidos nos pontos de integração da fronteira. Se a condição de contorno não é de fluxo de massa saindo, mas, por exemplo, de pressão prescrita, a massa que sai é resultado da simulação e pode ser calculada com os valores das velocidades nos pontos nodais disponíveis. O valor de θ_{pif} também é um resultado da simulação das condições internas do domínio e pode ser determinado com os valores de θ disponíveis nos pontos nodais, observando o esquema de interpolação utilizado para os volumes internos.

Quanto ao fluxo difusivo, o mesmo procedimento do item anterior é válido aqui, ou seja os fluxos difusivos devem ser nulos uma vez que estes fluxos a jusante não afetam o escoamento a montante.

2.4 O CFX-5

O CFX-5 é um código de CFD para uso geral o qual combina um *solver* poderoso com ferramentas de pré e pós-processamento que permitem ao usuário definir, resolver e analisar os resultados de simulações de elevada complexidade geométrica e física.

O pré-processador CFX-Pre permite a utilização de malhas advindas de diferentes *softwares* de geração de malha e de diferentes tipos, desde malhas estruturadas a não estruturadas com elementos de diversas formas geométricas. Isto permite ao usuário escolher o melhor tipo de malha para o problema em estudo. Isto é possível uma vez que o CFX-5 utiliza em seu *solver* uma forma generalizada do Método de Volumes Finitos Baseado em Elementos, descrito no item anterior.

O pós-processador CFX-Post permite ao usuário analisar qualitativamente os resultados obtidos e, para análises mais aprofundadas como as realizadas neste trabalho, permite que estes resultados sejam gravados em arquivos texto de forma organizada, ou ainda, permite que alguns cálculos de variáveis definidas pelo usuário sejam realizados dentro do próprio pós-processador.

2.4.1 A Estrutura do CFX-5.

O CFX-5 é constituído de cinco módulos os quais são unidos pelo fluxo de informação necessário para se realizar uma análise de CFD. A Figura 2.6 mostra estes módulos e como eles se relacionam.

Nas seções que seguem são descritas as funções de cada um dos módulos sendo dada uma especial atenção ao módulo *solver*.

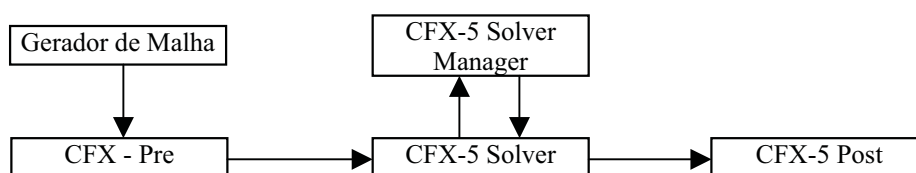


Figura 2.6 Esquema geral de funcionamento do software CFX-5

2.4.2 O Gerador de Malha.

O *software* de geração de malha utilizado foi o ICEM CFD 4.0. Este gerador de malha faz a geração de malhas tridimensionais tetraédricas a partir de um algoritmo denominado de “Abordagem Octree”, descrito abaixo (Ansys, 2003). Este algoritmo permite o refinamento da malha onde necessário, mas mantém elementos maiores onde for possível para uma computação mais rápida.

Uma vez que o “tetraedro inicial”, que envolve a geometria (Figura 2.7) completamente, for inicializado o Tetra⁵ o sub-divide até que todos os requisitos de tamanho para os elementos sejam atingidos (Figuras 2.8 e 2.9).

⁵ Tetra é o nome do módulo de geração de malhas tetraédricas no ICEM CFD 4.0, o qual também pode gerar malhas hexaédricas uniformes e não-uniformes dentro do módulo Hexa. Este módulo não estava disponível durante a realização das simulações deste trabalho para as licenças adquiridas.

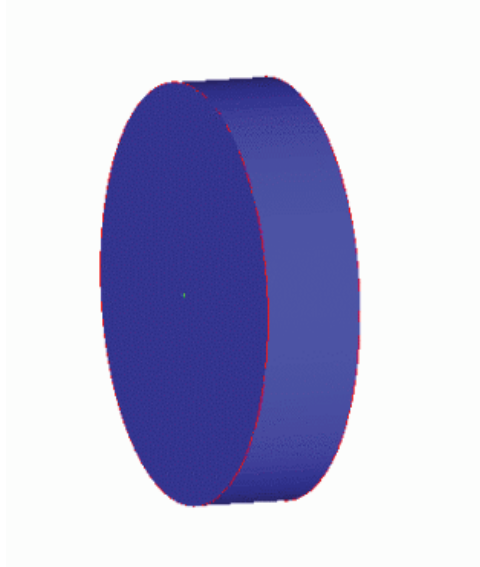


Figura 2.7 Geometria Inicial para a geração de malha.

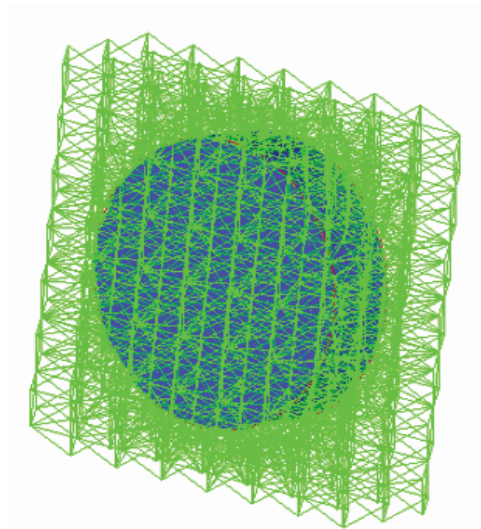


Figura 2.8 Geometria totalmente envolvida por tetraedros, vista em "wire frame".

Neste ponto, o Tetra “harmoniza” a malha de forma que os elementos que dividem um lado ou face não difiram em tamanho em mais que um fator 2.

Depois disto, o Tetra perfaz uma conformação na malha, isto é, garante que cada par de elementos adjacentes vão dividir uma face completamente.

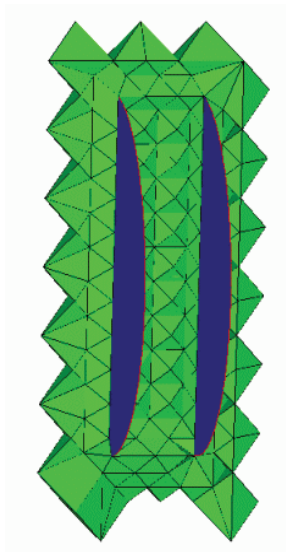


Figura 2.9 Seção transversal mostrando como os tetraedros são postos em torno da geometria.

A malha, neste ponto, ainda não concorda perfeitamente com a geometria dada, então o gerador de malha coloca novos nós junto a pontos, curvas e superfícies prescritos pela geometria (Figura 2.10).

O gerador de malha “corta fora” toda a malha que não for alcançada por um ponto definido pelo usuário sem intersecção com a superfície (Figura 2.11).

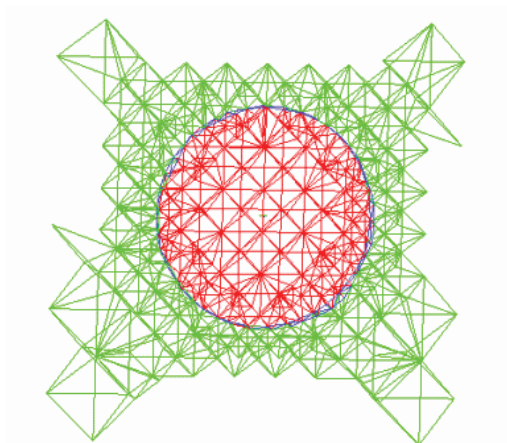


Figura 2.10 Malha antes da captura das superfícies e separação do volume útil (em azul e vermelho)

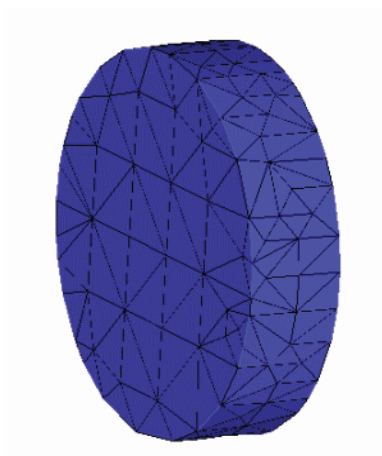


Figura 2.11 Malha após o corte dos elementos desnecessários, porém antes da suavização.

Finalmente, a malha é suavizada movendo-se ou combinando-se nós, mudando-se contornos de elementos e até mesmo, em alguns casos, apagando elementos muito ruins (Figura 2.12).

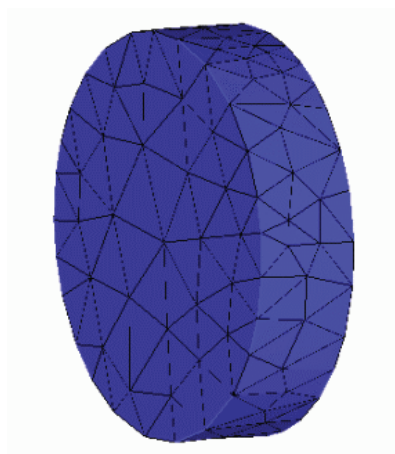


Figura 2.12 Malha final.

2.4.3 O CFX-5 Pre.

Neste módulo são definidas todas as condições físicas e matemáticas do problema em estudo, tais como, tipo de escoamento, regime, fluido em estudo, condições de contorno, valores iniciais, parâmetros do *solver* tais como resíduo máximo permitido para a convergência, número máximo de iterações para convergência, tipo de funções de interpolação dos termos advectivos, dentre outros.

O CFX-5 Pre (Figura 2.13) pode importar arquivos de malha produzidos por vários *softwares* de geração de malha tais como o ICEM-CFD, Ansys, I-DEAS e até mesmo geradores de malha não-comerciais, desde que seja feita uma rotina em linguagem C para que

o módulo possa reconhecer o padrão de armazenamento dos nós da malha. A imposição das condições de contorno segue, basicamente, o que foi descrito na seção 2.3.3 e subseções, assim como a função de interpolação dos termos advectivos segue a metodologia descrita em 2.3.2.1.

2.4.4 O CFX-5 Solver.

Para um problema especificado dentro do CFX-5 Pre, o CFX-5 Solver calcula todas as variáveis para a simulação.

Uma das mais importantes características do CFX-5 Solver é o uso de um “*Solver Acoplado*”, no qual as equações hidrodinâmicas são resolvidas como um sistema único⁶. O *Solver Acoplado* é mais rápido que um *solver* segregado e menos iterações são necessárias para se obter uma solução convergida do fluxo.

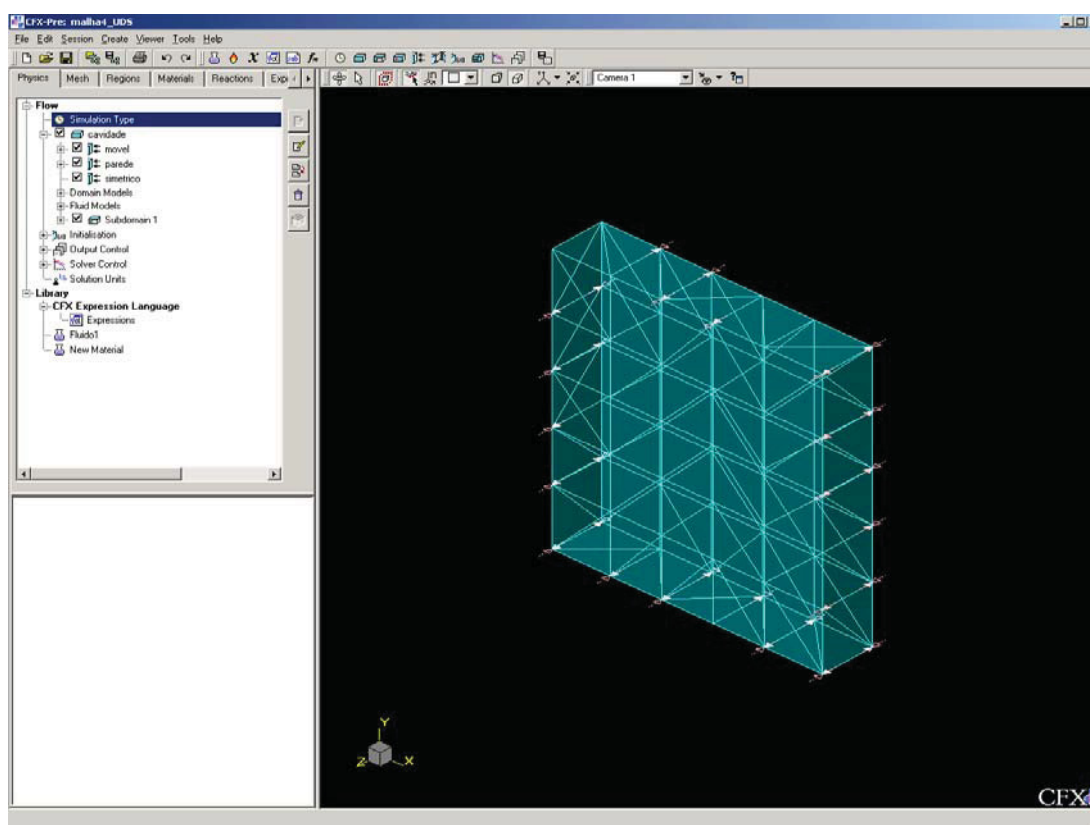


Figura 2.13 Tela do CFX-Pre mostrando uma malha com condição de contorno imposta (setas sobre as bordas do domínio)

O fluxograma da Figura 2.14 ilustra o procedimento geral de solução. A solução de cada conjunto de equações mostrados no fluxograma consiste de duas operações:

⁶Para maiores detalhes ver Maliska, 2004, pp. 337-338.

1. As equações não-lineares são linearizadas (iteração sobre os coeficientes) e montadas na matriz de solução.
2. As equações lineares são resolvidas (iteração de solução da equação) usando um Método de *Multigrid* Algébrico⁷.

A iteração no passo de tempo é controlado pelo passo de tempo físico (global) ou por um fator local ajustado para avançar a solução no tempo para uma simulação em regime permanente. Neste caso há apenas uma iteração de linearização dos coeficientes por passo de tempo. Para análises transientes, o usuário controla as iterações de passo de tempo e de coeficientes.

Ao final é calculado um resíduo bruto, $[r]$, como um “desbalanceamento” no sistema linearizado das equações discretizadas, ou seja, o quão longe de zero estão os resultados dos valores das variáveis calculados substituídos nas suas equações de transporte. Os resíduos brutos são normalizados com o propósito de monitoramento da solução e para se obter o critério de convergência.

Para cada variável da solução, θ , o resíduo normalizado é dado por:

$$[\tilde{r}_\theta] = \frac{[r_\theta]}{a_p \Delta\theta} \quad (2.51)$$

onde r_θ é o resíduo bruto do “desbalanceamento” do volume de controle, a_p é um coeficiente representativo do volume de controle e $\Delta\theta$ é uma diferença representativa da variável no domínio. O cálculo exato de a_p e de $\Delta\theta$ não será mostrado neste texto. No entanto, algumas recomendações que estão sendo seguidas pelo software são:

1. Os resíduos normalizados devem ser independentes da escolha do passo de tempo;
2. Os resíduos normalizados devem ser independentes dos valores iniciais adotados;
3. Para escoamentos multi-fásicos (não tratados neste texto) a fração volumétrica⁸ é considerada para prevenir que grandes resíduos, em locais onde esta é desprezível, possam ter grande influência na convergência do problema.

⁷Para maiores detalhes ver CFX Solver Theory Manual, 2004, pp. 242-244.

⁸Define-se fração volumétrica como sendo a proporção do volume de controle ocupada por uma determinada fase de um fluido em escoamento.

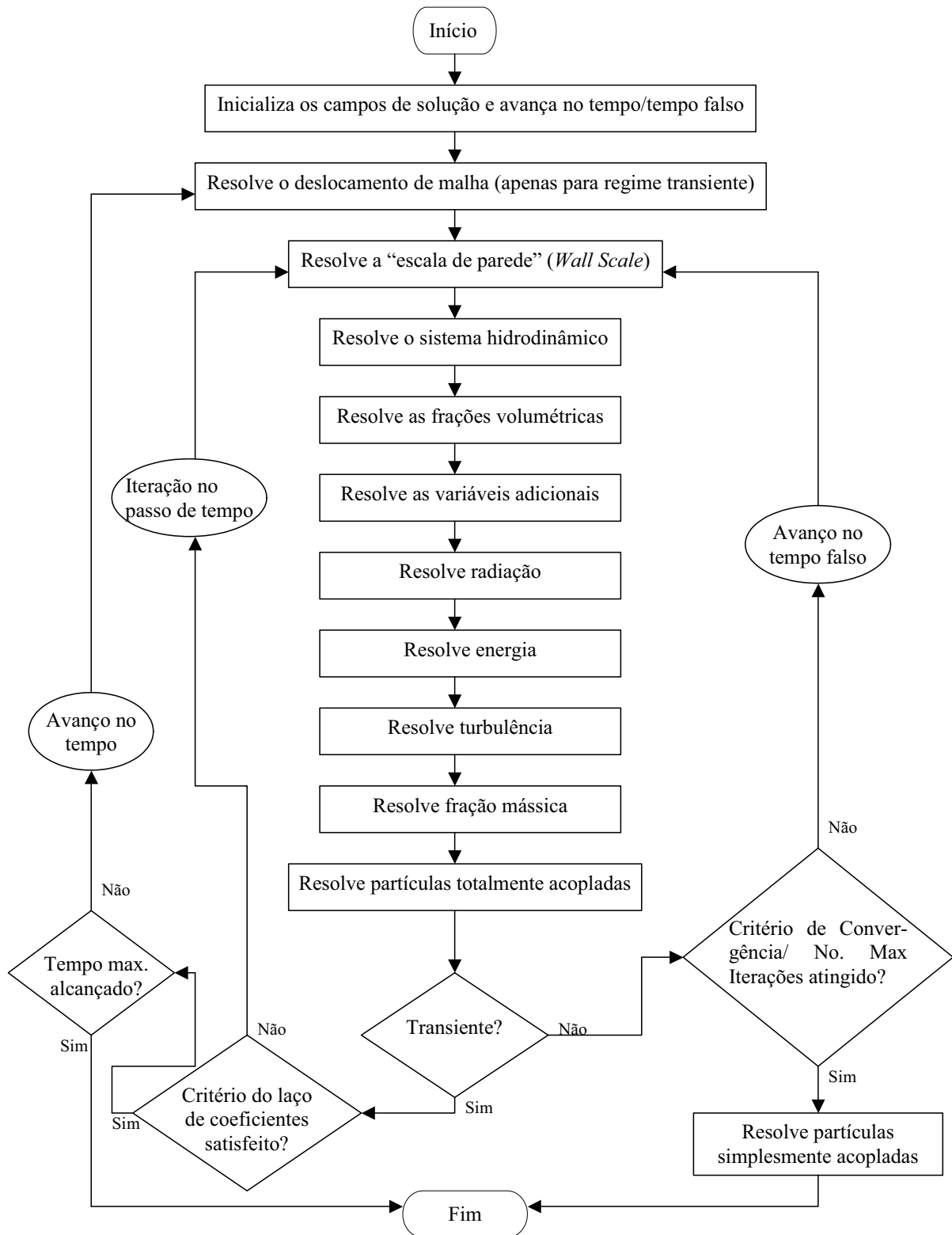


Figura 2.14 Fluxograma mostrando o funcionamento do CFX-5 Solver.

2.4.5 CFX-5 Solver Manager

O *CFX-5 Solver Manager* (Figura 2.15) é um módulo de gerenciamento da solução do problema de CFD em questão. Suas principais funções são:

- Especificar os arquivos de entrada (advindos do CFX-Pre) para o *CFX-Solver*;
- Especificar a precisão das variáveis de entrada e saída (se precisão simples, *default* do programa, ou dupla)
- Iniciar/Parar o *CFX-Solver*;
- Acompanhar o progresso (comportamento dos resíduos normalizados passo-a-passo) da solução;
- Arbitrar os parâmetros para que o *CFX-Solver* trabalhe com processamento em paralelo (mais de um processador em uma mesma máquina ou diversas máquinas em uma mesma rede).

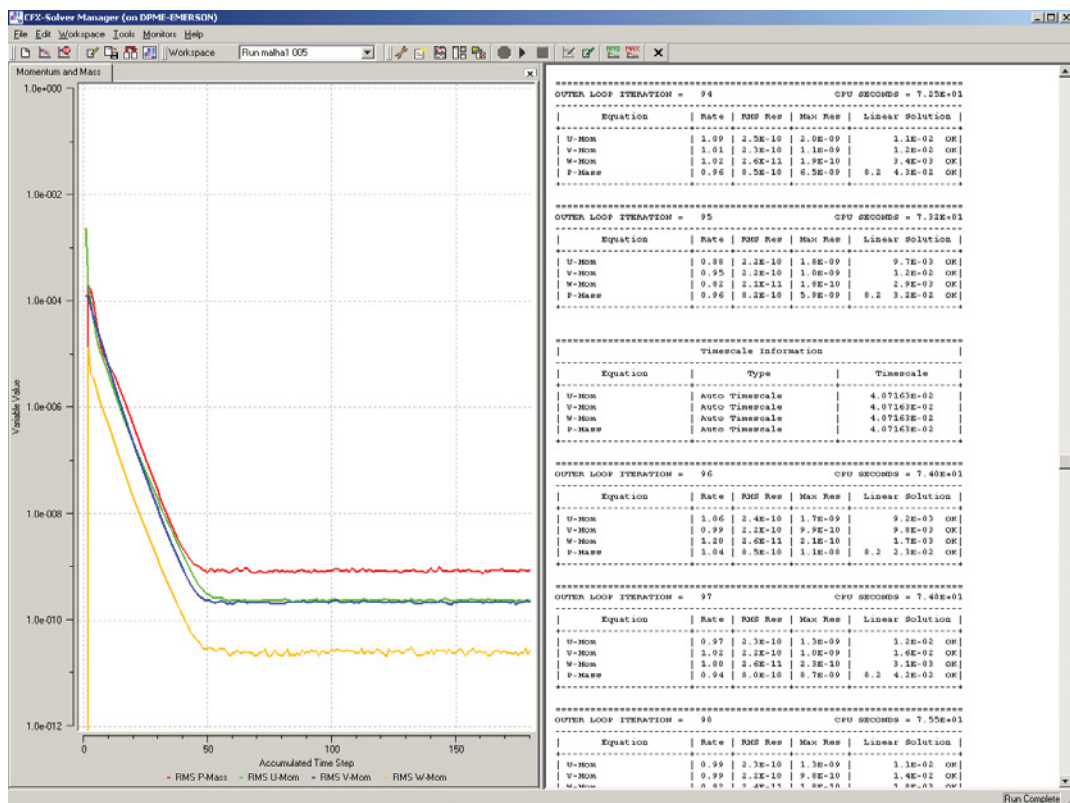


Figura 2.15 Janela do CFX-Solver Manager, mostrando a evolução dos resíduos por iteração e os resultados em algumas destas iterações.

2.4.6 CFX-5 Post

O CFX-5 Post (Figura 2.16) é provido de ferramentas iterativas para o pós-processamento gráfico da solução das simulações incluindo:

- Pós-processamento quantitativo;
- Variáveis definidas pelo usuário;
- Geração de uma grande variedade de objetos gráficos nos quais a visibilidade, transparência, cor e tipo de *renderização* das faces podem ser controlados pelo usuário;
- “*Power Syntax*” permite arquivos de sessão de pós-processamento totalmente programáveis.

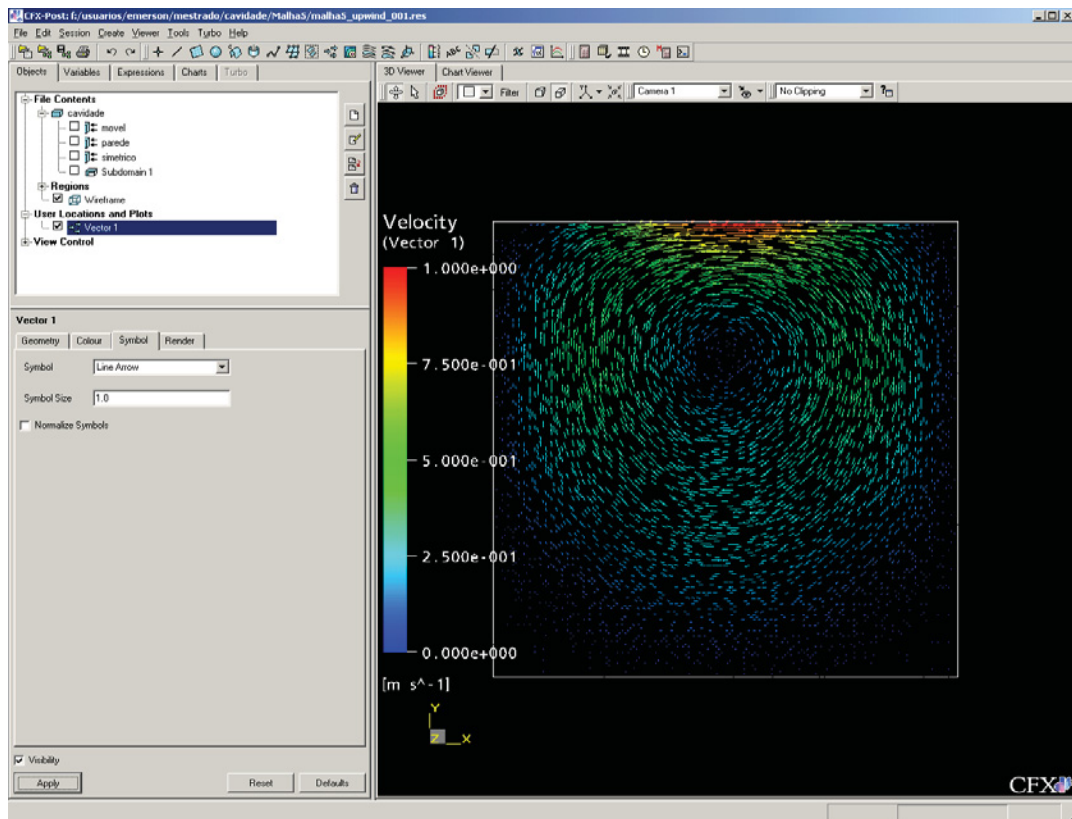


Figura 2.16 Janela do CFX-Post mostrando os resultados de uma simulação numérica.

2.5 Os Métodos para a Estimativa de Incerteza Numérica Extrapolação de Richardson e *Grid Convergence Index - GCI*

No capítulo 1 deste trabalho foram feitas diversas definições que nos serão úteis neste momento. Isto porque nesta seção será mostrada a forma de cálculo da estimativa da incerteza

numérica pelos estimadores de Richardson e GCI. Ambos os estimadores se baseiam em soluções numéricas sobre duas ou mais malhas, podendo ser, portanto classificados como estimadores *a posteriori* baseados em diversas malhas.

Antes de falarmos sobre os estimadores de erro é importante lembrar as definições de erro de discretização e incerteza numérica diferenciando-as.

Quando o erro da solução numérica é provocado apenas por erros de truncamento, a diferença entre a solução analítica exata do sistema de equações diferenciais parciais de uma variável qualquer (Φ) e a sua solução numérica (ϕ) é denominada de erro de discretização (E), ou seja:

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (2.52)$$

Uma outra forma de se calcular o erro de discretização é pela equação geral do erro de discretização (Marchi, 2001), isto é:

$$E(\phi) = C_1 h^{p_L} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + C_4 h^{p_4} + \dots \quad (2.53)$$

onde os coeficientes C_i são independentes do tamanho (h) dos elementos. Os expoentes de h para os termos não nulos na equação do erro de truncamento são chamadas de ordens verdadeiras (p_v). As ordens verdadeiras são números inteiros positivos que constituem uma série aritmética e seguem a relação $p_L < p_2 < p_3 < p_4 < \text{etc.}$ Por definição, o menor expoente de h na equação de geral do erro de discretização é chamado de ordem assintótica (p_L) sendo sempre um número maior ou igual a unidade. Quando o valor de $h \rightarrow 0$ o primeiro termo domina o erro de discretização (E). Se for feito um gráfico logarítmico de E vs. h , a inclinação da curva de E obtida em relação ao eixo das abscissas quando $h \rightarrow 0$ tende à ordem assintótica (p_L). Quanto maior esta inclinação, maior é a ordem assintótica e, por conseqüência, maior a taxa de redução do erro de discretização com o refino da malha.

O valor do erro de discretização só pode ser calculado se a solução analítica do modelo matemático do problema for conhecida. No entanto, poucos são os problemas cuja solução analítica é conhecida, ainda assim para condições de contorno bastante específicas. Assim é necessário, pelo menos, estimar um valor para esta solução analítica e, conseqüentemente, calcular-se-á o valor da estimativa do erro de discretização. Esta estimativa é chamada de incerteza (U) da solução numérica (Marchi, 2001; Metha, 1996; Chapra e Canale, 1994) e é calculada pela diferença entre a solução analítica estimada, com

uma solução numérica onde $h \rightarrow 0$, para a variável de interesse (ϕ_∞) e a sua solução numérica (ϕ), ou seja,

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2.54)$$

A incerteza de uma solução numérica é calculada com os chamados estimadores de erro dos quais se deseja que tenham as seguintes características (Marchi, 2001):

- Confiabilidade: a magnitude da incerteza deve ser maior que a magnitude do erro de discretização.
- Acurácia: quando a magnitude da incerteza é aproximadamente igual à magnitude do erro de discretização.

Assim os melhores estimadores de erro são aqueles que nos fornecem uma incerteza confiável e acurada, ou seja, uma incerteza com magnitude apenas um pouco maior que a magnitude do erro de discretização.

A seguir é mostrada uma formulação geral para os estimadores de Richardson e GCI para uma razão de refino qualquer.

2.5.1 O Estimador de Richardson

O estimador de Richardson calcula a incerteza (U_{RI}) de uma solução numérica (ϕ) através da equação (2.54) com a solução analítica estimada (ϕ_∞) através da extrapolação de Richardson generalizada (Roache, 1994) que é dada por:

$$\phi_\infty = \phi_1 + \left[\frac{\phi_1 - \phi_2}{q^{p_L} - 1} \right] \quad (2.55)$$

onde ϕ_1 e ϕ_2 são as soluções numéricas obtidas com as malhas fina e grossa, respectivamente, isto é, para malhas estruturadas com tamanhos de elementos h_1 e h_2 , respectivamente; p_L é a ordem assintótica do erro de discretização e q é a razão de refino da malha, definida, para malhas estruturadas, por:

$$q = \frac{h_2}{h_1} \quad (2.56)$$

Para malhas não-estruturadas a razão de refino, agora denominada de razão de refino efetiva (q_{ef}) é calculada, baseando-se em estudos de refinamento de malha do Método dos Elementos Finitos, por (Roache, 1994):

$$q_{ef} = \left(\frac{N_1}{N_2} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (2.57)$$

onde N_1 e N_2 são o número de elementos na malha mais fina e mais grossa, respectivamente e D é o número de dimensões do problema analisado (1, 2 ou 3).

Celik (2003), por sua vez, recomenda que seja definido um tamanho representativo para o elemento ou para a malha, h' , definido por:

$$h' = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta d_i) \right]^{\frac{1}{D}} \quad (2.58)$$

onde N é o número de elementos ou volumes usados na malha, Δd_i é o comprimento, área ou volume, caso o problema seja uni, bi ou tridimensional respectivamente, do i -ésimo elemento ou volume da malha e D é o número de dimensões do problema. A razão de refino é, então, calculada pela equação (2.56).

A equação (2.58) é para ser utilizada quando se está avaliando variáveis globais, como, por exemplo, o coeficiente de arrasto em escoamentos sobre perfis aerodinâmicos. Para variáveis locais, o tamanho da célula onde se está avaliando o comportamento da variável pode ser utilizado (Celik, 2003).

Em Celik (2003) ainda é recomendado que a razão de refino seja maior que 1,3. Este refinamento deve ser feito de forma sistemática, isto é, mesmo a malha sendo não-estruturada, o refinamento deve ser estruturado. Ainda se preconiza a utilização de elementos geometricamente semelhantes.

Substituindo-se a equação (2.55) em (2.54), o estimador de Richardson, baseado na malha mais fina⁹, resulta em:

$$U_{RI}(\phi_1) = \frac{\phi_1 - \phi_2}{q^{p_L} - 1} \quad (2.59)$$

A utilização da equação (2.57) para estimar a solução analítica (ϕ_∞), e por conseguinte o estimador de Richardson, pode levar a uma sub ou sobre-estimativa da incerteza numérica, dependendo se onde o algoritmo de refinamento da malha atuou é crítico ou não (Roache, 1994).

Um importante aspecto da extrapolação de Richardson é que ela pode ser usada tanto para variáveis locais (que dependem diretamente das coordenadas onde estão sendo avaliadas) quanto para variáveis globais, desde que métodos consistentes ou de alta ordem sejam utilizados assim como que a ordem do método é aplicável tanto globalmente quanto localmente.

Para o caso onde a ordem assintótica não é conhecida, pode-se aproximar o valor da estimativa da solução analítica do problema através da chamada ordem aparente (p_U).

2.5.2 Ordem Aparente

A ordem aparente é definida como sendo a inclinação local da curva de incerteza (U) da solução numérica (ϕ) vs. o tamanho do elemento (h) da malha num gráfico logarítmico. O cálculo da ordem aparente é feito a partir da solução numérica do problema em três diferentes malhas (ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3), denominadas de fina, grossa e super-grossa, as quais têm número de elementos N_1 , N_2 e N_3 , respectivamente, onde podem se definir duas razões de refino efetivas:

$$q_{ef21} = \left[\frac{N_2}{N_1} \right]^{\frac{1}{D}} \quad (2.60)$$

$$q_{ef32} = \left[\frac{N_3}{N_2} \right]^{\frac{1}{D}} \quad (2.61)$$

Define-se, também a partir das soluções numéricas ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 a razão de convergência da solução numérica para a solução analítica (Marchi, 2001) como sendo:

$$\Psi_U = \frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_1 - \phi_2} \quad (2.62)$$

⁹Roache (1994; 1997), faz o cálculo da estimativa de erro baseado na malha mais grosseira, entretanto esta não será utilizada neste trabalho.

Caso a razão de refino seja constante, isto é, $q_{ef_{21}} = q_{ef_{32}} = q_{ef}$ tem-se que:

$$p_U = \frac{\log(\Psi_U)}{\log(q_{ef})} \quad (2.63)$$

Caso a razão de refino não seja constante a ordem aparente pode ser calculada a partir da solução da seguinte equação (Roache, 1997; Marchi, 2001):

$$p_U = \frac{\log \left[\Psi_U \frac{q_{ef_{21}}^{p_U} - 1}{q_{ef_{32}}^{p_U} - 1} \right]}{\log(q_{ef_{21}})} \quad (2.64)$$

Note que a equação (2.64) é transcendental em p_U . Técnicas usuais para a solução deste tipo de equação (Newton-Raphson, por exemplo) podem ser aplicados, sendo possível se chegar a um resultado em que $p_U < 1$ ou até mesmo negativo. Este último caso normalmente indica que as soluções ainda não se comportam de forma assintótica (Roache, 1997).

Uma forma de solução da equação (2.64) adotada por Roache (1997) foi a substituição por iterações com um fator de relaxação (ω) na ordem de 0,5. Sendo λ o valor da iteração anterior de p_U , a equação de iteração para este método é dada por:

$$p_U = \omega\lambda + (1 - \omega) \frac{\log(\beta)}{\log q_{ef_{32}}} \quad (2.65)$$

onde

$$\beta = \Psi_U \frac{q_{ef_{32}}^{\lambda} - 1}{q_{ef_{32}}^{\lambda} - 1} \quad (2.66)$$

Assim, a estimativa da solução analítica do problema baseada na ordem aparente ($\phi_{\infty}^{p_U}$) é dada por:

$$\phi_{\infty}^{p_U} = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{q_{ef_{21}}^{p_U} - 1} \quad (2.67)$$

e a estimativa da incerteza numérica calculada pela extrapolação de Richardson também baseada na ordem aparente por:

$$U_{RI}^{p_U}(\phi_1) = \frac{\phi_1 - \phi_2}{q_{ef_{21}}^{p_U} - 1} \quad (2.68)$$

A equação (2.68) é a forma mais geral de cálculo da incerteza numérica pela extrapolação de Richardson, pois ela depende exclusivamente de relações entre dados da malha (número de elementos ou tamanho destes) e das soluções numéricas obtidas com estas malhas e destas entre si.

2.5.3 Grid Convergence Index - GCI

Apresentado primeiramente por Roache (1993; 1994 e 1997) o *Grid Convergence Index* – *GCI* tem como idéia principal relacionar o valor do erro numérico entre duas malhas ($\phi_1 - \phi_2$) obtido com um estudo de refinamento qualquer (não importando quais sejam os valores para a razão de refino e da ordem aparente (ou assintótica) usadas com o valor do erro numérico para o mesmo problema com a mesma malha fina usando os valores de ordem aparente (ou assintótica) e de razão de refino iguais a dois (Roache, 1994).

Esta relação é baseada na igualdade das estimativas de erros. Assim, o GCI pode ser demonstrado a partir do cálculo da estimativa de erro U_I a partir das equações (2.68) ou (2.59), e então calcular um erro equivalente o qual pode reproduzir o mesmo valor de U_I , mas com a ordem aparente, ou assintótica, e a razão de refino igual a dois. Este valor equivalente é proposto pelo GCI, para a solução da malha mais fina como sendo (Roache, 1998):

$$GCI^{p_U}(\phi_1) = FS \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{q^{p_U} - 1} \quad \text{ou} \quad (2.69)$$

$$GCI^{p_L}(\phi_1) = FS \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{q^{p_L} - 1} \quad (2.70)$$

onde FS é um fator de segurança e os demais valores têm as mesmas definições da extrapolação de Richardson.

Os valores para FS mais frequentemente encontrados na literatura são 1,25 (Roache, 1997; Celik, 2003, por exemplo) e 3,0 (Roache, 1997 e 1994). Existem trabalhos que propõem faixas nos valores das ordens onde os valores de 1,25 e 3,0 devem ser utilizados (Eça e Hoekstra, 2003). Neste trabalho se adotará o valor de 3,0 uma vez que este se mostra mais conservativo e conforme recomendado por Roache (1997).

2.5.4 Ordem Efetiva

A ordem efetiva (p_E) é definida como a inclinação local da curva do erro de discretização (E) da solução numérica (ϕ) vs. o tamanho (h) dos elementos da malha em um gráfico logarítmico. O seu cálculo permite verificar se, à medida que h é reduzido, a ordem do erro de discretização das soluções numéricas tende à ordem assintótica dos erros de truncamento (Marchi, 2001).

A ordem efetiva pode ser calculada a partir das soluções numéricas de duas malhas através de:

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_2}{\Phi - \phi_1}\right)}{\log(q)} \quad (2.71)$$

2.6 Procedimento para a Estimativa do Erro de Discretização.

O procedimento para a estimativa do erro de discretização utilizado neste trabalho é baseado nas recomendações aceitas da ASME e publicadas por Celik (2003). O procedimento consiste em cinco passos descritos a seguir.

Passo 1:

Deve-se definir a razão de refino da malha. As formas para o cálculo da razão de refino estão nas equações (2.56) a (2.58).

Passo 2:

Selecionam-se três conjuntos de malhas executando-se as simulações para determinar o valor das variáveis importantes para a simulação em estudo. Recomenda-se que a razão de refino seja maior que 1,3. Este valor é baseado em experiências e não em uma demonstração

formal. Entretanto, este refinamento deve ser feito sistematicamente, isto é, o refinamento deve ser estruturado mesmo que a malha não o seja. A utilização de elementos similares é preferível.

Passo 3:

Calcula-se a ordem aparente com o procedimento descrito pelas equações (2.64) a (2.66), devendo-se notar que valores negativos para a razão de convergência da solução numérica, normalmente indicam uma convergência oscilatória (Celik, 2003).¹⁰ Neste caso seriam definidos limites superiores e inferiores das soluções (ϕ_s e ϕ_i , respectivamente) e a incerteza seria dada por:

$$U = \frac{|\phi_s - \phi_i|}{2} \quad (2.72)$$

e o passo 4 seria desnecessário. Neste trabalho não serão realizados os cálculos de incerteza para convergência oscilatória. É importante notar que a equação (2.72) nos dá o valor da incerteza, mas não o seu sinal.

Calcula-se, também, a ordem efetiva com o procedimento descrito na seção 2.5.3 e equação (2.71). Se a ordem assintótica for conhecida, esta deverá também ser reportada.

Passo 4:

Calcular os valores extrapolados a partir do Método da Extrapolação de Richardson descrito na seção 2.5.1 tanto para a ordem assintótica quanto para ordem aparente.

Calcula-se a incerteza das variáveis de interesse também pelo método GCI, conforme descrito na seção 2.5.2 e pelas equações (2.69) e (2.70).

Passo 5:

Reportar os seguintes dados para cada variável de interesse:

- Erro numérico da solução definido pela equação (2.52);
- Ordens aparente, assintótica e efetiva conforme o passo 3;
- Incerteza da solução numérica pelos métodos extrapolação de Richardson e GCI conforme calculado pelo passo 4.

¹⁰ Para o caso de convergência oscilatória alguns autores (ITTC, 1999; Stern *et alii*, 1999) recomendam que sejam realizadas novas simulações e cálculos da incerteza.

3 ESCOAMENTO RECIRCULANTE NA CAVIDADE QUADRADA

3.1 Introdução e Descrição do Problema

O problema do escoamento recirculante na cavidade quadrada, descrito por Shih, *et al.* (1989), apresenta uma cavidade quadrada na qual a parede superior movimenta-se com velocidade conhecida e um termo fonte atua sobre o escoamento. Na Figura 3.1, mostra-se, esquematicamente o domínio de cálculo e as suas condições de contorno.

Como se está analisando o comportamento da solução em malhas não-estruturadas e com razão de refinamento variável, dificilmente haverá nós que coincidirão geometricamente em duas malhas diferentes. Assim, optou-se por se analisar o comportamento de variáveis integradas, como o fluxo de massa (FM) que escoo em uma seção da cavidade desde o ponto de velocidade nula (centro de giro do escoamento) até uma das paredes e a força que a placa superior (FP) aplica sobre o fluido devido ao seu movimento.

A obtenção de variáveis locais, tais como velocidade e pressão, para pontos geometricamente idênticos em diferentes discretizações do domínio de cálculo é possível a partir da utilização de interpolação de resultados entres os nós. Segundo , o CFX utiliza as funções de forma, descritas no Capítulo 2, para fazer a interpolação dos resultados dos nós até uma posição qualquer dentro do elemento.

O problema é governado pelas seguintes equações adimensionais:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3.1)$$

$$\vec{u} \cdot \nabla u = \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 u - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (3.2)$$

$$\vec{u} \cdot \nabla v = \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 v - \frac{\partial p}{\partial y} - B(x, y, \text{Re}) \quad (3.3)$$

Sendo que a velocidade da parede superior é dada por:

$$u(x, 1) = 16(x^4 - 2x^3 + x^2) \quad (3.4)$$

e o termo fonte por:

$$B(x,y,Re) = -\frac{8}{Re} [24F(x) + 2f'(x)g''(y) + f'''(x)g(y)] - 64[F_2(x)G_1(y) - g(y)g'(y)F_1(x)] \quad (3.5)$$

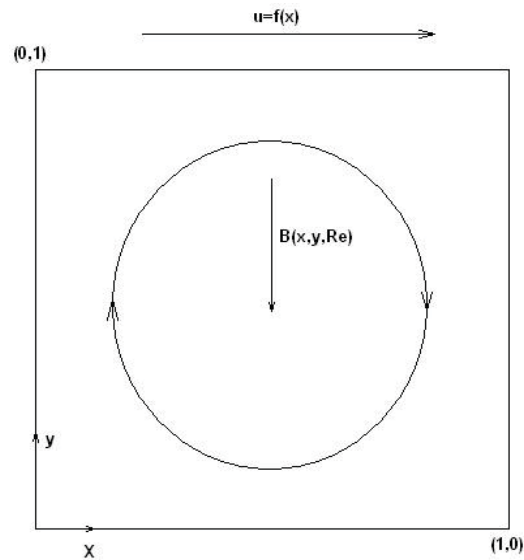


Figura 3.1 Domínio de cálculo para o problema da cavidade quadrada.

onde

$$f(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 = \frac{1}{16}u(x,1) \quad (3.5a)$$

$$g(y) = y^4 - y^2 \quad (3.5b)$$

$$F(x) = \int f(x) dx \quad (3.5c)$$

$$F_1(x) = f(x)f'(x) - [f'(x)]^2 \quad (3.5d)$$

$$F_2(x) = 0,5[f(x)]^2 \quad (3.5e)$$

$$G_1(y) = -24y^5 + 8y^3 - 4y \quad (3.5f)$$

sendo que as apóstrofes indicam as derivadas totais das funções com respeito a x e y conforme o caso.

A solução analítica para este caso é dada por:

$$u(x, y) = 8(x^4 - 2x^3 + x^2)(4y^3 - 2y) \quad (3.6)$$

$$v(x, y) = -8(4x^3 - 6x^2 + 2x)(y^4 - y^2) \quad (3.7)$$

Note que a solução para os campos de velocidade independe do número de Reynolds, assim como o centro de giro do escoamento. Apenas para o cálculo do termo fonte associado, adotou-se que o número de Reynolds seria unitário.

As variáveis integradas em estudo são dadas por:

$$FM = \int_{\cos 45^\circ}^1 u(0,5, y) dy = 0,125 \quad (3.8)$$

$$FP = \int_{x=0}^{x=1} \tau_{xy}(x, 1) dx \quad (3.9)$$

onde

$$\tau_{xy}(x, y) = \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} + \frac{\partial v(x, y)}{\partial x} \quad (3.9a)$$

resultando $FP = 2,666666667$.

O termo advectivo das equações de conservação da quantidade de movimento linear (equações 3.2 e 3.3) foram discretizados utilizando-se os esquemas descritos na Tabela 3.1. Como dito no capítulo anterior, já se espera que os resultados obtidos com os esquemas de discretização *Blend Factor* nulo e *Upwind* sejam idênticos. Entretanto, com o fim de testar o programa, realizou-se as simulações utilizando ambos os esquemas para os dois problemas deste trabalho.

Tabela 3.1 Esquemas utilizados na discretização dos termos advectivos da equação de conservação da quantidade de movimento linear (Ansys,2004).

Esquema de discretização	Ordem assintótica (p_L)
<i>Blend Factor = 1</i>	2
<i>Blend Factor = 0</i>	1
<i>Upwind</i>	1

Tanto o Método GCI quanto o Estimador de Richardson foram executados tendo como base a ordem aparente dos esquemas de discretização e assintótica dos resultados obtidos para cada um dos esquemas citados.

3.2 O Modelo Numérico

A discretização do domínio foi feita de forma a se obter malhas com elementos distribuídos o mais uniformemente possível, conforme recomendado por Celik (2003). Nas figuras 3.2 e 3.3 estão mostradas duas malhas obtidas com 10 e 20 divisões no lado da cavidade. O número de divisões nas arestas do domínio indica, para o gerador de malha, que devem ser colocados, entre os pontos que formam esta aresta, tantos nós quanto o número de divisões desta aresta. Assim, 10 divisões na lateral acabam por gerar 11 elementos nesta mesma lateral.

É importante notar que para cada discretização foi utilizada uma profundidade (cota z) diferente, porém sempre igual ao comprimento do lado da cavidade dividida pelo número de divisões imposto a este na discretização.

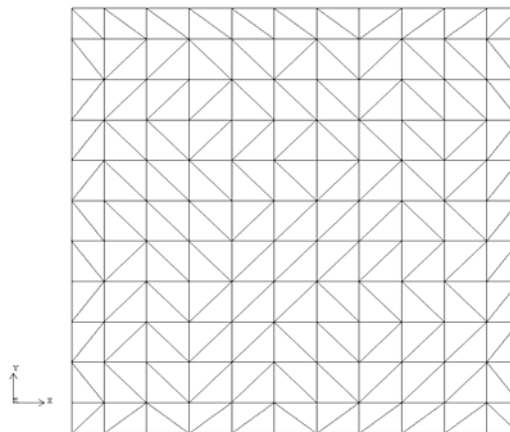


Figura 3.2 Vista frontal da malha obtida com 10 divisões na lateral.

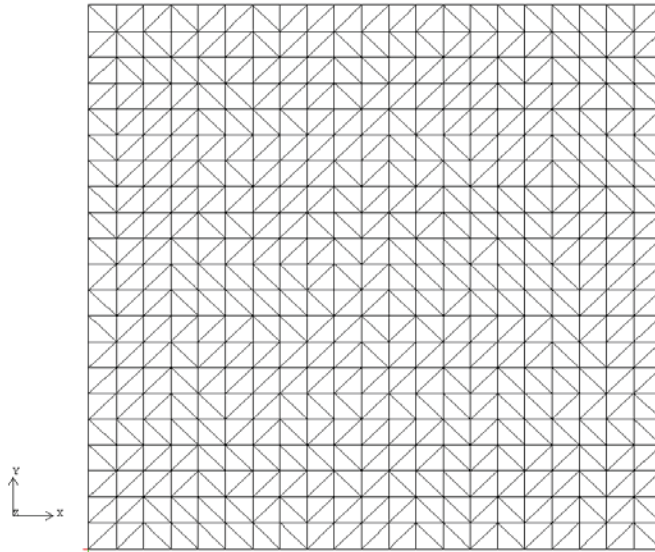


Figura 3.3 Vista frontal da malha obtida com 20 divisões na lateral

A adoção de uma terceira dimensão (espessura, não mostrada nas figuras para facilitar a visualização) é uma imposição do *software* CFX, o qual não trabalha diretamente com geometrias bidimensionais. Para que o sistema se comporte como bidimensional é imposta condição de simetria (*symmetry condition*) entre as duas maiores faces do domínio (Figura 3.4). A condição de contorno “Móvel” indica a face onde foi aplicada a velocidade $u(x,1)$ mostrada na equação (3.4). A condição de contorno “Parede” indica que velocidades nulas, em ambas as direções foram aplicadas a estas faces.

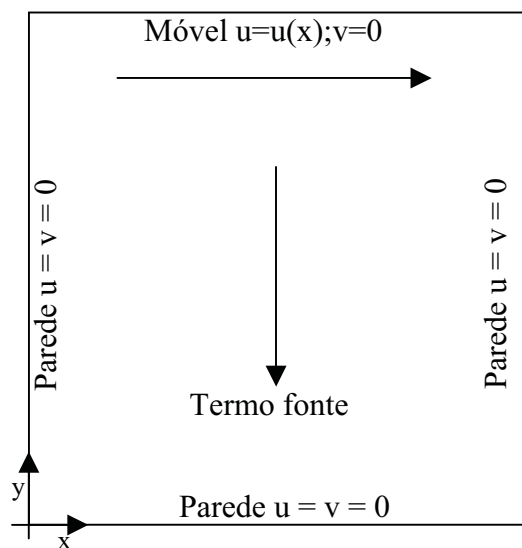


Figura 3.4 Condições de contorno aplicadas ao domínio de cálculo.

Na Tabela 3.2, abaixo, são mostradas as seis discretizações deste estudo com o número de divisões nos lados e conseqüentes números de elementos somente na face da cavidade. Na Tabela 3.3 coloca-se a razão de refino entre as malhas obtidas com a equação (2.57) baseando-se no número de elementos da face. Note-se que para a duplicação do número de divisões na lateral não há uma quadruplicação no número de elementos como poderia se esperar, no entanto este número é bastante próximo. Isto mostra a efetividade da forma de geração de malha, que apesar de ser não uniforme acabou por gerar malhas bastante próximas, conforme também mostrado nas Figuras 3.2 e 3.3 acima.

Tabela 3.2 Discretizações usadas no estudo do problema.

Malha	No. div no lado	No. Elem na face	No. Nós na face
A	5	50	36
B	10	242	144
C	20	882	484
D	40	3686	1938
E	80	14420	7411
F	160	57021	28958

Tabela 3.3 Razão de Refino baseado no número de elementos na face.

Malhas	Razão de Refino
B/A	2,2000000000000000
C/B	1,909090909090910
D/C	2,044294088920540
E/D	1,977902888723790
F/E	1,988542074966290

Havia também a necessidade de se ter certeza que os erros numéricos obtidos eram devidos apenas ao erro de truncamento, podendo ser, portanto, chamado de erro de discretização. Como visto no Capítulo 2 deste trabalho, ou outros possíveis contribuintes para o erro numérico, além do erro de truncamento, são:

- Erro de Arredondamento: a fim de se minimizar o erro de arredondamento todas as simulações foram realizadas com variáveis de precisão dupla, sendo esta precisão a maior possível dentro do *software* e dentro do sistema computacional utilizado.
- Erro de Iteração: para que o erro de iteração fosse minimizado deveria-se fazer as simulações com um número grande o suficiente de iterações para que o erro se tornasse apenas o erro de arredondamento. Entretanto, no *software* utilizado há a necessidade de se especificar os valores de resíduo máximo para convergência e número máximo de iterações, valendo o que se alcançar primeiro. Tentou-se trabalhar com erros nos resíduos

na ordem de 10^{-12} , entretanto o software emitiu uma mensagem de erro dizendo que este resíduo era muito pequeno para a simulação e que estaria fixando o valor em 10^{-10} , sendo este, então, o valor adotado.

- Erros de Programação: por se tratar de um *software* comercial de larga utilização, descartou-se a possibilidade de um erro no código, entretanto, poderia ainda haver erros durante a utilização do *software*. A fim de se minimizar a possibilidade destes erros, sempre que necessário entrou-se em contato com o suporte oferecido aos usuários pelo fabricante do *software* sanando-se todas as dúvidas antes que cada caso fosse analisado.

3.3 Resultados Obtidos

3.3.1 Variáveis Locais

O primeiro ponto de comparação que se pode ter é o comportamento das variáveis locais, tais como as componentes do vetor velocidade na direção x e y, em relação à solução analítica do problema. Para isto, tomou-se como referência duas linhas: a primeira com a coordenada x constante e igual a 0,5 com as coordenadas y variando do centro de giro do fluxo ($y = \cos 45^\circ \approx 0,707$) até a borda do domínio ($y = 1$), sendo que nesta linha foram tomadas apenas a componente x da velocidade (a componente y nesta posição é esperada ser nula); a segunda com coordenada y constante e igual a 0,5 e as coordenadas x variando de 0 a 1, nesta linha foram tomadas apenas as componentes y da velocidade. Os gráficos para as velocidades U e V nestas posições para a malha C e D estão nas Figuras 3.5 a 3.8, a seguir. Comportamentos similares foram obtidos nas outras malhas, sendo que para as malhas mais grosseiras os valores estão mais distantes da curva analítica que as malhas mais refinadas.

Qualitativamente, pode-se dizer que o comportamento dos resultados é de acordo com o esperado, entretanto não se pode dizer que se alcançou uma convergência nos resultados uma vez que não se avaliou os resultados localmente, mas sim o comportamento qualitativo destes no domínio de cálculo. Pode-se dizer, com estes resultados, apenas que, aparentemente, não há erros grosseiros nas análises realizadas.

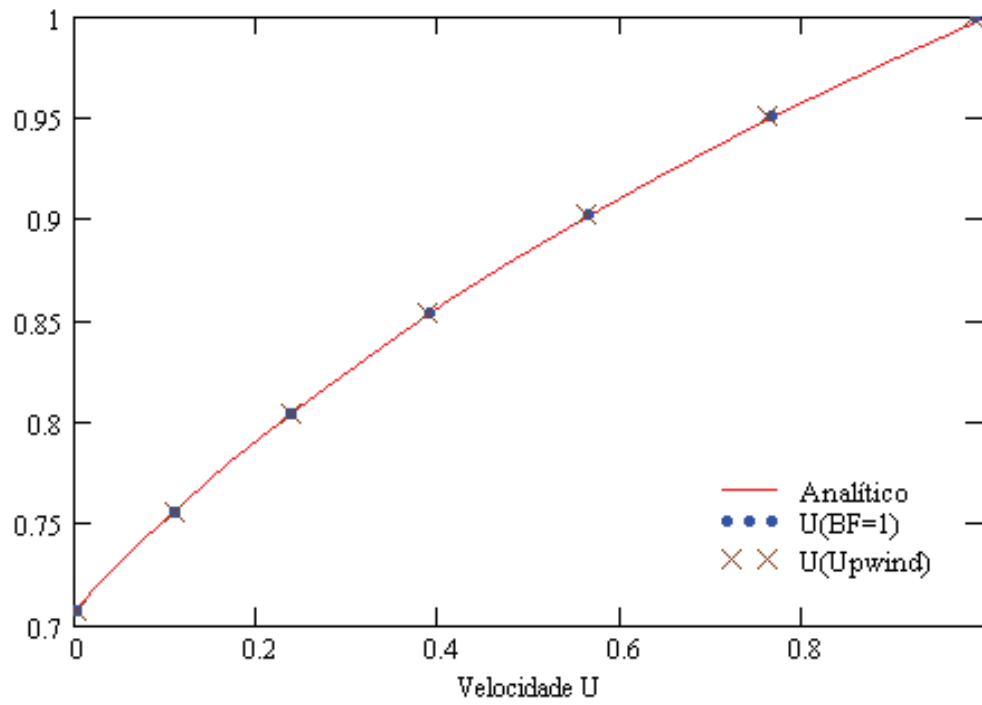


Figura 3.5 Comparação entre as velocidades obtidas com o esquema Blend Factor = 1 e Upwind. Variável: Velocidade U, Malha C.

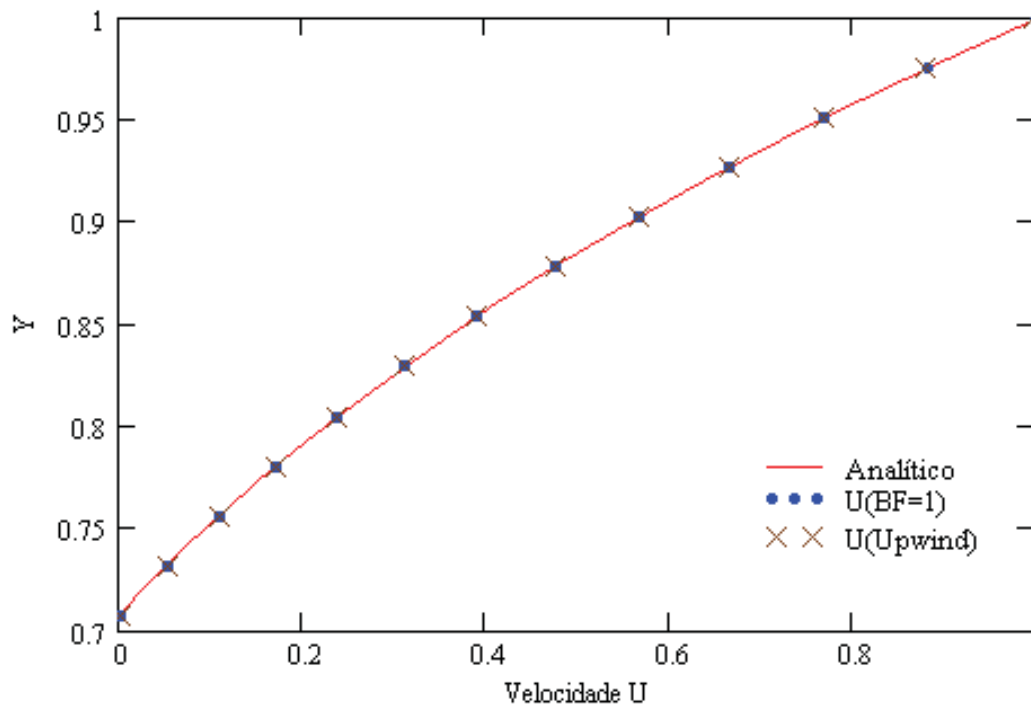


Figura 3.6 Comparação entre as velocidades obtidas com o esquema Blend Factor = 1 e Upwind. Variável: Velocidade U, Malha D.

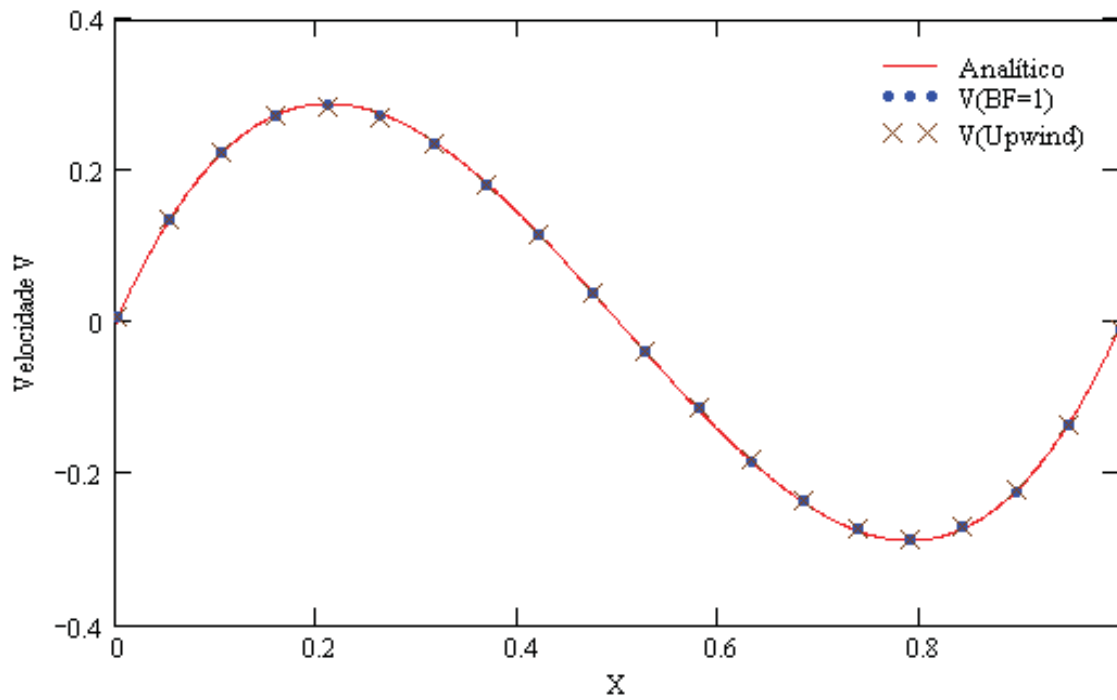


Figura 3.7 Comparação entre as velocidades obtidas com o esquema Blend Factor = 1 e Upwind. Variável: Velocidade V , Malha C.

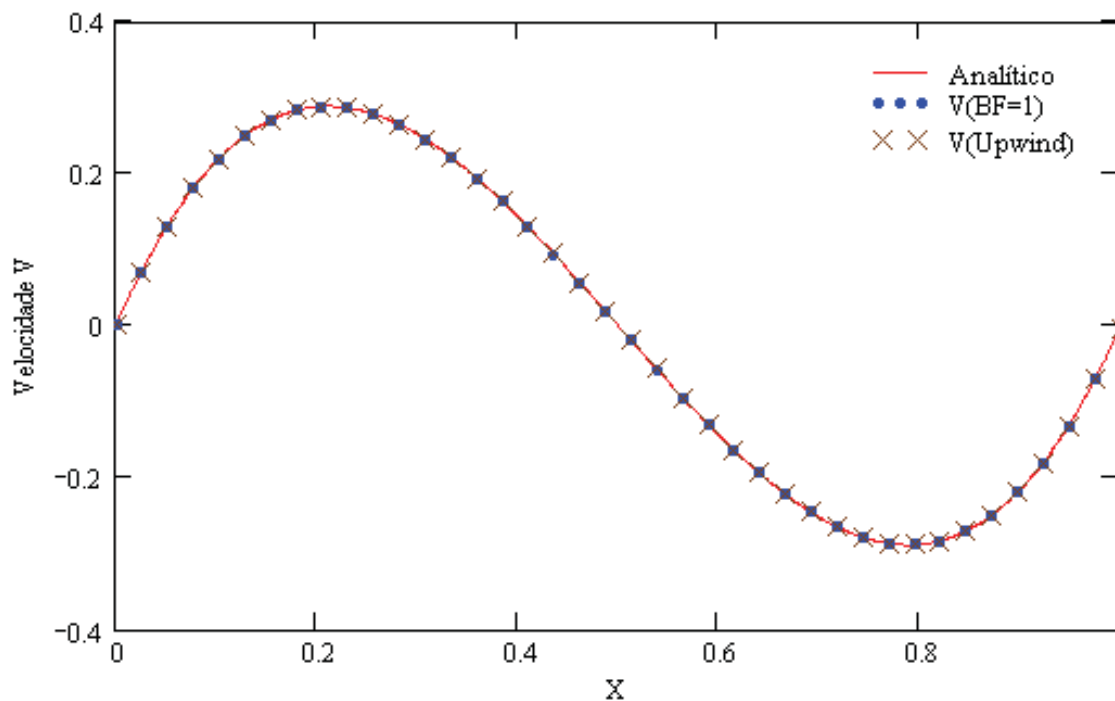


Figura 3.8 Comparação entre as velocidades obtidas com o esquema Blend Factor = 1 e Upwind. Variável: Velocidade V , Malha D

3.3.2 Variáveis Integradas

3.3.2.1. Obtenção das variáveis integradas

Como dados de saída, obteve-se do CFX as variáveis: velocidade, nas direções x, y e z, e a pressão. Para o cálculo das variáveis integradas (força sobre a placa – FP, e fluxo de massa – FM) foram tomadas duas linhas no domínio de cálculo. A primeira é vertical (x constante), localizada no meio da cavidade ($x = 0,5$) e com y variando entre 0,707 (centro teórico de rotação do fluxo) e 1, sendo os resultados pertencentes a esta linha utilizados para o cálculo de FM (Figura 3.9). Tomou-se o início da linha no centro teórico da rotação do escoamento apenas por facilidade, uma vez que o pós-processador do software fornecia os dados de saída de pontos quaisquer a partir da interpolação dos resultados nodais.

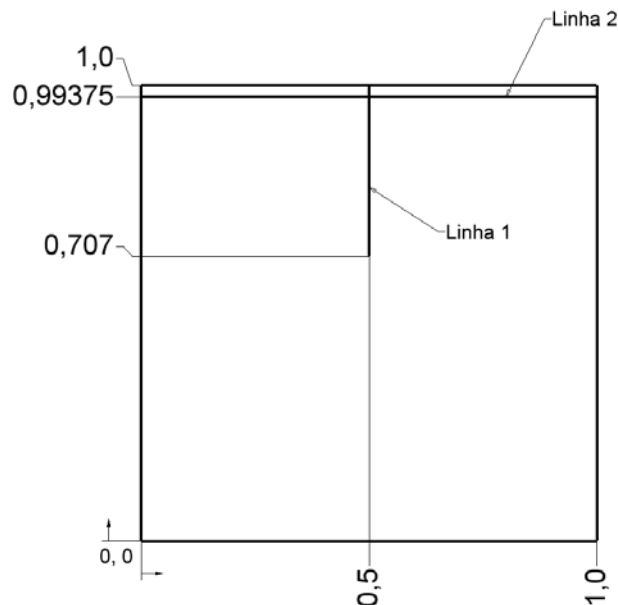


Figura 3.9 Posição das linhas de tomada de dados para o cálculo dos resultados numéricos.

A segunda linha é horizontal (y constante) localizada em $y = 0,99375$ ($=1 - 1/\text{número de divisões na lateral da malha mais fina} = 1 - 1/160$) e x variando de 0 a 1, sendo os resultados desta linha utilizados para o cálculo de FP (Figura 3.9). O número de pontos para a tomada de resultados em cada linha ficou igual ao número de divisões na lateral que esta linha corta.

A partir dos dados sobre a Linha 1, a obtenção do Fluxo de Massa (FM) foi feita a partir da equação (3.8), onde a integral lá descrita foi calculada a partir da regra do trapézio. Para a obtenção da variável Força sobre a Placa (FP), deve-se calcular a tensão de cisalhamento com a equação (3.9a) para depois se fazer a integração.

Para a posição em estudo ($y=1$), tem-se que $v = 0$ e que $\partial v/\partial x = 0$, assim só é necessário calcular a variação da velocidade u com relação à coordenada y , ou seja:

$$\tau_{xy}(x,1) = \frac{\partial u(x,1)}{\partial y} \quad (3.10)$$

Para o cálculo da derivada utilizam-se os dados da Linha 2 (Figura 3.9), e as velocidades da placa em $y=1$ dadas pela equação 3.4. A aproximação da derivada é, então, feita a partir da diferença entre dois pontos consecutivos dos dados obtidos, ou seja:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_i = \frac{\Delta u_i}{\Delta y_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{y_{i+1} - y_i} \quad (3.11)$$

Como o valor da cota y na Linha dois é constante Δy também o será. Assim se tem que:

$$\tau_{xy}|_i = \frac{\Delta u_i}{\Delta y_i} = \frac{\Delta u_i}{1 - 0,99375} \quad (3.12)$$

Assim como no caso de FM, a integração das tensões de cisalhamento para a obtenção de FP, prevista na equação (3.9) foi feita pela regra do trapézio.

O comportamento das variáveis integradas (fluxo de massa e força sobre a placa) com relação às diferentes malhas está mostrado nas figuras 3.10 e 3.11. Em todas as figuras que se seguem as variáveis são comparadas com um tamanho médio dos elementos definido como sendo:

$$\bar{h} = \left(\frac{\Delta K}{N_e} \right)^{\frac{1}{D}} \quad (3.13)$$

onde ΔK assume um valor representativo para o domínio em estudo (para problemas unidimensionais é o comprimento, para bidimensionais é a área e para tridimensionais é o volume do domínio), N_e é o número de elementos na linha, face ou volume, para problemas uni, bi e tridimensionais respectivamente e D o número de dimensões do problema. Note-se que esta definição é bastante semelhante à definição dada por Celik (2003), mostrada na equação (2.58).

3.3.2.2. Análise dos resultados obtidos

Na Figura 3.10 é simples ver que os resultados para o fluxo de massa se comportam de forma semelhante para todos os esquemas de diferenciação do termo advectivo e, em todos, se tem um comportamento assintótico em relação à solução analítica do problema.

Os resultados para a variável força sobre a placa (Figura 3.11) se comportam de maneira diferente. Dos três esquemas estudados (*Upwind*, *Blend-Factor* unitário e nulo) apenas o esquema *Blend-Factor=1* apresenta um resultado onde há uma oscilação próximo à solução analítica do problema. Esta oscilação para as três últimas malhas nos indicam que, para esta variável, não se chegou, ainda a um valor assintótico e que poderiam ser necessários refinamentos maiores para um estudo mais apurado deste problema.

Pode-se notar, também no comportamento da variável força sobre a placa, que a diferença entre os resultados obtidos com as três últimas malhas sofre uma inversão de sinal, isto é, o valor da variável passa por um ponto de mínimo. Uma consequência imediata desta inversão no sinal é a impossibilidade de cálculo da ordem aparente e, conseqüentemente, da Extrapolação de Richardson e do GCI. Isto porque no cálculo da ordem aparente é feito o logaritmo da divisão da diferença as malhas fina e grossa e a diferença entre a malha grossa e super-grossa. Caso haja uma mudança no sinal, a divisão fica negativa gerando como resultado, uma ordem aparente complexa a qual não pode ser usada no cálculo do GCI e da Extrapolação de Richardson.

Com estes resultados, pode-se esperar que as ordens aparentes calculadas com os três esquemas não serão muito diferentes entre si, uma vez que a diferença dos erros entre as malhas não difere muito entre si e que a razão de refino também não se altera.

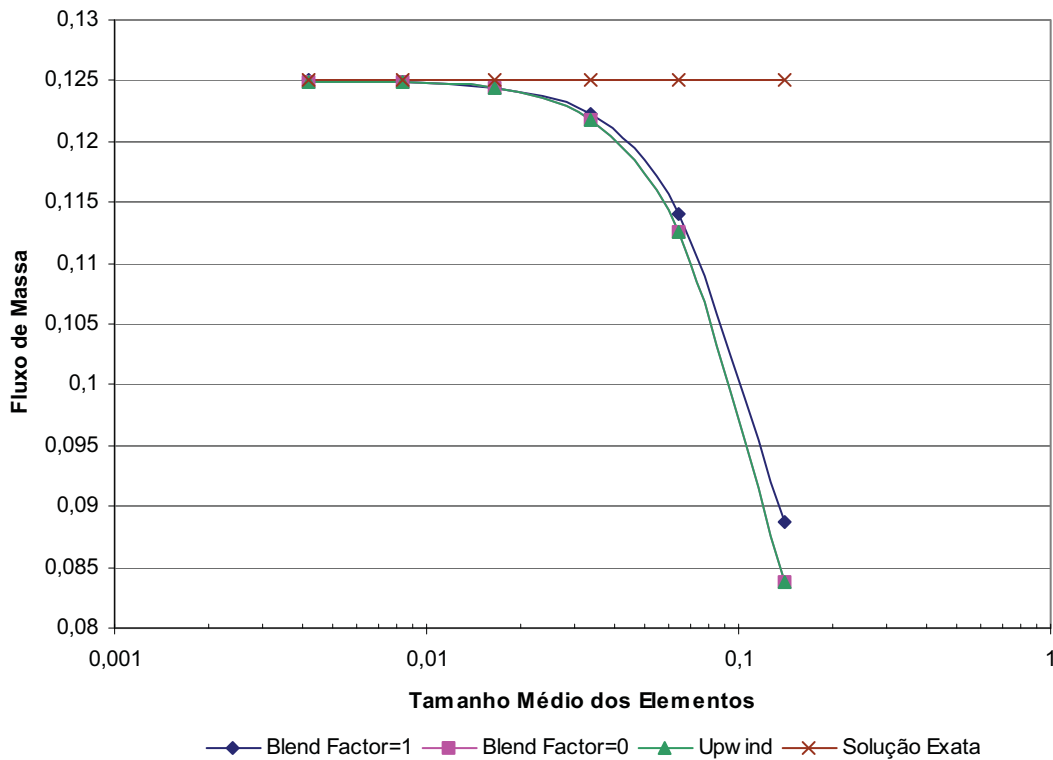


Figura 3.10 Comportamento do fluxo de massa com o refino da malha.

3.3.3 Os Erros Numéricos.

O erro numérico para o fluxo de massa e para a força sobre a placa também se comporta como as variáveis integradas. Ou seja, os valores são próximos entre si para os três esquemas de discretização do termo advectivo utilizados.

Outro ponto a se notar é que, para o fluxo de massa, o erro diminui aproximadamente uma ordem de grandeza para cada malha estudada, ou seja, para cada quadruplicação no número de elementos da face o erro decresce em uma ordem de grandeza (Tabela 3.4 e Figura 3.12).

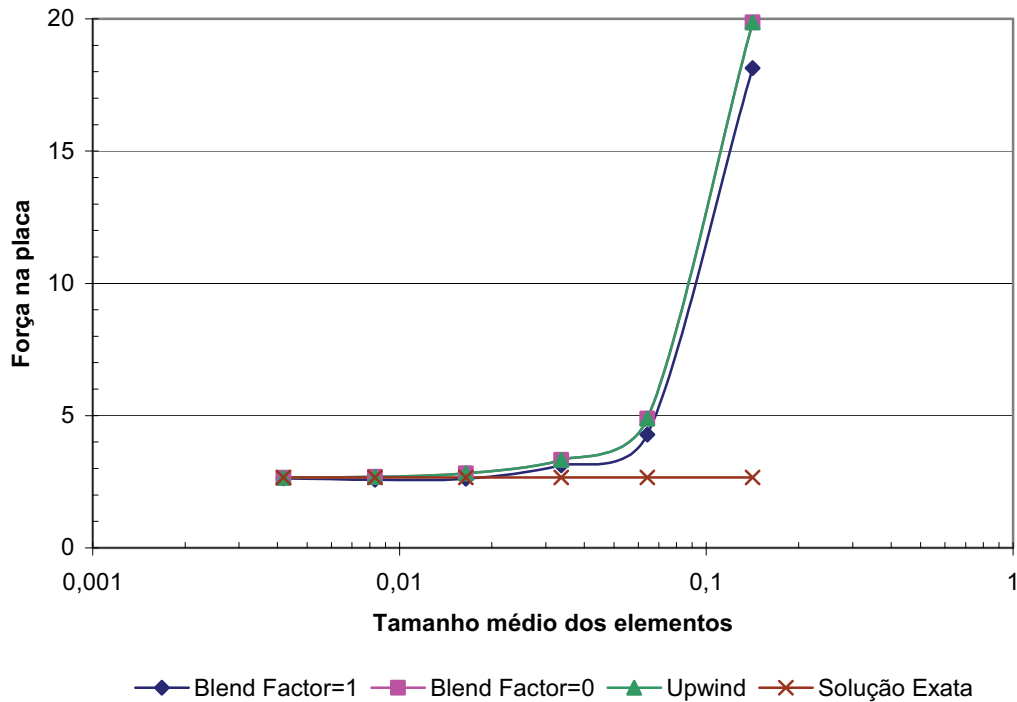


Figura 3.11 Comportamento da força sobre a placa com o refino de malha.

Tabela 3.4 Erro numérico para o fluxo de massa.

Malha	<i>Blend Factor=1</i>	<i>Blend Factor=0</i>	<i>Upwind</i>
A	0,036268767157519	0,041218154328131	0,041218154328131
B	0,010896536929408	0,012416792350010	0,012416792350010
C	0,002757620783028	0,003185359832864	0,003185359832864
D	0,000516429184443	0,000629225487202	0,000629225487202
E	0,000094662836581	0,000138925554915	0,000138925554915
F	0,000004294930531	0,000046435300192	0,000046435300192

Tabela 3.5 Erro numérico para a força sobre a placa.

Malha	<i>Blend Factor=1</i>	<i>Blend Factor=0</i>	<i>Upwind</i>
A	-15,474582900610300	-17,204159339275700	-17,204159339275700
B	-1,618885618727400	-2,222121552939310	-2,222121552939310
C	-0,448975915759850	-0,664706143461880	-0,664706143461880
D	0,057444640670330	-0,146495935869980	-0,146495935869980
E	0,087632832830470	-0,018143204176400	-0,018143204176400
F	0,036468635117230	0,012397823269340	0,012397823269340

Este mesmo comportamento não acontece com a força sobre a placa, onde se tem uma inversão no sinal da diferença entre malhas subsequentes, vide Tabela 3.5 e Figura 3.13, ocasionando um comportamento bastante diferente. Na verdade, aparentemente o erro está oscilando próximo a zero como uma curva de amortecimento de sistemas dinâmicos, ou seja,

houve uma sobre-passagem e depois este “sinal” tenderá ao valor analítico, porém um um refino de malha bastante maior que para o fluxo de massa.

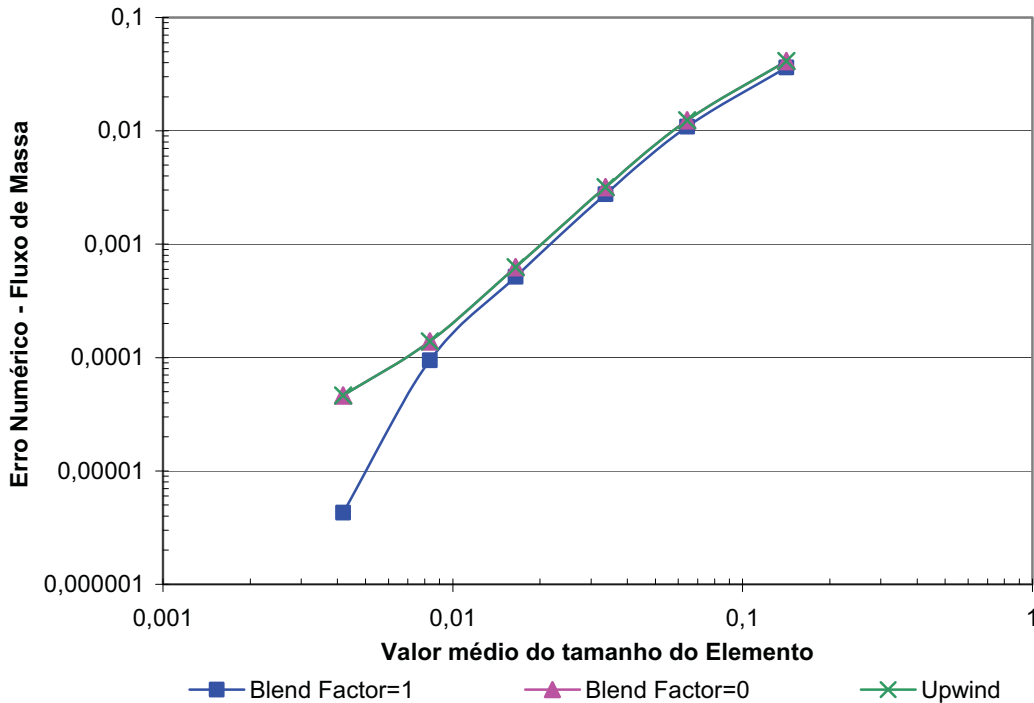


Figura 3.12 Comportamento do erro verdadeiro com o refino de malha para a variável fluxo de massa.

3.3.4 Ordem Aparente

O cálculo da ordem aparente foi feito de acordo com o procedimento apresentado em Roache, 1997. Este procedimento é iterativo para razões de refino não constantes, como é o caso em estudo. Os resultados deste cálculo podem ser vistos nas Tabelas 3.6 e 3.7 abaixo e o formalismo matemático do procedimento na seção 2.5.1.

Nas tabelas que se seguem a ordem das malhas indicadas na coluna “Malha” é fina-grossa-super-grossa.

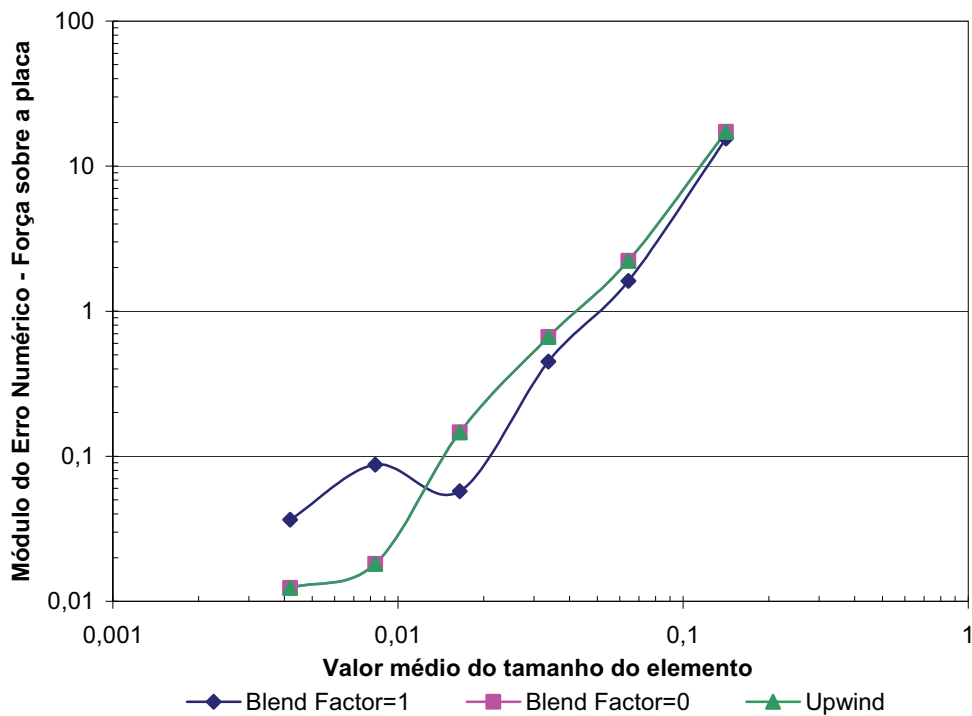


Figura 3.13 Comportamento do erro verdadeiro com o refinamento de malha para a variável força sobre a placa.

Tabela 3.6 Ordens aparentes calculadas conforme Roache (1997) para o fluxo de massa.

Malha	<i>Blend Factor=1</i>	<i>Blend Factor=0</i>	<i>Upwind</i>
C-B-A	1,288845148508140	1,289941762523040	1,289941762523040
D-C-B	2,065501309684800	2,053472219935170	2,053472219935170
E-D-C	2,309384366184180	2,282388403661000	2,282388403661000
F-E-D	2,281472173837010	2,469301631896430	2,469301631896430

Tabela 3.7 Ordens aparentes calculadas conforme Roache (1997) para a força sobre a placa.

Malha	<i>Blend Factor=1</i>	<i>Blend Factor=0</i>	<i>Upwind</i>
C-B-A	3,065433450829140	2,792129217055560	2,792129217055560
D-C-B	1,388395047816230	1,781650567299480	1,781650567299480
E-D-C	3,931191245058750	1,920339756712390	1,920339756712390
F-E-D	Inexistente	2,126847464917900	2,126847464917900

Conforme previsto na seção anterior, o cálculo da ordem aparente para a força sobre a placa nas três malhas mais finas resultou em um número complexo para os esquemas *Blend Factor* unitário. Isto impossibilita, conforme dito anteriormente, o cálculo do GCI e da Extrapolação de Richardson.

3.3.5 Ordem Efetiva

O cálculo da ordem efetiva foi feito com base na equação (2.71) apresentada no capítulo anterior. Por esta equação, é possível que a ordem efetiva seja inexistente para o caso de soluções que ainda não tenham o comportamento assintótico, como é o caso da variável força sobre a placa no presente estudo. Os resultados para as duas variáveis em estudo no presente problema estão mostradas na Tabelas 3.8 e 3.9.

Tabela 3.8 Ordens efetivas para a variável fluxo de massa

Malha Fina	<i>Blend Factor</i> = 1	<i>Blend Factor</i> = 0	<i>Upwind</i>
B	1,525145171594280	1,532463761154900	1,521742430720550
C	2,124990763705780	2,088401702977640	2,103970559941410
D	2,342744459928950	2,280763184269200	2,268128239607920
E	2,487572292225700	2,383118424296570	2,214764246349930
F	4,499386470063410	4,726953473790000	1,594232589816090

Tabela 3.9 Ordens efetivas para a variável força sobre a placa.

Malha Fina	<i>Blend Factor</i> = 1	<i>Blend Factor</i> = 0	<i>Upwind</i>
B	2,863136240098600	2,595814162577130	2,595814162577130
C	1,983405778236150	1,866411875340030	1,866411875340030
D	Inexistente	2,115015722539220	2,115015722539220
E	-0,619224373791545	3,062445591795870	3,062445591795870
F	1,275386859736480	Inexistente	Inexistente

3.3.6 Extrapolação de Richardson / Erro Numérico.

Nas Figuras 3.14 e 3.15 são mostrados os comportamentos da relação entre o valor da incerteza obtido a partir da extrapolação de Richardson (U_{ri}) e o erro numérico para as variáveis em estudo. O valor da incerteza foi obtido de acordo com os cálculos postos na seção 2.5.1.

O comportamento das curvas para o fluxo de massa obedece aos resultados obtidos nas variáveis integradas. Entretanto não há nenhuma correlação entre as incertezas obtidas com a ordem aparente e com a ordem assintótica. Exceto em dois pontos, as incertezas previstas são maiores que o erro numérico ainda assim, não são muito maiores indicando que há uma boa efetividade nas incertezas calculadas com o método para esta variável.

Já as curvas para a força na placa, há um comportamento semelhante entre as curvas da incerteza obtidas a partir da ordem aparente [$U_{ri}(pl)$] e da ordem assintótica [$U_{ri}(pu)$]

mantendo a mesma inter-relação dos esquemas de discretização do termo advectivo das curvas anteriores.

Nota-se também, que há uma certa dispersão nos resultados da incerteza, os quais têm uma diferença de até duas ordens de grandeza. Entretanto há vários pontos onde a incerteza é menor que o erro numérico, indicando uma sub-estimativa dessa. Porém, apenas em dois pontos o GCI não corrigirá estas incertezas tornando-as maiores que o erro numérico.

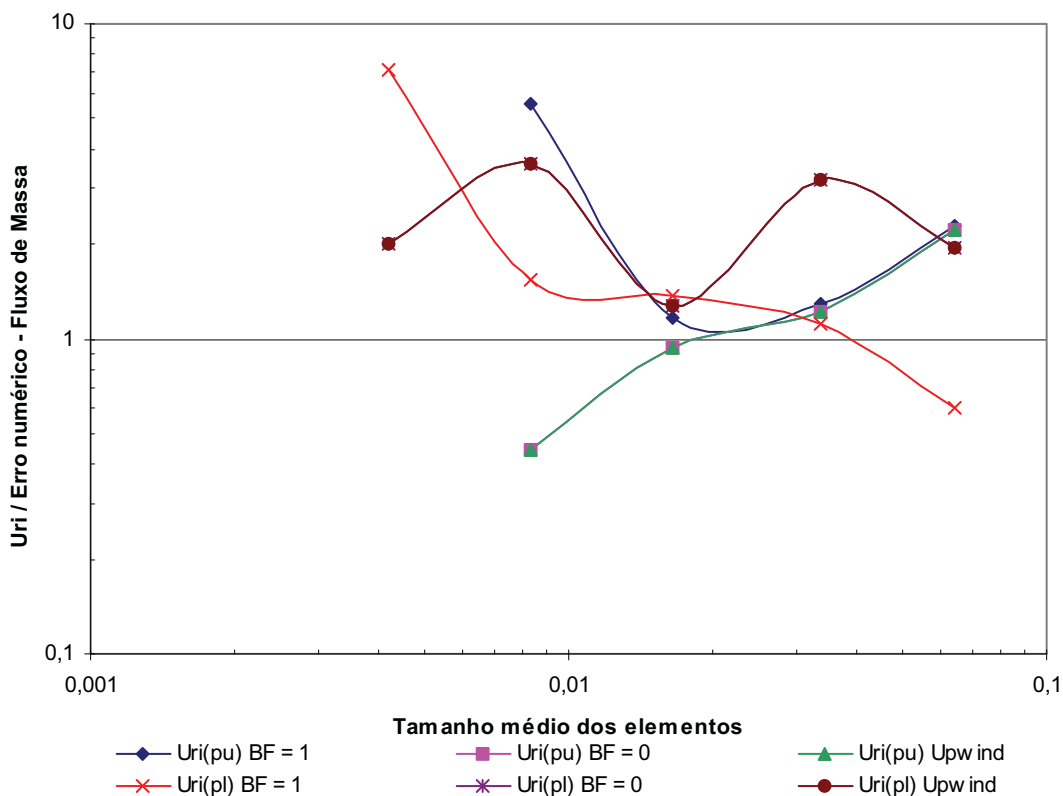


Figura 3.14 Incerteza numérica obtida pela Extrapolação de Richardson para o Fluxo de Massa.

3.3.7 Grid Convergence Index (GCI) / Erro Numérico.

A relação entre o GCI e o erro verdadeiro nos fornece, quantitativamente, o quão eficiente o GCI é na previsão da incerteza da solução numérica de um sistema de equações diferenciais. Assim, é importante que esta relação esteja sempre próxima a um.

Na Figura 3.16 que se segue, é feita uma comparação entre os valores obtidos com o GCI baseado na ordem aparente [GCI(pu)] e o GCI baseado na ordem assintótica [GCI(pl)] para a variável fluxo de massa. Estes mesmos resultados estão na Figura 3.17 para a variável força sobre a placa.

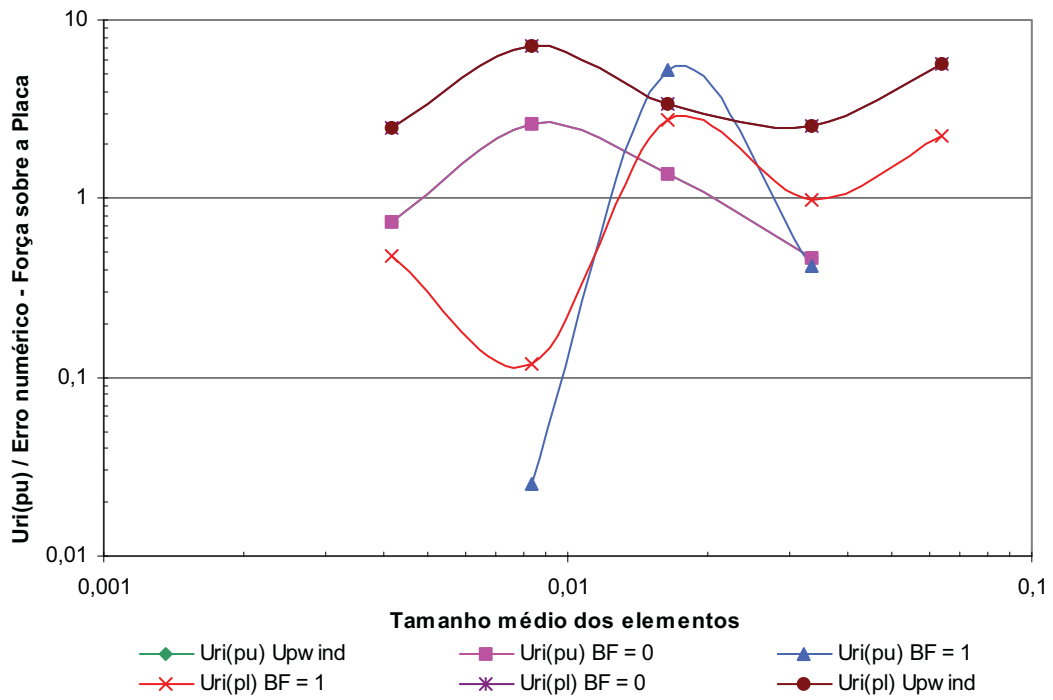


Figura 3.15 Incerteza numérica obtida pela Extrapolação de Richardson para a Força na Placa.

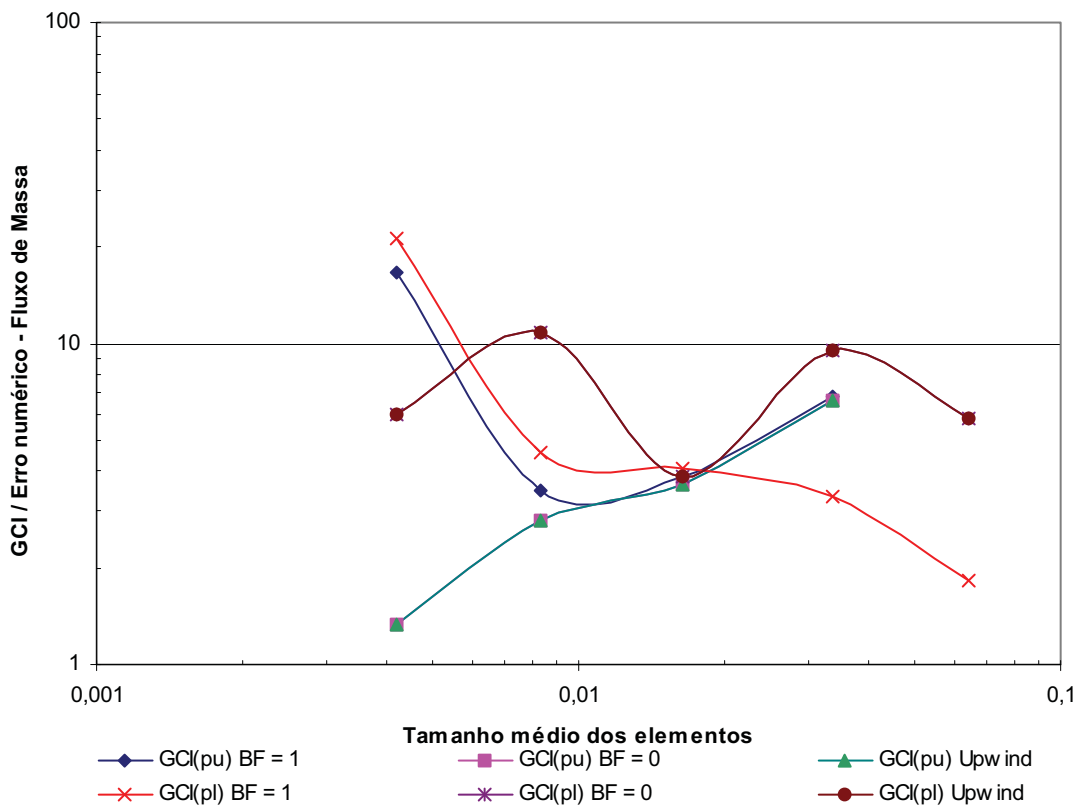


Figura 3.16 Relação GCI/Erro numérico para a variável fluxo de massa.

Como o GCI é uma expansão da Extrapolação de Richardson se espera que o comportamento das curvas sejam bastante parecidos, diferindo os valores apenas do fator de segurança que multiplica o valor da Extrapolação para a obtenção do GCI. Este comportamento é encontrado e as mesmas observações relativas aos resultados obtidos com a Extrapolação de Richardson são válidos aqui.

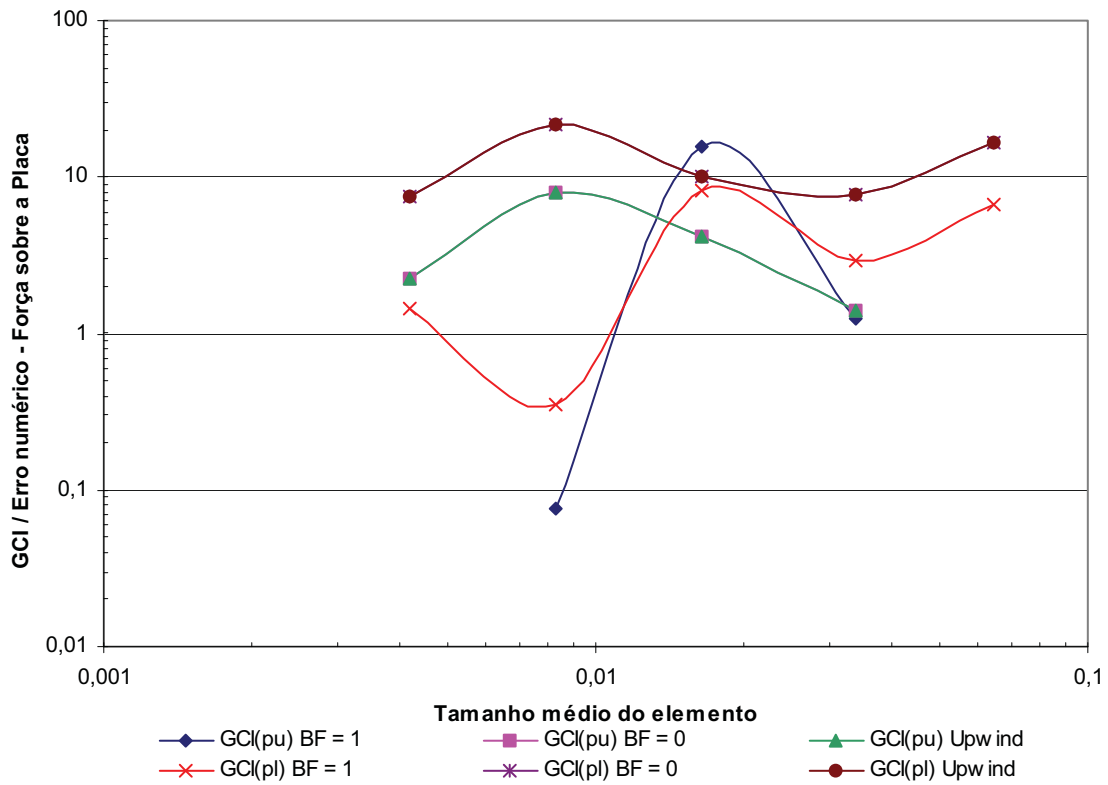


Figura 3.17 Relação GCI/Erro numérico para a variável força sobre a placa

Além destes pontos, pode-se notar, também, que, para a variável força sobre a placa, o o esquema de discretização *Blend Factor* =1 fornecem resultados pobres tanto para a ordem assintótica quanto para a ordem aparente, pois, mesmo com malhas finas ainda se tem uma sub-estimativa do valor da incerteza, a qual fica inferior ao erro verdadeiro.

Os demais fornecem sempre valores super-estimados, tendo até valores muito elevados nas malhas mais finas indicando que pode se trabalhar com valores de fator de segurança menores que 3, conforme indicado em Roache (1997), Celik (2003) e Celik e Karatekin (2002). Entretanto há de se considerar o fato de que há a oscilação na convergência dos resultados conforme mostrado nas seções 3.3.2 e 3.3.3.

3.4 Conclusão

Neste capítulo foi estudado o problema do escoamento recirculante em uma cavidade quadrada proposto por Shih, *et al.*(1989), descrevendo-se os resultados de acordo com o procedimento posto na seção 2.6 deste trabalho para duas variáveis globais, o fluxo de massa que escoava desde o centro da recirculação até a parede móvel e a força que é aplicada sobre a placa superior. Também se apresentou os resultados locais para velocidade U e V em duas seções distintas do domínio de cálculo para duas das malhas utilizadas no estudo da incerteza numérica das soluções obtidas para este problema.

A análise das variáveis locais, seção 3.3.1, indicava que os resultados obtidos com as malhas propostas estariam convergindo para a solução analítica com a diminuição do tamanho médio dos elementos. Portanto, estas malhas poderiam ser utilizadas no estudo da incerteza das soluções numéricas obtidas.

A partir disto, foram calculados os valores das variáveis globais de interesse cujos resultados estão mostrados na seção 3.3.2. O comportamento idêntico dos esquemas de discretização *Blend Factor=0* e *Upwind* era esperado de acordo com Ansys (2004).

Notou-se também que, para a variável força sobre a placa havia uma oscilação na convergência dos resultados a partir da malha D. Esta oscilação implicaria na inexistência das ordens aparente e efetiva em alguns pontos, conforme confirmado posteriormente nas seções 3.3.4 e 3.3.5.

Espera-se que, quando o tamanho médio do elemento tende a zero, as ordens aparente e efetiva tendam ao valor da ordem assintótica e que partir de um determinado valor do tamanho do elemento este comportamento seja monotônico (Marchi,2001). Entretanto os valores mostrados nas tabelas 3.6 a 3.9 não nos indicam isto, o que nos leva a conclusão de que as soluções ainda não entraram no intervalo de convergência indicando também que novas simulações poderiam ser necessárias a fim de se obter estimativas da incerteza numérica mais confiáveis e acuradas.

A acurácia das incertezas calculadas por ambos os estimadores de erro em estudo (GCI e extrapolação de Richardson), mostradas nas seções 3.3.6 e 3.3.7, e, para este problema, deixa um pouco a desejar uma vez que a variação destas incertezas chega até a três ordens de grandeza.

Para a variável força sobre a placa, a extrapolação de Richardson não se mostrou confiável em diversos pontos uma vez que os valores da incerteza obtidos com este estimador foi menor que o erro numérico calculado.

A aplicação do fator de segurança 3 no GCI eliminou, em quase todos os pontos, o problema da subestimativa da incerteza numérica que ficou super-estimada em alguns pontos. Isto nos indica que a utilização de faixas para o fator de segurança (já proposto por Eça e Hoekstra, 2003) pode ser uma alternativa para melhorar a confiabilidade e a acurácia das soluções numéricas quando a ordem aparente não está em intervalo convergente, entretanto fica o problema de qual valor utilizar para cada variável e para cada tamanho do elemento, principalmente quando a solução analítica do problema não é conhecida.

4 ESCOAMENTO ENTRE DUAS PLACAS PLANAS PARALELAS

4.1 Descrição do Problema

O segundo problema a ser estudado neste trabalho é o do escoamento, em regime permanente, totalmente desenvolvido, entre duas placas planas semi-infinitas imóveis e paralelas entre si.

Na forma mais geral do problema, o fluxo é governado por uma combinação de um gradiente de pressão imposto, seja diretamente por uma bomba ou por uma condição de contorno de velocidade constante na entrada das placas, e pelo movimento de uma das placas (normalmente a superior) com uma velocidade uniforme U . Na Figura 4.1, o domínio de cálculo é mostrado e são definidas as principais características geométricas do escoamento.

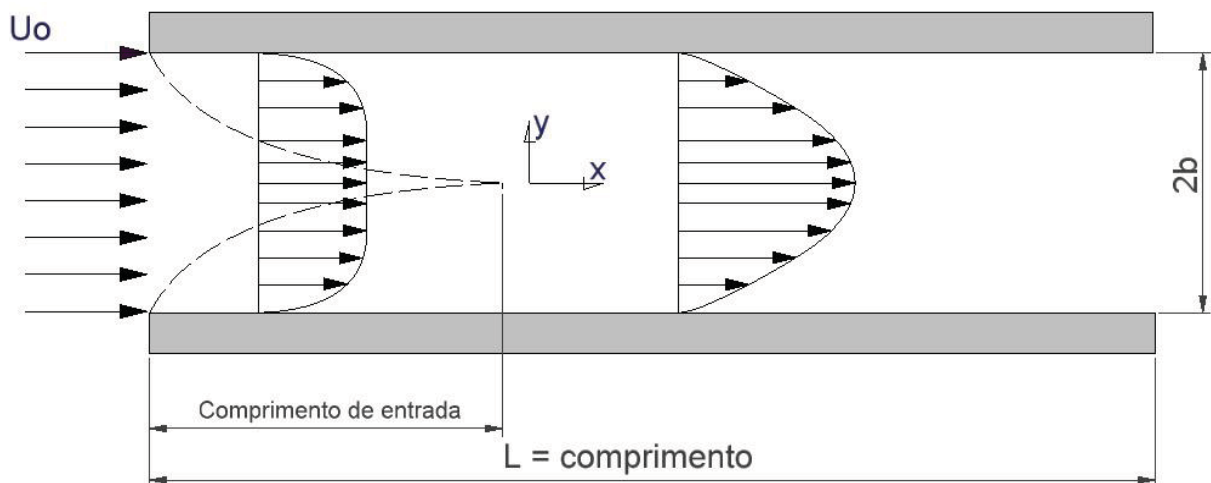


Figura 4.1 Domínio de cálculo para o problema do escoamento entre duas placas planas.

Toma-se o eixo x ao longo da linha central do escoamento, orientando-o na mesma direção do fluxo. A bidimensionalidade do fluxo requer que as derivadas na direção z sejam nulas. As características do escoamento são, também, invariantes na direção x , o que faz a equação da continuidade demandar $\partial v / \partial y = 0$. Uma vez que, por condição de contorno de parede, $v = 0$ em $y = -b$ tem-se que esta componente da velocidade é nula em todo o escoamento, demonstrando o fato de que o escoamento é paralelo às paredes. Assim, as equações de conservação da quantidade de movimento linear ficam:

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \frac{d^2 u}{dy^2}, \text{ na direção } x; \quad (4.1)$$

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}, \text{ na direção } y. \quad (4.2)$$

A equação (4.2) mostra que a pressão não varia com a cota y . Já na equação (4.1) o termo de pressão é função apenas de x e o termo de difusão é função apenas de y . A única maneira de se satisfazer esta equação é com ambos os termos constantes. Se o gradiente de pressão é constante, então a pressão varia linearmente ao longo do canal. Integrando a equação 4.1 duas vezes, chega-se a:

$$0 = \frac{y^2}{2} \frac{dP}{dx} + \mu u + Ay + B \quad (4.3)$$

as constantes A e B são obtidas a partir da imposição das condições de contorno em $y=+b$ e $y=-b$, o que nos fornece:

$$u(y) = \frac{U}{2} \left(\frac{y}{b} + 1 \right) + \frac{1}{2\mu} \frac{dP}{dx} (y^2 - b^2) \quad (4.4)$$

No caso em estudo a velocidade da placa, U , é nula, anulando o primeiro termo do lado direito da equação (4.4), tornando-a:

$$u(y) = \frac{1}{2\mu} \frac{dP}{dx} (y^2 - b^2) \quad (4.5)$$

A velocidade máxima é obtida a partir da avaliação da velocidade no ponto de derivada nula. Desta maneira obtém-se, no ponto $y=0$:

$$u_{\text{máx}} = \frac{3}{2} \bar{U} \quad (4.6)$$

onde \bar{U} é a velocidade média do fluxo, a qual é igual, pela equação da continuidade, a velocidade de entrada, U_0 . Já a tensão de cisalhamento é dada por:

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} = y \frac{dP}{dx} \quad (4.7)$$

onde:

$$\frac{dP}{dx} = -3\mu \frac{U_0}{b^2} \quad (4.8)$$

Note-se que o módulo de todos os elementos do escoamento é simétrico em relação à linha de centro deste. Assim, poderá se utilizar apenas metade do domínio para o cálculo numérico diminuindo consideravelmente os custos computacionais (tempo de processamento e memória) envolvidos.

Para efeito de cálculo, utilizou-se o domínio com a distância entre a placa superior e o centro do fluxo igual a um metro. O fluido em estudo tem como características peso específico e viscosidade igual a uma unidade do sistema internacional. A velocidade de entrada, U_0 , também é unitária. Assim, o número de Reynolds do escoamento, baseado na distância entre as placas, Re_b , fica:

$$Re_b = \frac{\rho U_0 2b}{\mu} = 2 \quad (4.10)$$

O comprimento de entrada pode ser estimado a partir da seguinte relação (Fox e McDonald, 2001):

$$L_e = 0,12 Re_b \quad b = 0,24m \quad (4.11)$$

Assim o comprimento do domínio deve ser bastante maior que o valor do comprimento de entrada para que o escoamento nas seções em estudo esteja completamente desenvolvido. Por isto adotou-se um valor para o comprimento total do domínio, L , de três metros.

Coloca-se na Tabela 4.1 os valores de todos os dados de entrada e variáveis de interesse, obtidos a partir destes dados de entrada com o equacionamento mostrado anteriormente.

Tabela 4.1 Variáveis de entrada e saída para o problema.

Variável	Símbolo	Valor
Velocidade de entrada	U_0	1 m/s
Massa específica do fluido	ρ	1 kg/m ³
Viscosidade do fluido	μ	1 kg/(m s)
Comprimento do domínio	L	3 m
Distância da parede à linha de centro	b	1 m
Velocidade máxima em y=0 (analítico)	u_{\max}	1,5 m/s
Tensão de cisalhamento mínima, em y = b (analítico)	τ_{\min}	- 3 N/m ²

4.2 O Modelo Numérico

Adotou-se neste problema os mesmos procedimentos para a geração da malha utilizados no problema anterior, entretanto realizaram-se experimentos apenas para cinco malhas ao invés de seis, como no capítulo anterior. Duas malhas obtidas podem ser vistas nas Figuras 4.2 e 4.3. O número de nós e elementos de cada malha estão na Tabela 4.2 e na Tabela 4.3 encontra-se a razão de refino entre as malhas.

Tabela 4.2 Discretizações do domínio em estudo.

Malha	No. div nos lados	No. Elem na face	No. Nós na face
A	5x15	111	172
B	10x20	372	654
C	20x60	1417	2664
D	40x120	5560	10978
E	80x240	22127	43612

Tabela 4.3 Razão de Refino baseado no número de elementos na face.

Malhas	Razão de Refino
B/A	1,94995527676800
C/B	2,01826521929424
D/C	2,02999282532497
E/D	1,99315644593273

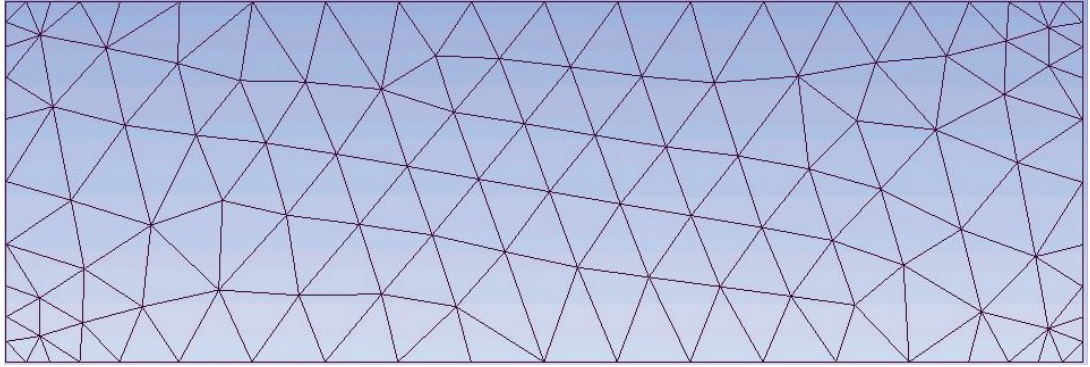


Figura 4.2 Malha B.

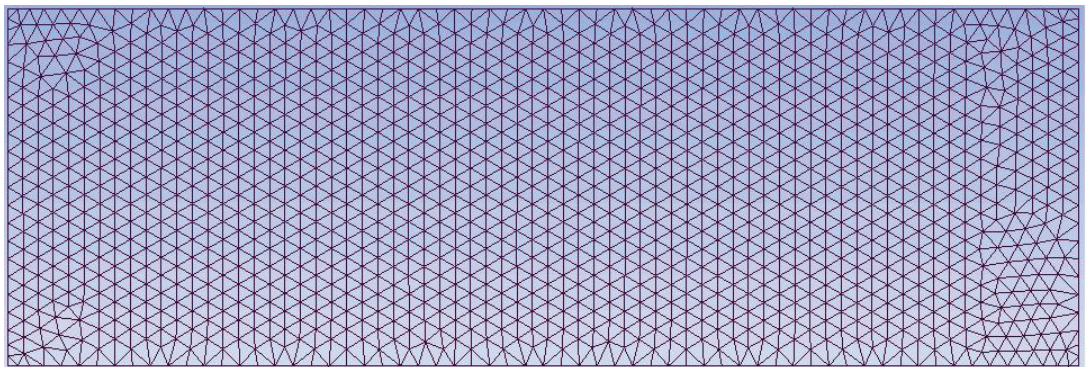


Figura 4.3 Malha C.

Para efeito de imposição das condições de contorno, considerou-se um perfil de velocidade constante na entrada do domínio e, na saída, pressão relativa nula. Note que, com este procedimento, apesar de o problema de interesse ser apenas o escoamento completamente desenvolvido, se simulou o desenvolvimento do escoamento até a formação do perfil parabólico. Com isto os resultados de interesse deveriam ser tomados em locais com cota x maior que o comprimento de entrada estimado pela equação (4.11).

A fim de se diminuir o esforço computacional necessário, tomou-se apenas metade do domínio, junto à cota de $y=0$ m impondo-se condições de contorno de simetria nas faces laterais e inferior do domínio de cálculo. Na superfície superior fez-se a imposição de condição de contorno de parede sem deslizamento. (Figura 4.4).

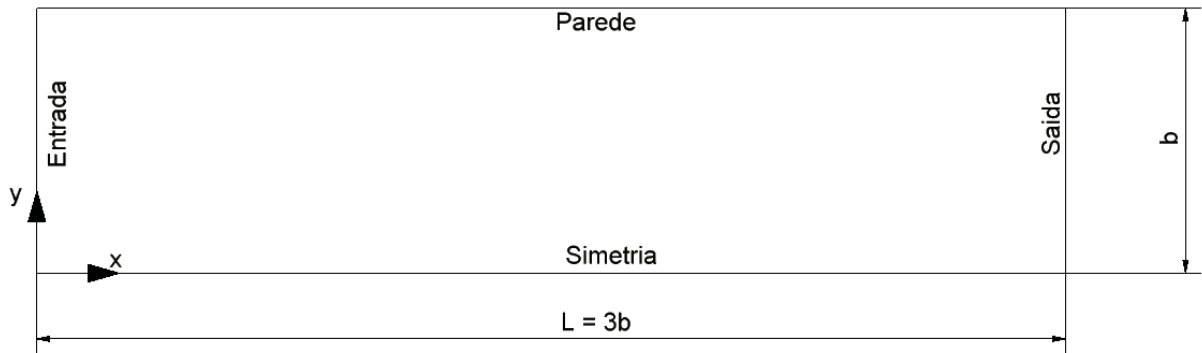


Figura 4.4 Condições de contorno aplicadas ao domínio de cálculo.

4.3 Resultados Obtidos

4.3.1 Variáveis de Interesse

As duas variáveis de interesse para este problema são a velocidade máxima e a mínima tensão de cisalhamento no escoamento. Os valores analíticos, para referência, estão demonstrados na seção 4.1 .

A variável velocidade máxima não necessitou maiores cálculos sendo somente verificado se o valor obtido estava na parte inferior do domínio, ou seja, no centro do escoamento.

Já o cálculo da variável mínima tensão de cisalhamento foi realizado com as duas possibilidades descritas na equação (4.7) sendo que o gradiente de pressão foi calculado com a tomada dos resultados da pressão para duas linhas (linhas 1 e 2 e linhas 3 e 4, na Figura 4.5) distanciadas entre si da altura do domínio ($b=1m$) dividida pelo número de divisões, nesta altura, para a malha mais fina (80 divisões), ou seja:

$$dx_i = \Delta x_i = \frac{b}{n \text{ div}} = \frac{1}{80} = 0,0125m \quad (4.12)$$

O número de pontos tomados em cada linha é igual ao número de divisões que foram arbitradas à altura do domínio para a geração de malha, ou seja, 5, 10, 20, 40 e 80 pontos para as malhas A, B C, D e E, respectivamente. Ou seja,

$$dp_i = \Delta p_i = p_i^{\text{linha}_{j+1}} - p_i^{\text{linha}_j} \quad \forall 1 < i < no. \text{ pontos e } j = 1 \text{ ou } j = 3 \quad (4.13)$$

Assim se tem que:

$$\frac{dp_i}{dx_i} = \frac{\Delta p_i}{\Delta x_i} = \frac{p_i^{\text{linha}_{j+1}} + p_i^{\text{linha}_j}}{0,0125} \quad (4.14)$$

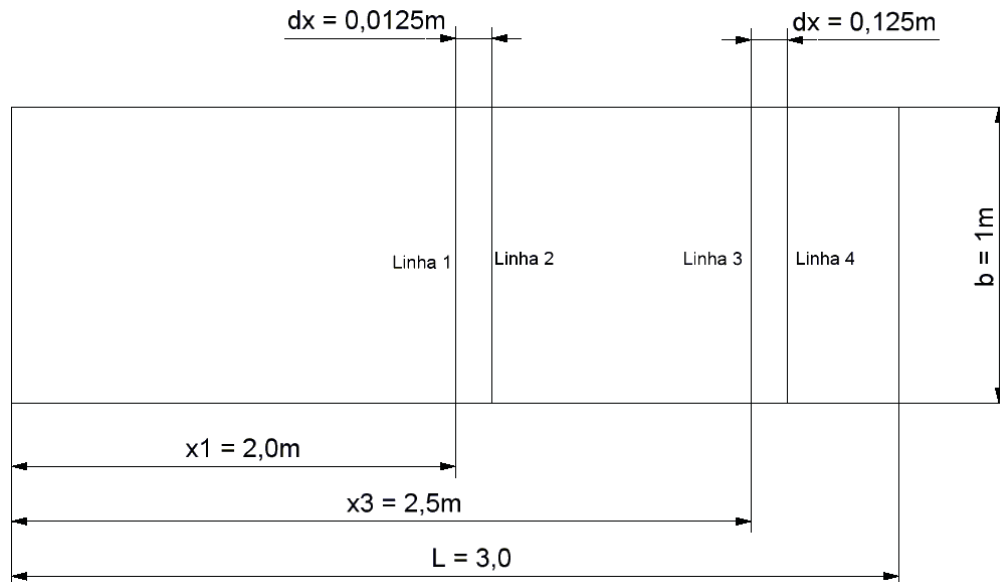


Figura 4.5 Disposição das linhas de tomada de pontos no domínio de cálculo.

O gradiente de velocidades foi calculado diretamente com as diferenças entre dois pontos consecutivos da reta tanto para a velocidade u , ou seja $\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$, com i indo de 1 ao número de pontos sobre a reta menos 1, quanto para a cota y ($\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$). Após o cálculo do gradiente tomou-se o menor valor calculado, verificando se este estava realmente junto à parede.

O cálculo da tensão de cisalhamento por estes dois métodos visou estudar se o comportamento dos erros de uma variável que depende de outra é semelhante ao da variável básica, bem como a avaliação dos erros a partir da variável pressão. Lembra-se aqui que os resultados do capítulo anterior são referentes unicamente aos resultados de velocidade.

Para o estudo do efeito de bidimensionalidade da malha sobre os estimadores de erro ambas as variáveis foram tomadas em duas posições, e em cada posição, para o cálculo do gradiente de pressão, conforme explicado acima, foram colocadas duas linhas verticais distanciadas entre si de 0,0125m. A primeira posição, ou Linha 1, foi localizada em $x=2,0$ m e a segunda, ou Linha 3, em $x= 2,5$ m. Estas posições foram escolhidas a fim de se evitar efeitos do desenvolvimento do escoamento na entrada ou das condições de contorno na saída do domínio.

Para efeito de comparação apenas, mostra-se na Figura 4.6 o perfil de velocidades para ambas as linhas em estudo. Não dá para diferenciar, nesta figura os resultados obtidos nas linhas de tão próximos que são, sendo que a dispersão em relação à solução analítica também é bastante baixa. Entretanto, apenas com esta figura não é possível dizer se uma ou outra Linha terá um comportamento, com relação aos estimadores de erro, melhor ou pior.

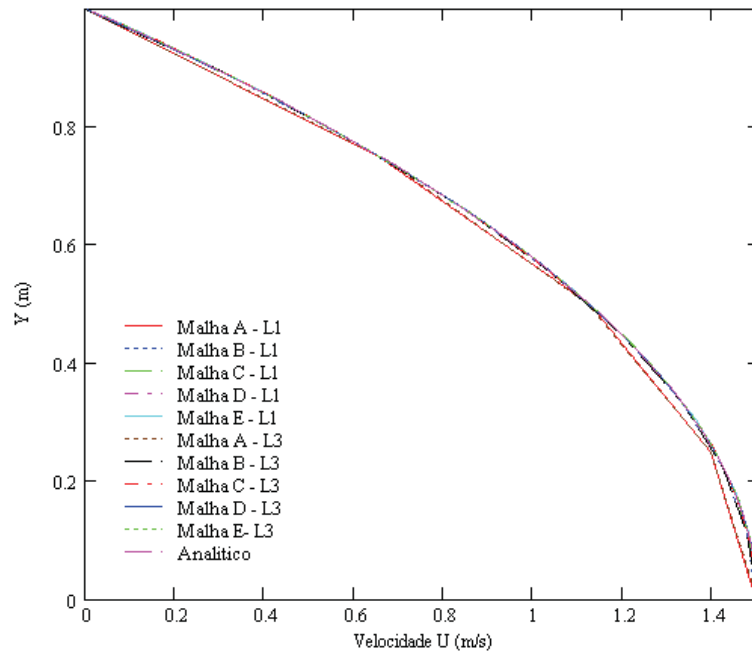


Figura 4.6 Perfil de velocidades obtido com Blend-Factor = 1.

O mesmo acontece com a variável tensão de cisalhamento baseada no gradiente de pressão (Figura 4.7), mas, neste caso, a dispersão dos resultados, principalmente junto à parede, é um pouco maior, sendo possível notar oscilações junto ao valor de referência por todo o conjunto de resultados. Estas oscilações não são percebidas para o perfil de velocidades.

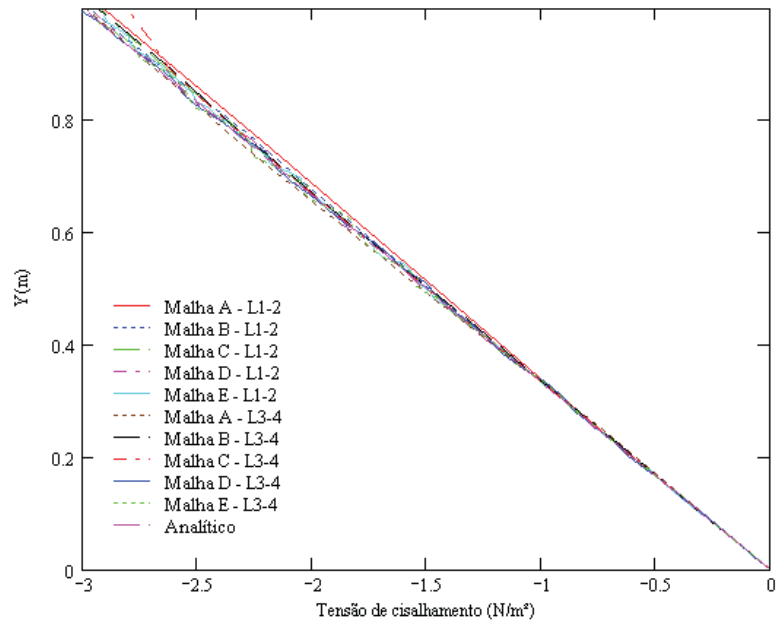


Figura 4.7 Perfil da tensão de cisalhamento do escoamento. Obtido com *Blend Factor* = 1.

Da Figura 4.7 à Figura 4.9, inclusive, são mostradas as variações dos resultados com o refino de malha para os três esquemas de discretização do termo advectivo para todas as variáveis em estudo. É possível notar que não há uma correlação clara entre os resultados obtidos na Linha 1 e na Linha 3, para a variável velocidade máxima embora estes deveriam ser iguais. Isto se reflete no cálculo das ordens e incertezas que serão mostradas mais a frente.

A variável tensão de cisalhamento baseada no gradiente de pressão tem um comportamento oscilante em todas as posições de cálculo que não permite o cálculo da ordem aparente, impossibilitando o cálculo das estimativas de erro baseadas nesta ordem para esta variável. Observam-se oscilações em todas as variáveis, porém, ambas as outras variáveis é possível calcular a ordem aparente e, portanto, as estimativas de erro baseadas nesta ordem.

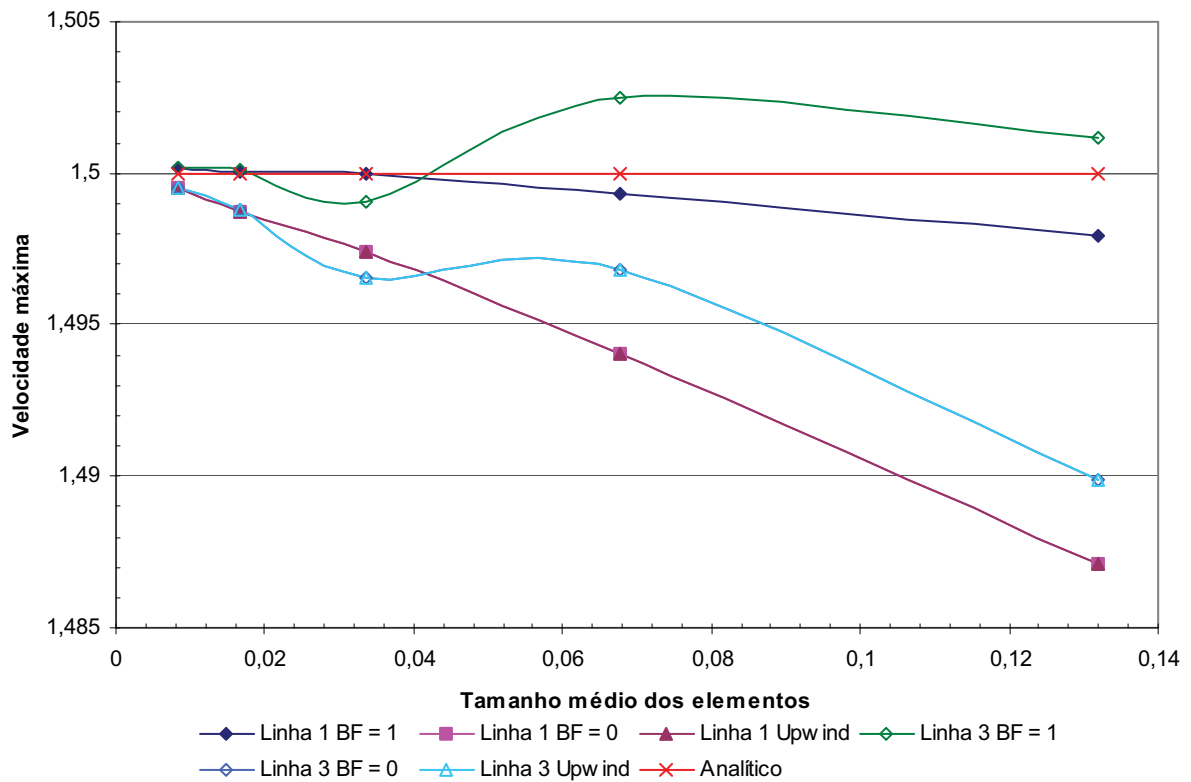


Figura 4.8 Variação da velocidade máxima com o tamanho médio do elemento para os três esquemas de discretização do termo advectivo.

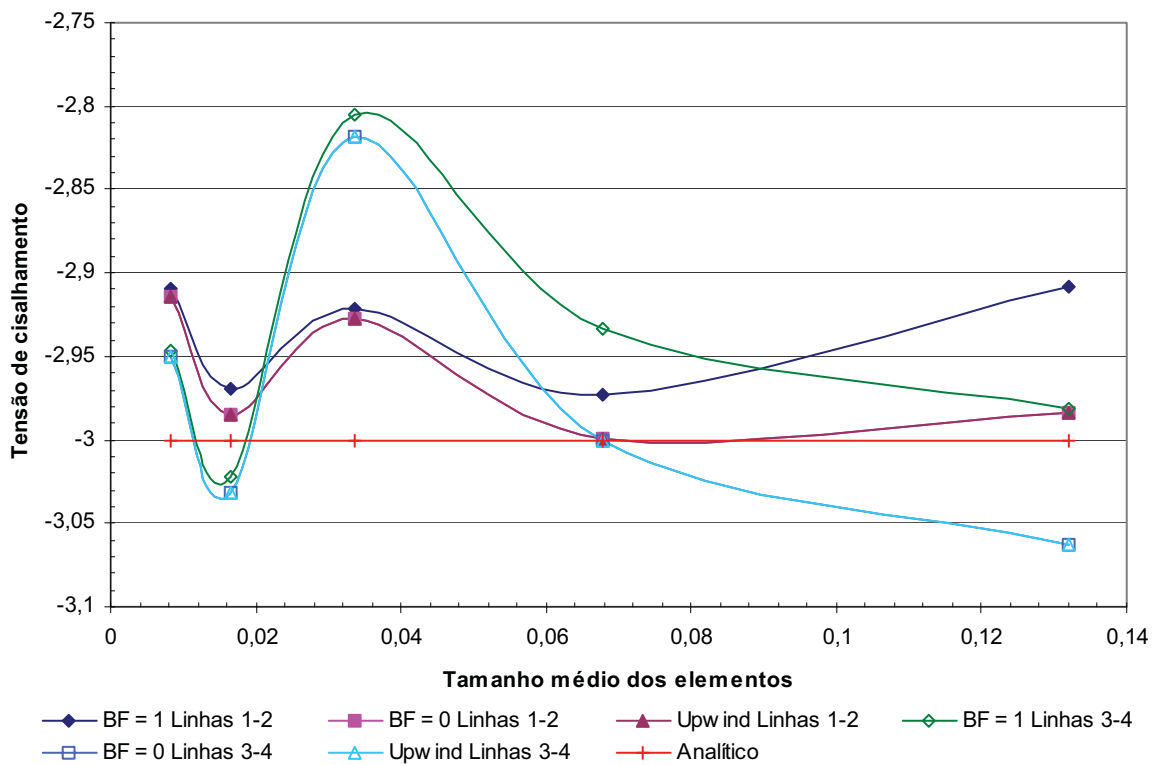


Figura 4.9 Tensão de cisalhamento com o refinamento de malha para os três esquemas de discretização e para as duas posições de cálculo.

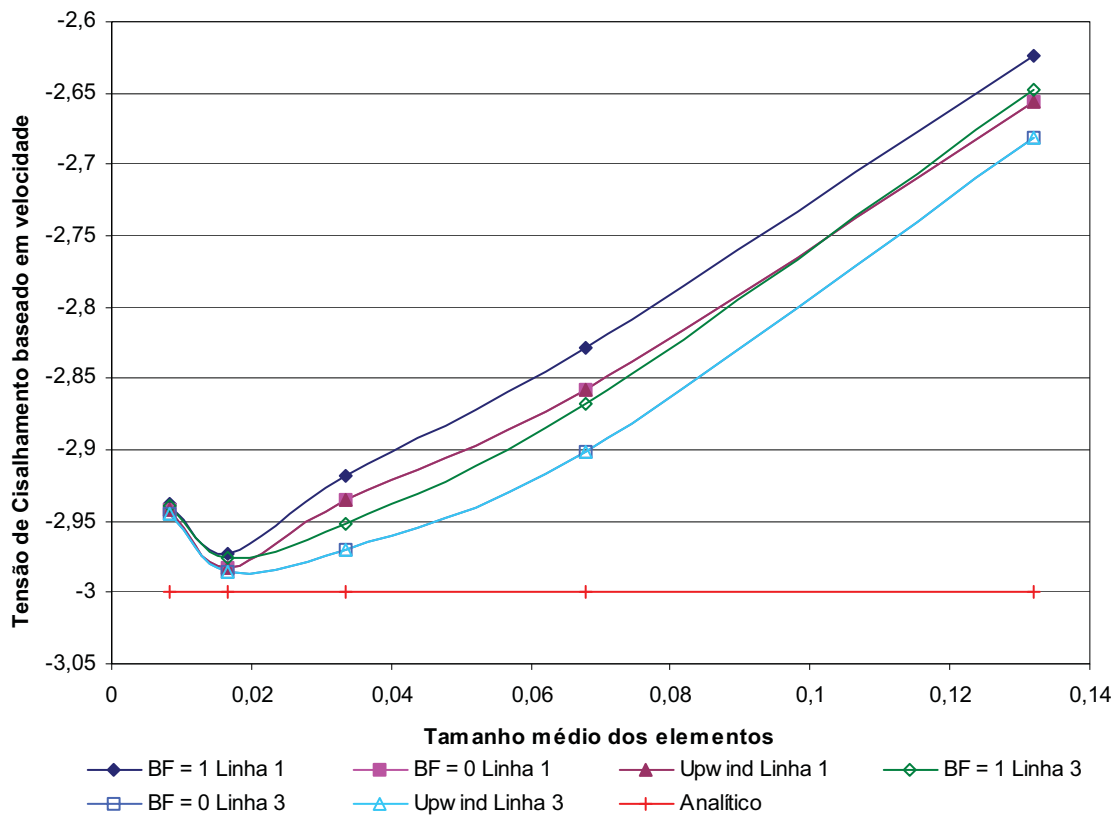


Figura 4.10 Variação da tensão de cisalhamento baseada na velocidade com o refino de malha para os três esquemas de discretização e para as duas posições de cálculo.

O melhor comportamento das três variáveis de estudo é o da variável tensão de cisalhamento baseada na velocidade, em que todos os resultados, independentemente do esquema de discretização do termo advectivo ou da posição de cálculo (Linha 1 ou Linha 3) tem valores bastante parecidos (Figura 4.9).

Os comportamentos das variáveis mostrados acima demonstram que cada variável, mesmo dependendo de variáveis primárias, como a velocidade neste caso, ou sendo uma mesma variável obtida de maneira diferente, se comporta de forma independente com o refino de malha. Isto se refletirá diretamente nas estimativas de erro a serem analisadas mais adiante.

4.3.2 Erro Numérico

Os valores do erro numérico para as diversas variáveis em estudo estão nas tabelas 4.4 a 4.9.

Tabela 4.4 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável velocidade máxima – Linha 1.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A	2,05683708191007E-03	1,28579139709499E-02	1,28579139709499E-02
B	7,05838203429954E-04	5,94019889832009E-03	5,94019889832009E-03
C	2,18152999900134E-05	2,57635116576993E-03	2,57635116576993E-03
D	-5,35249710100771E-05	1,28924846648992E-03	1,28924846648992E-03
E	-1,94311141969994E-04	4,83989715579947E-04	4,83989715579947E-04

Tabela 4.5 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável velocidade máxima - Linha 3.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A	-1,18517875671009E-03	1,01437568664600E-02	1,01437568664600E-02
B	-2,48146057128995E-03	3,19731235503995E-03	3,19731235503995E-03
C	9,11474227909936E-04	3,47924232482999E-03	3,47924232482999E-03
D	-1,01923942569915E-04	1,23286247252996E-03	1,23286247252996E-03
E	-1,71065330510034E-04	4,99367713929999E-04	4,99367713929999E-04

Tabela 4.6 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável tensão mínima baseada no gradiente de pressão Linhas 1-2.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A	-9,21245875374299E-02	-1,65938698048800E-02	-1,65938698048800E-02
B	-2,76373762612301E-02	-6,10349234199781E-04	-6,10349234199781E-04
C	-7,82778117312000E-02	-7,22506141211898E-02	-7,22506141211898E-02
D	-3,07654160865201E-02	-1,53350245093402E-02	-1,53350245093402E-02
E	-9,06836646437501E-02	-8,63334751567502E-02	-8,63334751567502E-02

Tabela 4.7 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável tensão mínima baseada no gradiente de pressão Linhas 3-4.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A	-1,80720593564598E-02	6,31329989128200E-02	6,31329989128200E-02
B	-6,64708462873600E-02	1,08718457342016E-03	1,08718457342016E-03
C	-1,94511173235480E-01	-1,81865502300570E-01	-1,81865502300570E-01
D	2,25543115451399E-02	3,21673119838302E-02	3,21673119838302E-02
E	-5,39989498356501E-02	-4,96958403214500E-02	-4,96958403214500E-02

Tabela 4.8 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável tensão mínima baseada no gradiente de velocidades Linha 1.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A	-3,76089572906490E-01	-3,43535661697390E-01	-3,43535661697390E-01
B	-1,71889393019670E-01	-1,42163005518320E-01	-1,42163005518320E-01
C	-8,23066164557100E-02	-6,55798222921899E-02	-6,55798222921899E-02
D	-2,76032404663100E-02	-1,74079175238600E-02	-1,74079175238600E-02
E	-6,27881174365501E-02	-5,79834133823001E-02	-5,79834133823001E-02

Tabela 4.9 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável tensão mínima baseada no gradiente de velocidades Linha 3.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A	-3,52119172477250E-01	-3,18820440586190E-01	-3,18820440586190E-01
B	-1,32511013561460E-01	-9,88018126782499E-02	-9,88018126782499E-02
C	-4,87713724263799E-02	-2,94089981629200E-02	-2,94089981629200E-02
D	-2,39553912851398E-02	-1,37920313353601E-02	-1,37920313353601E-02
E	-6,02580402128399E-02	-5,55348566181699E-02	-5,55348566181699E-02

Os valores do erro numérico acabam por acompanhar os valores das variáveis de interesse e, por isto, há variações nos valores encontrados e até mesmo de sinal. Comparando-se a variável tensão mínima obtida com o gradiente de pressão e com o gradiente de velocidade, vê-se que este último possui, como já visto na seção anterior, um comportamento bastante melhor, com oscilações menores. Vê-se também que os resultados dependentes do gradiente de velocidade apresentam menores diferenças entre os erros obtidos com os diversos esquemas de discretização.

Os erros para os esquemas de primeira ordem são rigorosamente iguais, assim como no caso estudado anteriormente.

4.3.3 Ordem Aparente

Devido às oscilações mostradas na Figura 4.9, não foi possível o cálculo das ordens aparente para a variável tensão de cisalhamento baseada em gradiente de pressão, prejudicando as análises posteriores. As oscilações existentes nos resultados de velocidade, bem como da tensão de cisalhamento baseada no gradiente de velocidade também não permitiram o cálculo da ordem aparente para diversas malhas. Os resultados calculados estão nas Tabelas 4.10 a 4.13, abaixo.

Tabela 4.10 Ordem aparente calculada para a variável velocidade máxima – Linha 1.

Malhas	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A-B-C	1,070204288440360	1,129536232204680	1,129536232204680
B-C-D	3,144520997089160	1,374973482087700	1,374973482087700
C-D-E	INEXISTENTE	0,632951921964603	0,632951921964603

Tabela 4.11 Ordem aparente calculada para a variável velocidade máxima – Linha 3.

Malhas	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A-B-C	INEXISTENTE	INEXISTENTE	INEXISTENTE
B-C-D	INEXISTENTE	INEXISTENTE	INEXISTENTE
C-D-E	3,784590541246330	1,560367903181990	1,560367903181990

Tabela 4.12 Ordem aparente calculada para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade. Linha 1.

Malhas	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A-B-C	1,280828331687360	1,490972337941600	1,691478632557860
B-C-D	0,711389747586674	0,669332975187517	0,718755194672673
C-D-E	INEXISTENTE	INEXISTENTE	INEXISTENTE

Tabela 4.13 Ordem aparente calculada para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade. Linha 3

Malhas	Numérico BF1	Numérico BF0	Numérico Upwind
A-B-C	1,487075605556830	1,766647616775490	1,766647616775490
B-C-D	1,737886107004130	2,128854045520640	2,128854045520640
C-D-E	INEXISTENTE	INEXISTENTE	INEXISTENTE

Os valores de ordem aparente são bastante diferentes da ordem assintótica para todas as variáveis em todas as malhas, indicando mais uma vez que o intervalo de convergência não foi atingido. Porém não há, nem valores muito grandes nem muito pequenos, o que levará a estimativas do erro bastante próximas do erro numérico.

4.3.4 Ordem Efetiva

As ordens efetivas para as malhas utilizadas neste estudo estão mostradas nas Tabelas 4.14 a 4.19, abaixo. Como já dito no Capítulo 3 a inexistência da ordem efetiva indica que os resultados ainda não têm um comportamento assintótico. Nota-se também uma variação bastante grande nos resultados bem como muitas inversões de sinal.

Tabela 4.14 Ordens efetivas para a variável velocidade máxima. Linha 1

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0	Upwind
A-B	1,60156983720418	1,15634835853341	1,15634835853341
B-C	4,95098925969427	1,18957973185015	1,18957973185015
C-D	INEXISTENTE	0,97780100842366	0,97780100842366
D-E	-1,86932852994007	1,42050650278174	1,42050650278174

Tabela 4.15 Ordens efetivas para a variável velocidade máxima Linhas 3

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0	Upwind
A-B	-1,10653877052258	1,72886602587234	1,72886602587234
B-C	INEXISTENTE	-0,12033518344766	-0,12033518344766
C-D	INEXISTENTE	1,46529463239963	1,46529463239963
D-E	-0,75076698907866	1,31031699845592	1,31031699845592

Tabela 4.16 Ordens efetivas para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de pressão.
Linhas 1-2

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0	Upwind
A-B	1,80287690719818	4,94568055093702	4,94568055093702
B-C	-1,48253813461612	-6,79806915237754	-6,79806915237754
C-D	1,31896954055092	2,18916781259220	2,18916781259220
D-E	-1,56728347795303	-2,50547930006892	-2,50547930006892

Tabela 4.17 Ordens efetivas para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de pressão.
Linhas 3-4

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0	Upwind
A-B	-1,95026030515858	6,08208003628704	6,08208003628704
B-C	-1,52900531940795	INEXISTENTE	INEXISTENTE
C-D	INEXISTENTE	INEXISTENTE	INEXISTENTE
D-E	INEXISTENTE	INEXISTENTE	INEXISTENTE

Tabela 4.18 Ordens efetivas para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade.
Linha 1

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0	Upwind
A-B	1,17245969933095	1,32121607424601	1,32121607424601
B-C	1,04864640002919	1,10177160604063	1,10177160604063
C-D	1,54303467294966	1,87328036604213	1,87328036604213
D-E	-1,19154616625991	-1,74452338681467	-1,74452338681467

Tabela 4.19 Ordens efetivas para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade.
Linha 3

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0	Upwind
A-B	1,46345386726589	1,75426896946222	1,75426896946222
B-C	1,42333762769043	1,72564668553278	1,72564668553278
C-D	1,00412106507943	1,06945650037298	1,06945650037298
D-E	-1,33741696247577	-2,01954535496837	-2,01954535496837

4.3.5 Extrapolação de Richardson / Erro Numérico

Nas Figuras 4.11 a 4.13 que se seguem foram postos os resultados da relação entre a estimativa do erro numérico pelo Estimador de Richardson (U_{ri}) tanto para a ordem assintótica quanto para a ordem aparente, sempre comparando os resultados nas posições obtidas no mesmo gráfico a fim de se verificar o efeito da bidimensionalidade nos cálculos das estimativas de erros.

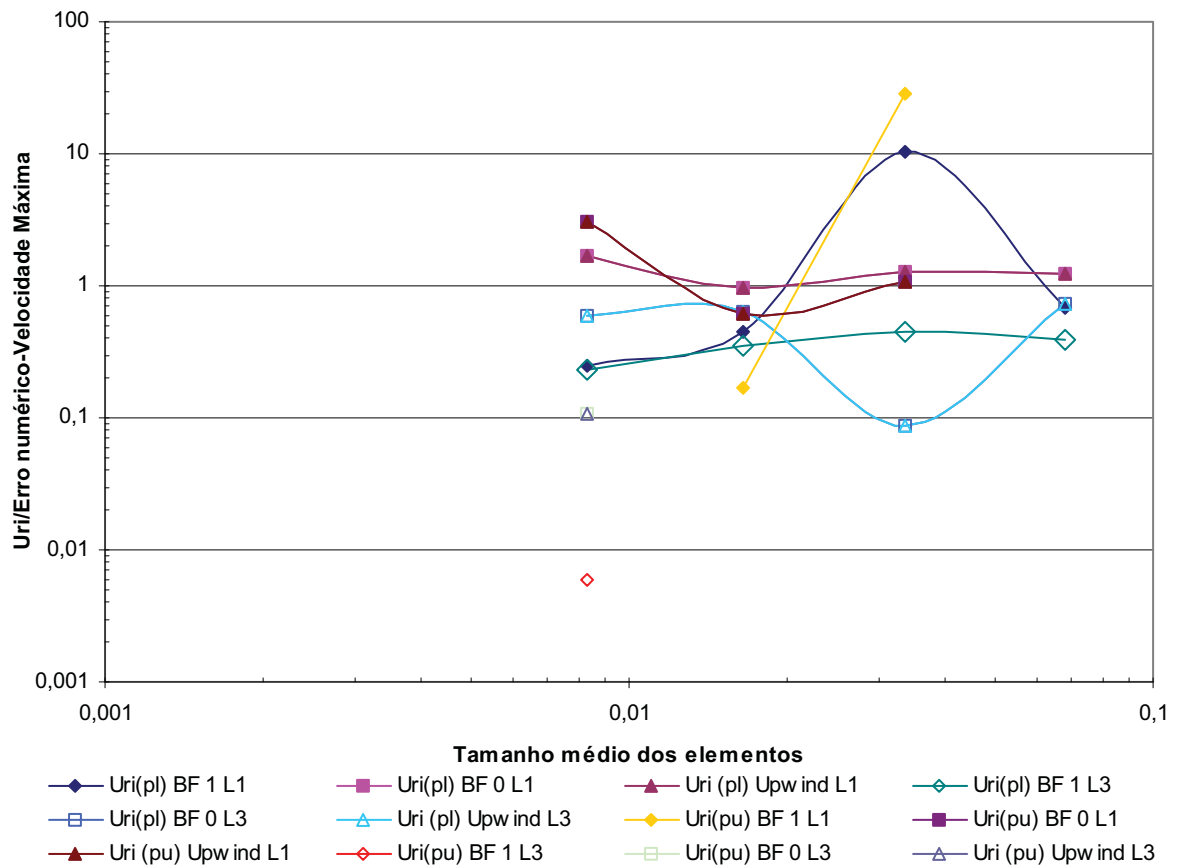


Figura 4.11 Relação entre a estimativa de erro e o erro numérico para a variável velocidade máxima.

Conforme dito anteriormente, as previsões dos erros baseados no estimador de Richardson são bastante boas, principalmente para a linha 1, nos esquemas de discretização do termo advectivo de primeira ordem. A dispersão dos resultados é grande se for considerado o ponto para *Blend Factor* = 1, linha 3, entretanto a maioria dos resultados obtidos estão relativamente próximos da unidade. Percebe-se que não há nenhuma relação entre os resultados obtidos nas Linhas 1 e 3, para todos os esquemas de discretização do termo advectivo utilizados.

Como não foi possível o cálculo da ordem aparente para a variável tensão mínima baseada no gradiente de pressão para nenhuma das malhas em nenhuma das duas posições, não é possível o cálculo da estimativa do erro baseada nesta ordem para ambas as posições. Os resultados com a ordem assintótica se comportam de maneira semelhante à velocidade, com boas previsões do erro sendo que a maioria já é maior que o erro numérico. As oscilações indicam um comportamento ainda não-assintótico.

O comportamento das estimativas de erro para as linhas 1-2 e 3-4 para os esquemas *Upwind* e *Blend Factor*=0 se comportam de maneira semelhante com resultados praticamente

idênticos na Malha C. Para o esquema *Blend Factor* = 1 não há uma relação, apesar dos resultados na Malha C serem bastante próximos também.

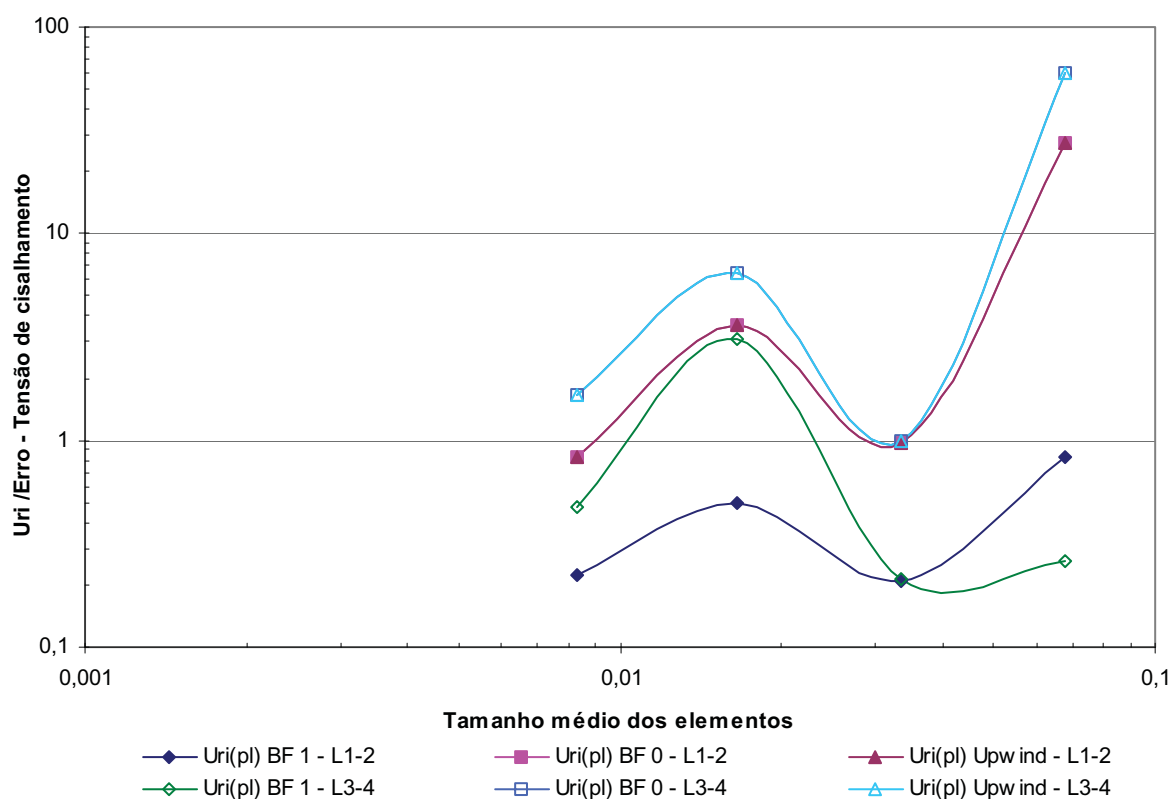


Figura 4.12 Estimador de Richardson / Erro numérico para a variável tensão de cisalhamento baseada no gradiente de pressão. A ausência dos dados referentes à ordem aparente se deve ao fato de não ser possível o cálculo desta para ambas as posições em estudo.

As previsões do erro numérico para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade (Figura 4.12) obtidos com a ordem aparente mostram comportamentos similares nos esquemas de discretização, entretanto não há uma correlação entre os resultados obtidos com a Linha 1 e com a Linha 3. Mas, de forma geral, os resultados são bons uma vez que todos eles estão próximos da unidade, embora muitos menores que um, além da possibilidade do cálculo de vários pontos (dois pontos por malha, para ser mais exato) das estimativas para a ordem aparente.

Dos resultados baseados na ordem aparente, aqueles baseados na Linha 1 são maiores que um e os baseados na Linha 3 são menores que a unidade, sendo que as piores estimativas são aquelas feitas com os esquemas de discretização do termo advectivo de primeira ordem.

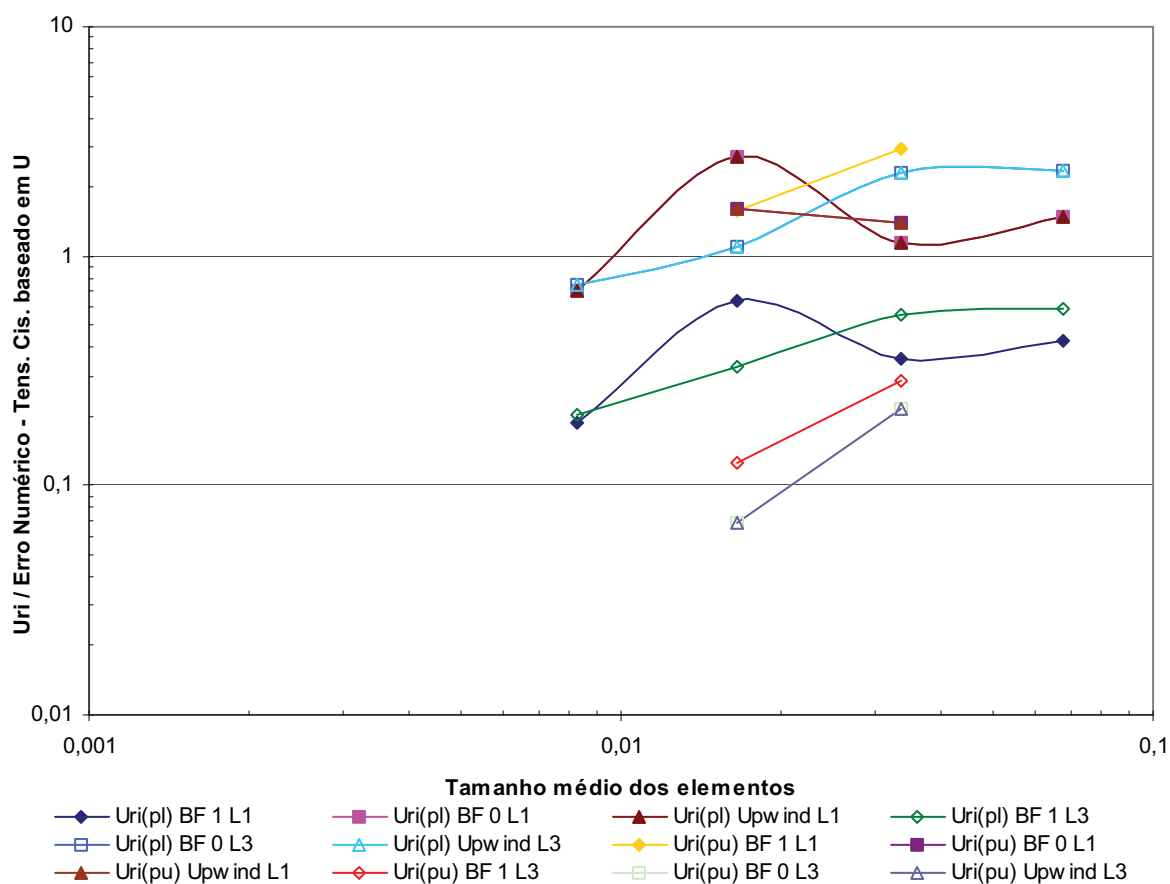


Figura 4.13 Relação entre a estimativa de erro e o erro numérico para a variável velocidade máxima

Independentemente da variável de estudo, a maioria das sub-estimativas apresentadas acima não podem ser corrigidas pelo fator de segurança do Estimador GCI. Assim, o problema ainda continua para este caso, assim como o anterior.

4.3.6 GCI / Erro Numérico

Como esperado o comportamento do estimador GCI com o refino da malha, mostrado nas Figuras 4.13 a 4.15, é idêntico ao comportamento do estimador de Richardson, sendo apenas multiplicado por um fator constante.

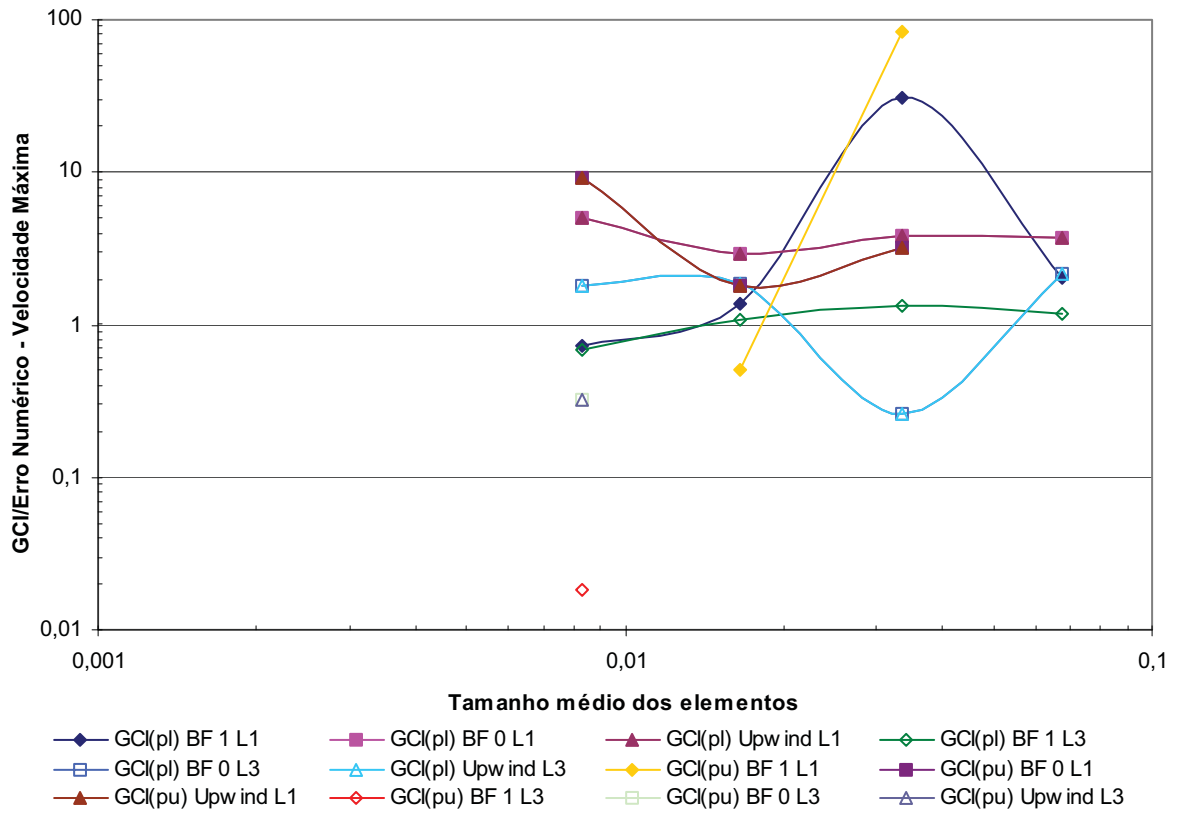


Figura 4.14 GCI/Erro Numérico para a variável velocidade máxima, linhas 1 e 3.

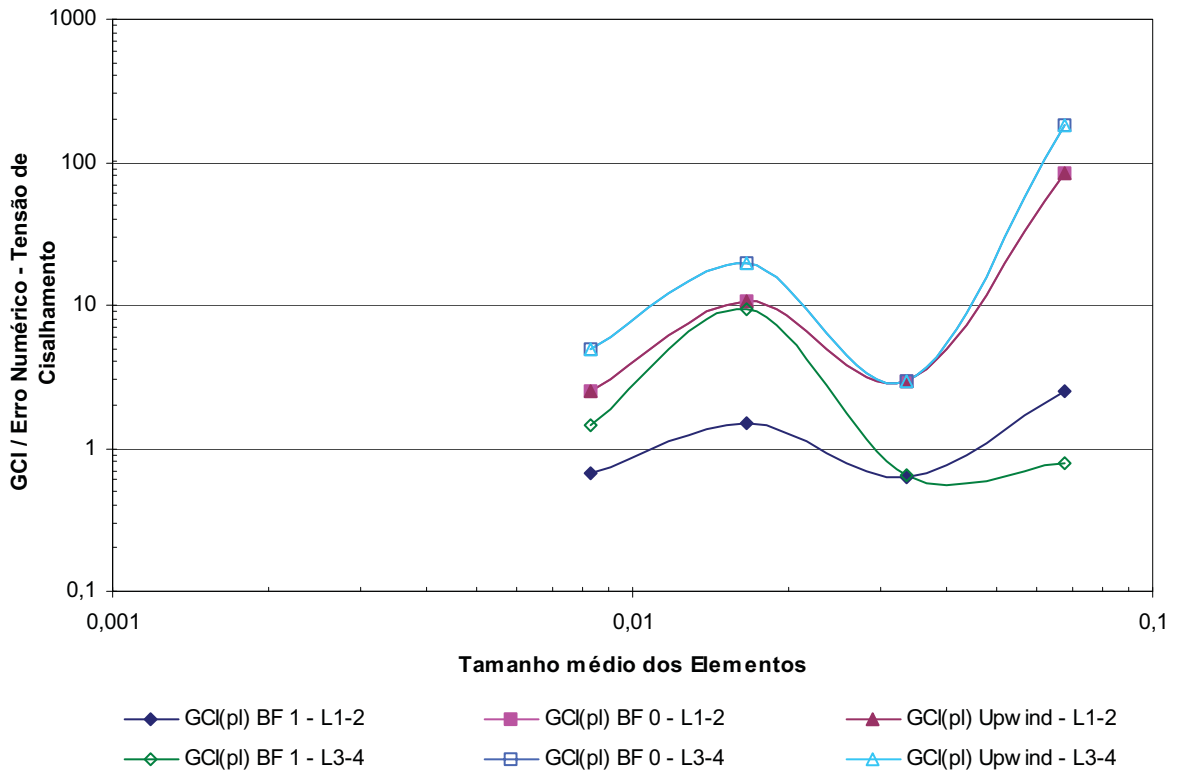


Figura 4.15 GCI / Erro numérico para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de pressão.

Também como previsto na seção anterior o fator de segurança aplicado pelo método GCI ao estimador Extrapolação de Richardson nas variáveis não surtiu os efeitos necessários uma vez que há vários pontos com sub-estimativas do erro. Verifica-se também pontos com estimativas muito elevadas, algo também não desejado.

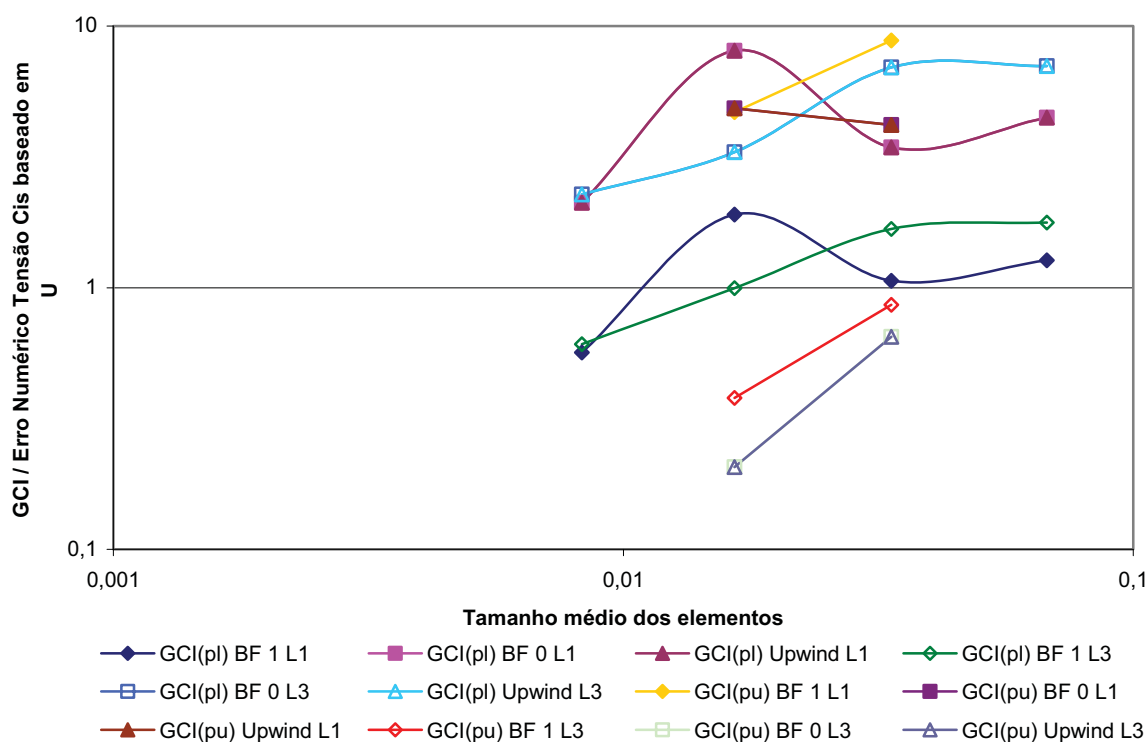


Figura 4.16 GCI / Erro Numérico para a variável tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade.

4.4 Conclusão

Neste capítulo estudou-se o comportamento das estimativas de erro para o problema do escoamento entre placas planas semi-infinitas paralelas. Inicialmente apresentou-se o problema e demonstrou-se a solução analítica deste. As variáveis de interesse não são globais, mas locais, podendo-se assim, tentar se estudar o efeito da bidimensionalidade nos estimadores de erro. Estas variáveis foram a velocidade e a tensão de cisalhamento em duas localidades diferentes do domínio de cálculo.

Os resultados do comportamento das variáveis de saída do programa, ou seja, velocidade e pressão, através do domínio de cálculo, permitia dizer que os resultados estavam bastante bons uma vez que este comportamento era bastante próximo do valor analítico.

Em seguida, analisou-se o comportamento da velocidade máxima e da tensão de cisalhamento mínima. Com a simples análise destes dados, já foi possível evidenciar os

problemas que ocorreriam no cálculo da ordem aparente, já que houveram muitas oscilações nos resultados, principalmente na tensão mínima baseada no gradiente de pressão.

O fato de não se poder calcular a ordem aparente impediu o cálculo das estimativas de erro baseadas nesta ordem para diversos pontos e análises posteriores do seu comportamento ficaram bastante prejudicadas. Para a variável tensão mínima baseada no gradiente de pressão não foi possível o cálculo de sequer uma ordem aparente em nenhuma das duas situações de estudo, o que obviamente prejudica a análise mais profunda dos estimadores de erro baseadas nesta ordem.

Isto evidencia uma dificuldade na utilização da ordem aparente para a estimativa de erro. Se, por um lado, ela não necessita o conhecimento prévio do seu valor, por outro ela é muito suscetível a variações nos valores obtidos com as diversas malhas, a qual não permite o seu cálculo e todas as análises posteriores, mesmo com resultados que podem ser considerados como bons.

O estimador Extrapolação de Richardson se mostrou, tanto para a ordem assintótica quanto para a ordem aparente, assim como no problema anterior, pontos de ineficiência pois as incertezas por ele previstas ficaram, em alguns pontos, abaixo do erro numérico calculado. A inserção do fator de segurança 3 para o cálculo do GCI, baseado em ambas as ordens, acabou não sendo suficiente para corrigir todos os pontos. Entretanto se ressalta que a dispersão da maioria dos resultados não é muito grande, tanto para o GCI quanto para o Estimador de Richardson.

Os estudos de bidimensionalidade acabaram por mostrar que não há uma correlação entre os erros obtidos nos diferentes pontos. Com isto, pode-se dizer que não se deve, para variáveis locais, se estender as estimativas de erros de uma determinada região para todo o domínio, já que os resultados se comportam de maneira diferente.

Já a comparação entre os resultados obtidos com o gradiente de pressão e com o gradiente de velocidade mostrou há uma grande influência da forma de obtenção de um resultado derivado das variáveis básicas (velocidade e pressão no caso em estudo) haja vista que as variáveis de base têm comportamentos, com relação às estimativas de erro, distintas.

Os diferentes comportamentos da velocidade máxima e da tensão de cisalhamento mínima baseada no gradiente de velocidade com relação às estimativas de erro nos mostram que não se podem generalizar os erros de uma variável básica para uma variável derivada desta e vice-versa.

5 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho era o de avaliar o comportamento dos estimadores de erro Extrapolação de Richardson e GCI usando-se malhas não-estruturadas e o Método de Volumes Finitos baseado em Elementos. Para isto se elegeram três problemas em regime permanente e de escoamento laminar cujas soluções analíticas são conhecidas e divulgadas na literatura. O procedimento de avaliação seguiu as recomendações de Celik (2003) e a teoria dos estimadores está de acordo com os diversos trabalhos de Roache e Marchi citados.

Ao invés de se fazer a programação de um novo código computacional para o método supra citado, o qual poderia, além dos erros numéricos, apresentar erros de programação o que inviabilizaria as análises propostas, elegeu-se o *software* comercial de análise de dinâmica dos fluidos CFX, o qual é baseado no Método de Volumes Finitos baseado em Elementos, para a realização das simulações numéricas. A descrição do método, feita no Capítulo 2, é baseada nos textos de Maliska (2004) e Souza (2000).

A obtenção de soluções com erros de resíduo bastante baixos para os problemas propostos para diversas malhas não foi difícil para nenhum dos problemas e dos esquemas de discretização do termo advectivos utilizados. Entretanto, a obtenção de soluções com um comportamento assintótico, com o refino de malha, só foi possível para o problema da cavidade quadrada, mostrado no capítulo 3.

Em ambos os problemas estudados, a comparação de variáveis locais, como velocidades e tensões de cisalhamento, não era possível, em alguns pontos, fazer uma distinção clara entre a curva numérica e a curva analítica; indicando, qualitativamente, que os resultados obtidos eram bastante bons.

A análise dos estimadores de erro baseado na ordem aparente foi bastante prejudicada pelas variações nas soluções obtidas, principalmente para o problema mostrado no capítulo 4 demonstrando uma primeira fragilidade do esquema de cálculo da ordem aparente: a sua sensibilidade à variação das soluções obtidas.

Os resultados obtidos para o problema da cavidade quadrada (Capítulo 3) mostraram um comportamento já bastante próximo do assintótico, com sobre-estimativas do erro para quase todas as malhas. Entretanto, nas malhas mais finas começou-se a ter variações nas respostas obtidas o que impossibilitou o cálculo da ordem aparente para a malha mais fina.

Os estimadores de erro baseados na ordem assintótica tiveram um comportamento semelhante àqueles baseados na ordem aparente para o problema da cavidade quadrada. Já os resultados para os problemas de escoamento entre placas planas paralelas mostraram-se ruins,

pois quase a totalidade das estimativas de erro calculadas é menor que o erro verdadeiro, tanto para o estimador Extrapolação de Richardson quanto para o estimador GCI.

Ainda no capítulo 4, estudou-se o efeito de bidimensionalidade nos estimadores de erro. Verificou-se, então, que as estimativas de erro para cada uma das posições estudadas para a variável tensão de cisalhamento se comportava de maneira independente da outra, não havendo nenhuma correlação visível entre elas. Assim, concluiu-se que, para variáveis locais, não se pode inferir o erro de uma única posição para todo o domínio.

Estudou-se ainda no capítulo 4 a influência da forma de cálculo da variável de interesse sobre os estimadores de erro e se verificou que esta forma de cálculo é de suma importância, devendo ser relatada, haja vista que os resultados podem ser sensivelmente diferentes uns dos outros.

Deve-se lembrar ainda que neste trabalho não foram realizados estudos com refinamentos locais de malha o que, segundo Roache (1997), pode ter grande influência nos cálculos, sendo esta a primeira sugestão de novos estudos.

A comparação das estimativas de erro calculadas a partir de resultados para os problemas aqui estudados obtidos com malhas estruturadas e não-estruturadas também não foi realizada neste trabalho, devendo este trabalho ser realizado em um futuro próximo.

Note-se ainda que este trabalho limitou-se a estudar problemas laminares com geometria do domínio de cálculo bastante simples (quadrado e retângulos), todos com elementos tetraédricos. O estudo do efeito da forma do elemento nos resultados não foi realizado, bem como geometrias mais complexas e problemas cuja complexidade matemática é maior, tais como escoamentos turbulentos, reativos, dentre outros sendo estes estudos sugestões para trabalhos futuros.

Outro ponto ainda pouco estudado é o efeito das funções de forma utilizadas nos elementos sobre o erro numérico. No Método dos Elementos Finitos é comum a utilização de funções hierárquicas (Szabó e Babuška, 1991) principalmente em esquemas adaptativos do tipo p. Sugere-se, aqui um trabalho de implementação destas funções no Método de Volumes Finitos baseado em Elementos e o estudo dos seus efeitos sobre o erro numérico e sobre os estimadores de erro. A principal vantagem da utilização destas funções de forma é a fácil alteração da ordem da função de interpolação, podendo assim se fazer rapidamente um estudo da diminuição do erro de discretização com o aumento da ordem da função de interpolação.

A realização das estimativas de erro para malhas não-estruturadas a partir das técnicas estudadas neste trabalho, apesar de exigir um certo trabalho braçal, é bastante simples. Porém é recomendável que se conheça, de antemão, a ordem assintótica do esquema de discretização, pois, devido à sensibilidade da ordem aparente às variações dos resultados,

pode se ter grandes dificuldades no cálculo das estimativas de erro baseando-se apenas na ordem aparente. Além disto, as estimativas de erro baseadas na ordem assintótica se mostraram mais precisas que as baseadas na ordem aparente.

Portanto, devido aos problemas apresentados, não se deve ter a ilusão que esta é uma fórmula mágica que resolverá todos os problemas de erros associados a simulações numéricas. O bom senso e principalmente o conhecimento sobre a física e a matemática envolvidas no problema (e na sua solução) em estudo continuam sendo os melhores companheiros do analista de mecânica dos fluidos computacional.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] AIAA; “*Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations*”, AIAA-G-077-1998, Reston, VA, 1998.
- [2] ANSYS, INC.: “*ICEM CFD 4.0 – CFX User’s Manual*”. Documentação eletrônica fornecida junto com o *software* ICEM-CFD 4.0-CFX. 2003.
- [3] ANSYS, INC.; “*CFX-5.0 Solver Theory*”. Documentação eletrônica que acompanha o *software* CFX 5.0. 2004.
- [4] BLASIUS, H.; “*The Boundary Layers in Fluids with Little Friction*” (em Alemão), Zeitschrift für Mathematik und Physik, no. 56, vol. 1, pp. 1-37, 1908. Tradução para o inglês disponível como o relatório NACA TM 1256 de fevereiro de 1950.
- [5] CAFEO, J.A.; ROACHE, P.J.; private communication of draft V&V definitions, April, 2002.
- [6] CELIK, I.B.; “*Procedure for Estimation and Reporting of Discretization Error in CFD Applications*”. 2003. Cópia eletrônica obtida em <http://www.asme.org/pubs/journals/fluideng/JFENumaccuracy.pdf>, em 18/06/2004.
- [7] CELIK, I.; KARATEKIN, O.; “*Numerical Experiments on Application of Richardson Extrapolation with Nonuniform Grids*”. Transactions of ASME. Vol.119, pp. 584-590. 1997.
- [8] CHAPRA, S.C.; CANALE, R.P.; “*Introduction to Computing for Engineers*”. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 1994.
- [9] EÇA, L.; HOESKTRA, M.; “*An Example of Uncertainty Estimation in the Calculation of a 2-D Turbulent Flow*”. MARNET-CFD Final Workshop. Haslar. 2003.
- [10] FERZIGER, J.H.; “*Estimation and Reduction of Numerical Error*”. FED Vol. 158, Symp on Quantification of Uncertainty on Computational Fluid Dynamics, ASME Fluid Engineering Division, Washington, D.C., pp 1-8. 1993.

- [11] FERZIGER, J.H.; PERIĆ, M.: “*Computational Methods for Fluid Dynamics*”, 2nd Edition, Springer, Berlin, 1999.
- [12] FERZIGER, J.H.; PERIĆ, M.: “*Computational Methods for Fluid Dynamics*”, 3rd Rev. Edition, Springer, Berlin, 2002.
- [13] FOX, R.W.; McDONALD, A.T.: “*Introdução à Mecânica dos Fluidos*”. Tradução de Ricardo Nicolau Nassar Koury e Geraldo Augusto Campolina França do livro “*Introduction to Fluid Mechanics*”. 5^a Edição. Rio de Janeiro: LTC. 2001.
- [14] FREITAS, C.J.: “*The CFD Triathlon: Three Laminar Flow Simulations by Commercial CFD Codes*”. Proceedings of the Fluids Engineering Conference, ASME, FED- Vol. 160. 1993.
- [15] GHIA, K; GHIA, K.N.; SHIN, C.T.: “*High-Re solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and Multigrid Method*”. Journal of Computational Physics, vol. 48. pp. 387-411. 1982.
- [16] ITTC; “*ITTC – Recommended Procedures – CFD, General; CFD Verification*”. Editado pelo 22^o ITTC QS GROUP, 1999. Cópia eletrônica obtida em http://itc.sname.org/2002_recomm_proc/7.5-03-01-04.pdf, em 18/06/2004.
- [17] ITTC; “*ITTC – Quality Manual*”. 22nd ITTC Proceedings. Report of the Resistance Committee. 1999. Cópia eletrônica obtida em http://pronet.wsatkins.co.uk/marnet/publications/pdf/itc_uncertainty.pdf, em 18/06/2004.
- [18] KUNDU, P.K.: “*Fluid Mechanics*”, San Diego: Academic Press, 1990.
- [19] LOGAN, R.W.; NITTA, C.K.: “*Verification and Validation Methodology and Quantitative Reliability at Confidence: Basis for an Investment Strategy*”. Relatório no. UCRL-ID-150874, de 08/11/2002. Cópia eletrônica obtida em <http://www.doc.gov/bridge> em 18/06/2004.

- [20] MALISKA, C. R.: “*Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*”. Rio de Janeiro, LTC. 2004.
- [21] MARCHI, C.H.; “*Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos*”. Tese de Doutorado, Florianópolis: UFSC, 2001.
- [22] MEHTA, U.B.; “*Guide to Credible Computer Simulations of Fluid Flows*”. Journal of Propulsion and Power, v. 12, n. 5, pp 940-948, 1996.
- [23] OBERKAMPF, W.L.; TRUCANO, T.G.; HIRSCH, C.; “*Verification, Validation and Predictive Capability on Computational Engineering and Physics*”, Invited paper on 21st Century Workshop. Laurel, Maryland. 2002.
- [24] OBERKAMPF, W.L.; BLOTTNER, F.G.; “*Issues in Computational Fluid Dynamics Code Verification and Validation*”. AIAA Journal, v. 36, no. 5, pp. 687-695, 1998.
- [25] PATANKAR, S.V.: “*Numerical heat Transfer and Fluid Flow*”. New York: Hemisphere, 1980.
- [26] RAW, M.J.; “*A New Control Volume Based Finite Element Procedure for the Numerical Solution of the Fluid Flow and Scalar Transport Equations*”. Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Waterloo. 1985.
- [27] RHIE, C.M.; CHOW, W.L.; “*Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation*”. AIAA Journal, vol. 21, no. 11, pp 1525-1532. 1983.
- [28] ROACHE, P.J.; “*Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies*”. Journal of Fluids Engineering. Vol. 116, pp 405-413. 1994.
- [29] ROACHE, P.J.; “*Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics*”. Annu. Rev. Fluid. Mech., vol. 29 pp 123-160, 1997.
- [30] ROACHE, P.J.; “*Verification and Validation in Computational Science and Engineering*”, Hermosa Publishers, Albuquerque, NM., 1998.

- [31] SHIH, T.M.; TAN, C.H.; HWANG, B.C.; “*Effects of Grids Staggering on Numerical Schemes*”. International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 9, pp 413-428. New York: John Wiley and Sons. 1989.
- [32] SOUZA, J.A.; “*Implementação de Um Método de Volumes Finitos com Sistema de Coordenadas Locais para a Solução Acoplada das Equações de Navier-Stokes*”. Dissertação de Mestrado. Florianópolis: UFSC. 2000.
- [33] SPURK, J.H.: “*Fluid Mechanics*”, Berlin: Springer, 1997.
- [34] STERN, F.; WILSON, R.V.; COLEMAN, H.W.; PATERSON, E.G.; “*Verification and Validation of CFD Simulations*”, IIHR Report no. 407, Iowa. 1999.
- [35] SZABÓ, B.; BABUŠKA, I.; “*Finite Element Analysis*”. New York: Wiley, 1991.

APÊNDICE - ESCOAMENTO SOBRE UMA PLACA PLANA

ESCOAMENTO SOBRE UMA PLACA PLANA

Introdução.

O último problema a ser estudado neste trabalho é o do escoamento, em regime permanente, sobre uma placa plana semi-infinita, de comprimento L , paralela à direção de um escoamento permanente, incompressível e em regime laminar (Figura 1).

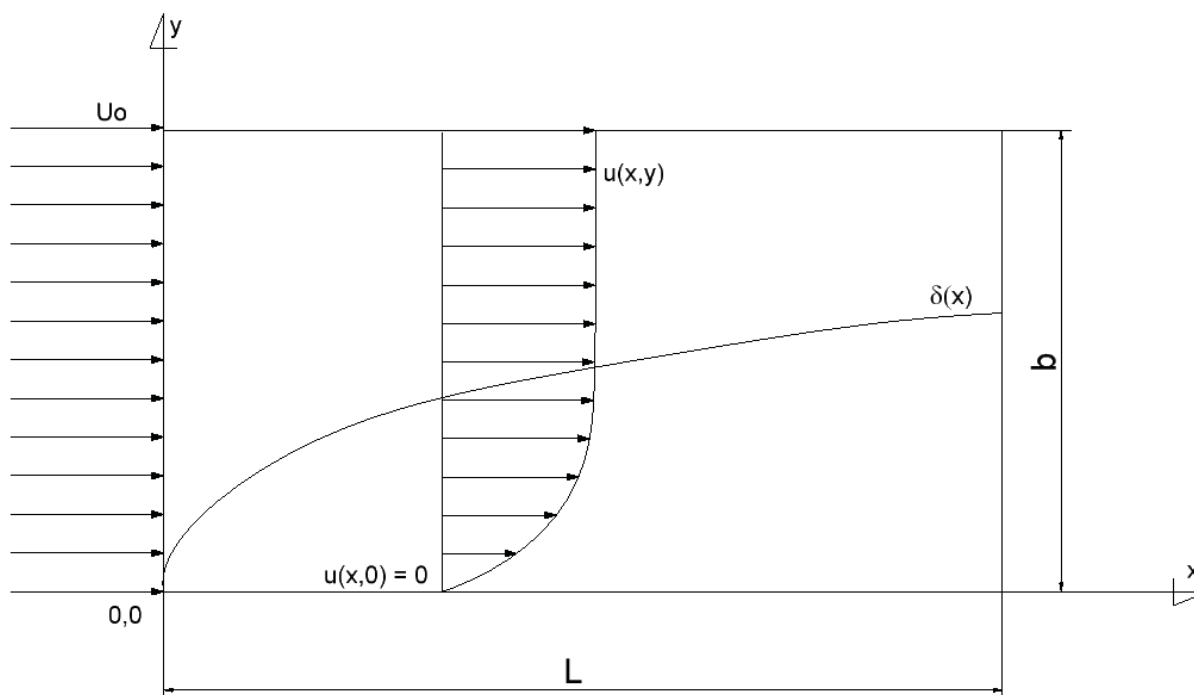


Figura 1 Domínio de cálculo para o problema do escoamento sobre uma placa plana.

Diferentemente dos problemas anteriores, foram obtidas soluções para apenas quatro malhas, muito embora tenham sido geradas cinco malhas, conforme descrito mais a frente. A obtenção dos resultados para a quinta malha não foi possível uma vez que esta simulação exigiu aproximadamente 1,5 *GBytes* de memória e os computadores a disposição para esta simulação dispunham apenas de 1,0 *Gbytes* de memória física (RAM). Com isto se tornava necessária a utilização da memória virtual do computador tornando o processamento destas informações muito lento. Estimou-se em 230 horas de processamento o tempo para a solução da simulação utilizando-se o esquema de discretização do termo advectivo *Blend Factor* = 1. Com isto temeu-se, até mesmo, pela integridade física dos discos haja vista que não se sabe o comportamento destes para uma utilização tão pesada (aproximadamente 500 *Mbytes* de dados, sendo lidos, alterados, gravados e desgravados por iteração) por um tempo tão longo.

Também não se mostram os resultados para o esquema de discretização do termo advectivo *Upwind* uma vez que em todas as simulações anteriores estas, os resultados se comportaram exatamente como o esquema *Blend Factor* = 0, conforme previsto no manual do CFX. Entretanto, foram realizados alguns testes que mostraram a repetição deste comportamento para o problema em estudo. Os resultados destes testes não serão mostrados aqui.

Salienta-se novamente aqui que o modelo utilizado para a obtenção da solução analítica do problema não é o mesmo daquele utilizado pelo CFX para a solução numérica do problema. Assim a comparação direta dos resultados e as análises da eficiência dos estimadores de erro não são possíveis, muito embora estes resultados estejam presentes nas seções que se seguem.

Os resultados assim apresentados servem como um alerta para quando se esta fazendo a análise de um estimador de erro as soluções de referência e em teste devem expressar resultado para um mesmo modelo para um determinado problema. Serve também para um futuro trabalho quando se tenha uma solução de referência melhor que a solução de Blasius para a comparação dos resultados.

Solução Analítica do Problema.

Uma solução exata para este problema foi proposta por Blasius em 1908, sendo que hoje é possível encontrar a sua descrição na maioria dos livros de Mecânica dos Fluidos, tais como Kundu (1990), Fox e McDonald (2001) e Spurk (1997), dentre outros.

Devido ao retardamento do fluido junto à parede, as linhas de corrente (*streamlines*) são defletidas à frente. Como uma aproximação, para o cálculo analítico, esta deflexão será desprezada, neste caso, o escoamento irrotacional além da camada limite deve ter velocidade $u = U_0$, como se a camada-limite não existisse. A equação de Euler nos dá então $dp/dx = 0$, o que significa que a pressão é constante ao longo do escoamento. Assim, o conjunto completo de equações para o escoamento na camada limite é, em variáveis dimensionais:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

Sujeitas às seguintes condições de contorno:

$$u(0, y) = U_0$$

$$u(x,0) = v(x,0) = 0$$

$$u(x,\infty) \rightarrow U_0$$

Blasius (1908) demonstrou que este conjunto de equações pode ser resolvido por meio de similaridade onde a solução seria da forma:

$$\frac{u}{U_0} = g(\eta) \quad (3)$$

onde,

$$\eta = \frac{y}{\delta(x)} \quad (4)$$

A solução das equações é feita, então, por meio de expansão em séries. Entretanto, técnicas numéricas como Runge-Kutta são bastante mais simples e fornecem resultados com excelente grau de precisão. Para efeito de comparação, foram resolvidas as equações no *software MathCAD*, utilizando uma técnica de Runge-Kutta de quarta ordem. Esta solução está mostrada na Figura 2.

Como variáveis de interesse, procuraram-se, novamente, variáveis integradas. Assim tomou-se a espessura de deslocamento, δ^* , e o coeficiente de arrasto, C_D ¹¹. Estes são definidos por:

$$\delta^* = \int_0^{\infty} \left(1 - \frac{u}{U_0}\right) dy \quad \text{e} \quad (5)$$

$$C_D = \frac{1}{L} \int_0^L C_f(x) dx = \bar{C}_f \quad \text{em que} \quad (6)$$

$$C_f(x) \equiv \frac{\tau_0(x)}{\frac{1}{2} \rho U_0^2} \quad (7)$$

sendo que τ_0 é a tensão de cisalhamento junto à placa e C_f é o coeficiente de fricção do escoamento. A barra sobre o símbolo (C_f) indica que está se calculando a média dos valores assumidos por este no domínio de cálculo.

A solução da Equação de Blasius fornece diretamente os valores de η e da velocidade adimensional (u/U_0) para um determinado número de pontos. O cálculo da espessura de deslocamento da camada limite foi feito, então, a partir da interpolação, por *splines*, de uma função sobre estes pontos e a integração foi realizada dentro do intervalo de zero até a altura

¹¹ Na literatura há uma certa diversificação na nomenclatura dos coeficientes para este problema. Neste trabalho adotou-se a nomenclatura proposta por Kundu (1990).

total do domínio b. Mostra-se, também na Figura 2, que o ajuste da curva sobre os pontos, dentro do intervalo de integração é bastante bom.

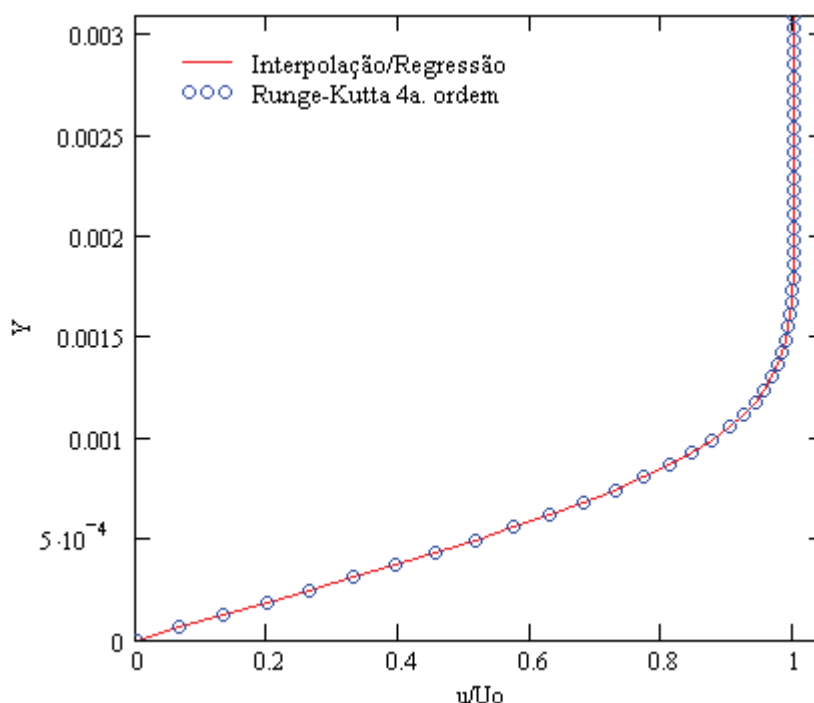


Figura 2 Solução da Equação de Blasius e interpolação de uma função sobre os pontos para o cálculo da espessura de deslocamento da camada limite.

Outra variável importante foi o tamanho da camada limite definida em $u=0,99U_0$. Neste caso a importância não é para a análise de erros, mas para a determinação das variáveis de entrada do problema. Isto porque, arbitrou-se que esta camada limite, em $x=0,64$ m, deveria alcançar $0,7b$, tentando-se minimizar a influência das condições de contorno impostas ao domínio de cálculo sobre os resultados. Este parâmetro é definido como:

$$\delta_{99\%}(x) = 4,91 \sqrt{\frac{\mu x}{\rho U_0}} \quad (8)$$

Os demais dados de entrada para este problema, assim como o valor analítico, para estes dados, das variáveis de interesse, estão mostrados na Tabela 1. Os valores das variáveis de interesse foram truncados na quinta casa decimal uma vez que os dados de entrada também estavam truncados nesta casa. Os valores de U_0 , ρ e μ foram escolhidos de forma a satisfazer as relações acima descritas.

Tabela 1 Dados de entrada e soluções analíticas para o problema.

Nome	Símbolo	Valor
Velocidade de entrada	U_0	1,563 m/s
Massa específica do fluido	ρ	1 kg/m ³
Viscosidade do fluido	μ	10 ⁻⁵ kg/(m s)
Número de Reynolds em X= 0,64m	Re_x	1,000x10 ⁵
Comprimento do domínio	L	1 m
Altura do domínio	b	0,015 m
Espessura da camada limite	$\delta_{99\%}$	0,01 m
Espessura de deslocamento (analítico)	δ^*	5.22099x10 ⁻⁴ m
Coefficiente de Arrasto (analítico)	C_D	3,33240x10 ⁻³

O Modelo Numérico

Devido à pequena altura do domínio, cuidados especiais durante a geração das malhas tiveram que ser tomados a fim de se reduzir a possibilidade de erros numéricos devido às diferenças de escalas entre o comprimento e a altura. Assim, foram geradas, como nos problemas anteriores 5 malhas com a menor diferença possível entre os tamanhos dos elementos. Na Figura 3 é mostrada uma pequena parte da malha, sendo que o comportamento desta parte se repete por todo o domínio.

Como parâmetro-chave para a geração das malhas utilizou-se o número de elementos dentro da camada limite na posição $X=0,64m$ e solicitou-se ao programa de geração de malha que estas fossem feitas com tamanho de lado constante. Assim, foram obtidas malhas com 5, 10, 15, 20 e 30 elementos dentro da camada limite, originando elementos com 2; 1; 0,667; 0,5; 0,33 mm, respectivamente. Os números de elementos e nós na face em estudo estão mostrados na Tabela 2 e, na Tabela 3, a razão de refino entre eles.

Para efeito de imposição das condições de contorno, considerou-se um perfil de velocidade constante na entrada do domínio e, na saída, pressão relativa nula. Na parte superior do domínio impôs-se a condição de contorno “aberto”, com pressão relativa nula.

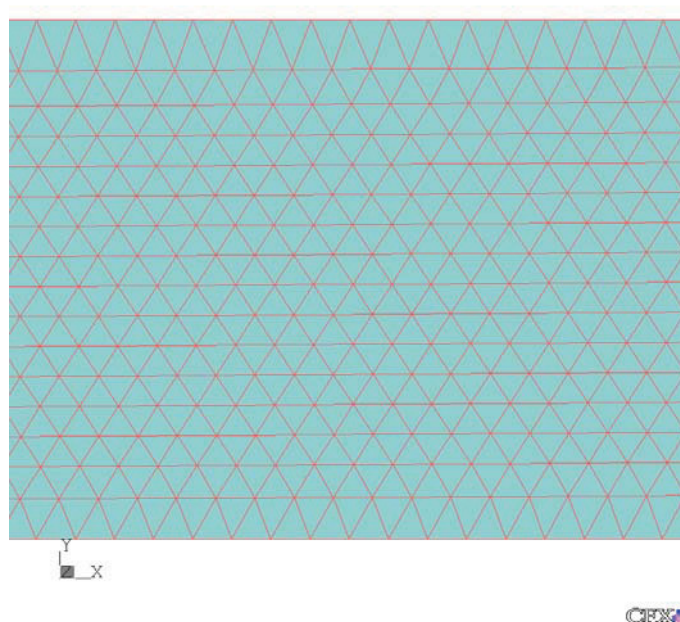


Figura 3 Parte da Malha B gerada. Dados da malha: 10 elementos na camada limite, 1mm de lado no elemento.

Tabela 2 Discretizações do domínio em estudo.

Malha	No. de divisões nas direções x e y.	No. de nós na face	No. de elementos na face
A	500 x 7	4489	7952
B	1000 x 14	17575	33114
C	1500 x 21	35625	68342
D	2000 x 28	69883	135700
E	3000 x 42	194561	382352

Tabela 3 Razão de refino baseado no número de elementos na face.

Malhas	Razão de Refino
B/A	1,97866769903923
C/B	1,42373699362875
D/C	1,40058133293838
E/D	1,66856113918635

Resultados Obtidos

Variáveis de Interesse

As duas variáveis de interesse neste problema são a espessura de deslocamento e o coeficiente de arrasto. Os valores analíticos, para referência, estão demonstrados no início deste Apêndice. Conforme já dito anteriormente, foram obtidas soluções para quatro das cinco malhas para os esquemas de discretização do termo advectivo *Blend Factor* = 0 e 1.

A obtenção dos valores para as variáveis de interesse a partir dos resultados de velocidade, pressão e coordenadas X e Y , foi feita da seguinte maneira:

- Espessura de deslocamento: primeiramente obteve-se a relação entre as velocidades de entrada e local (u/U_0) para uma linha localizada em $X=0,64\text{m}$ em 100 pontos, independente da malha utilizada. Procedeu-se então, da mesma forma que foi feita para a solução analítica, a interpolação de uma função (*spline*) através destes pontos. A integração da equação (5), dentro do domínio de cálculo, foi realizada de forma analítica sob esta função;
- Coeficiente de arrasto: primeiramente se calculou a tensão de cisalhamento junto à parede baseando-se no gradiente de velocidade, o qual foi calculado com dados tomados em uma reta distante de um elemento da parede, procedimento este idêntico ao explicado no capítulo 3. A partir daí, faz-se o cálculo do coeficiente de fricção pela equação (7) e toma-se a média dos valores deste coeficiente.

Mostra-se, para efeito de comparação os resultados de velocidade adimensional e do coeficiente de fricção para as quatro malhas e *Blend Factor* = 0 nas Figuras 4 e 5, em $X=0,64\text{m}$. Nestas figuras pode-se ver que os gradientes de velocidade são “amortecidos” com o refino de malha, aumentando, em muito o tamanho da camada limite, sendo que na maioria das malhas, esta ainda não está completa.

Nota-se também que os resultados de coeficiente de fricção, o qual foi calculado a partir do gradiente de velocidade em relação à cota X , apresenta oscilação numérica apenas para a malha A. O mesmo comportamento para o coeficiente de fricção acontece para o esquema de discretização *Blend Factor* = 1.

Nas Figuras 6 e 7 são mostrados o comportamento das variáveis de interesse com o refino de malha e os compara com a solução analítica. Nestes pode-se ver que os resultados para a variável espessura da camada de deslocamento para o esquema *Blend Factor* = 0 estão em condição de divergência, entretanto, consegue-se calcular a ordem aparente para as malhas B-C-D, conforme mostrado mais adiante.

Apesar dos resultados para as malhas A-B-C parecerem ser convergentes para a variável coeficiente de arrasto calculado com os dados obtidos como esquema *Blend Factor* = 1, estes acabam por resultar em uma ordem aparente negativa impossibilitando o cálculo das estimativas de erro para esta variável, já que as malhas B-C-D apresentam uma variação do sinal nas diferenças, assim como no esquema *Blend Factor* = 0.

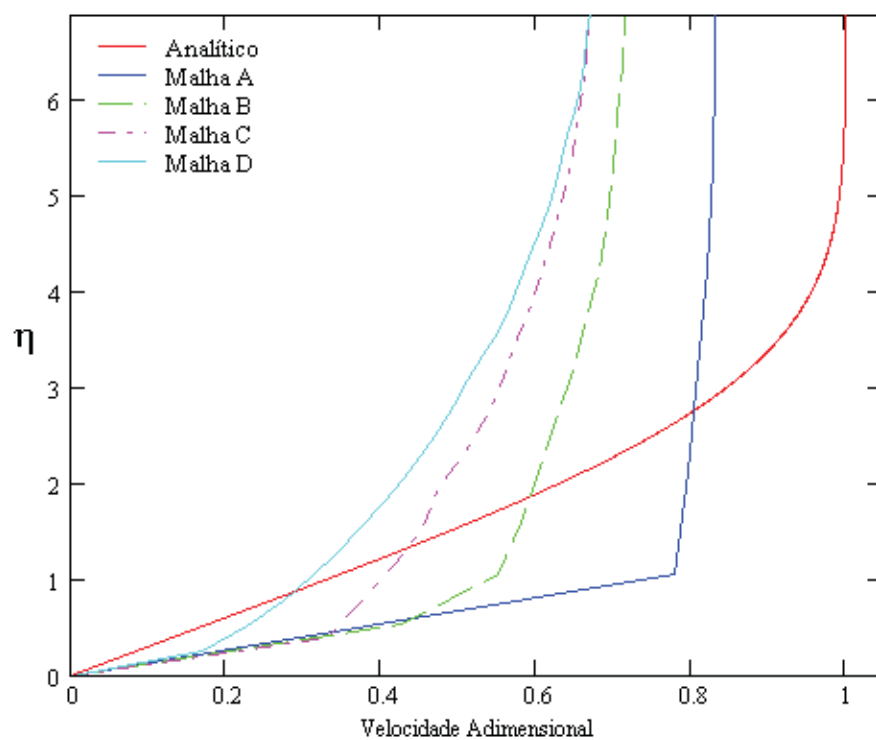


Figura 4 Comparação entre os resultados analítico e numérico para a variável velocidade adimensional em $X=0,64$ m

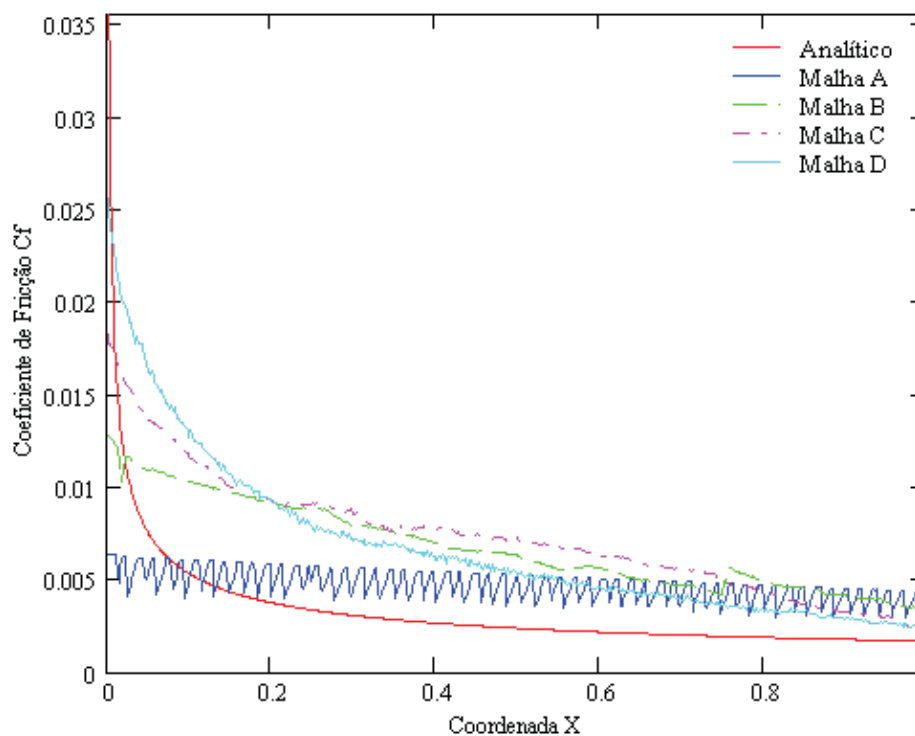


Figura 5 Comparação entre os resultados analítico e numérico para a variável coeficiente de fricção em $X=0,64$ m.

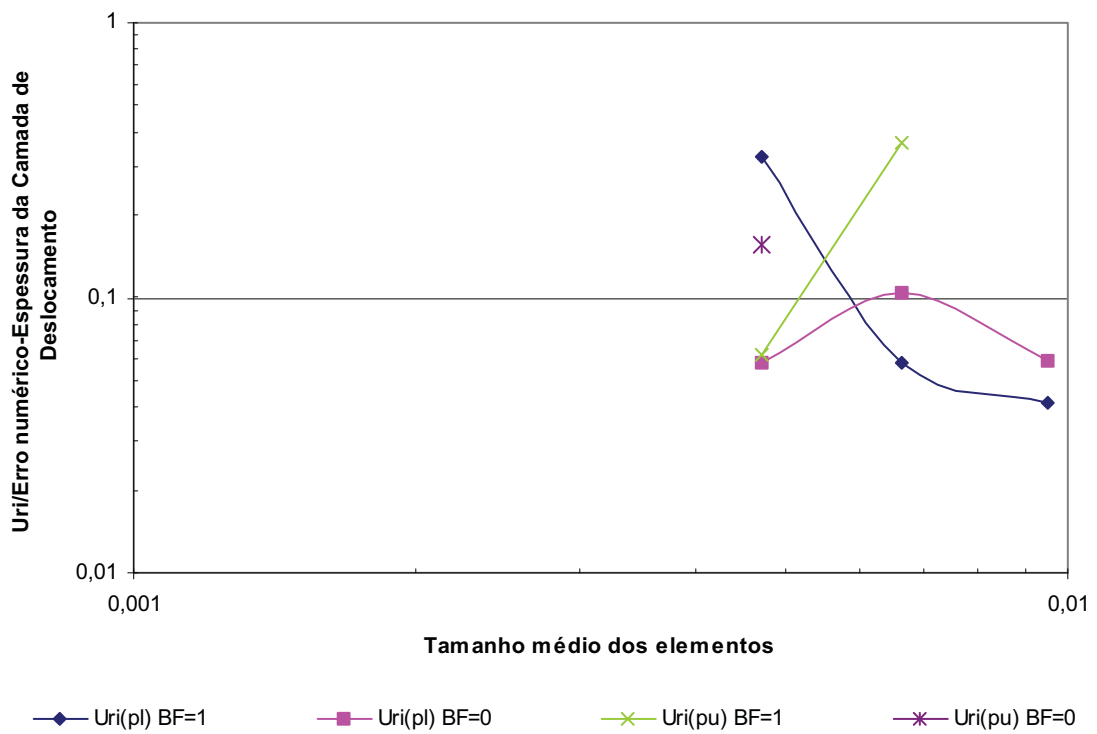


Figura 6 Variação com o refino de malha da variável espessura de deslocamento.

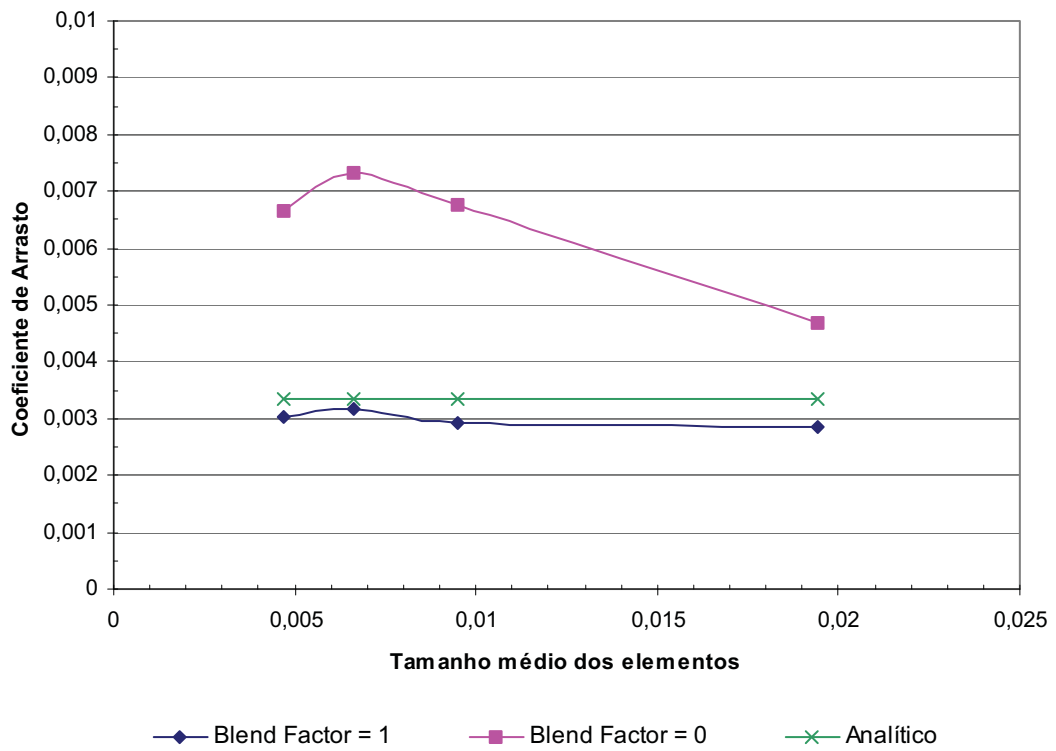


Figura 7 Variação com o refino de malha da variável coeficiente de arrasto.

Erro Numérico

Os valores do erro numérico para as variáveis em estudo estão nas Tabela 4 e Tabela 5. Eles foram expressos com 14 casas após a vírgula uma vez que os resultados numéricos foram obtidos com dupla precisão.

Tabela 4 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável espessura de deslocamento.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0
A	-3,91465336498166E-03	-2,89087849974784E-03
B	-3,06192734280830E-03	-4,82530671273075E-03
C	-2,76206501154766E-03	-6,00948599651349E-03
D	-2,61441664911813E-03	-6,68567294163052E-03

Tabela 5 Erros numéricos para as diversas malhas e esquemas de discretização da variável coeficiente de arrasto.

Malha	Numérico BF1	Numérico BF0
A	4,96493400610890E-04	-1,33520701778116E-03
B	3,97241942598290E-04	-3,43517036794350E-03
C	1,76066842142780E-04	-4,00195638768098E-03
D	2,95655132582270E-04	-3,33664652314460E-03

Para os estimadores de erro é importante a variação das soluções obtidas nas malhas em estudo. Quanto maior esta variação maior será a estimativa do erro pelos métodos em uso neste trabalho. Assim, quando se tem um grande erro numérico é desejável que se tenha grandes variações nas soluções a fim de que a previsão do erro, ou da faixa de erro, consiga ir até a solução analítica do problema.

Ordem Aparente

Assim como no capítulo 4, depara-se aqui com dificuldades no cálculo da ordem aparente, conforme mostrado pelos diversos campos onde a ordem aparente é inexistente na Tabela 6 e na Tabela 7. Todos os valores obtidos para a ordem aparente, com exceção do esquema *Blend Factor* = 1, para as malhas A-B-C, são próximos do valor da ordem assintótica, o que nos levará a resultados similares nas previsões de erros para as malhas.

Tabela 6 Ordem aparente calculada para a variável espessura de deslocamento.

Malhas	Numérico BF1	Numérico BF0
A-B-C	0,670600375021747	INEXISTENTE
B-C-D	1,848298074428950	1,430330231767870

Tabela 7 Ordem aparente calculada para a variável coeficiente de arrasto.

Malhas	Numérico BF1	Numérico BF0
A-B-C	INEXISTENTE	1,174180995252820
B-C-D	INEXISTENTE	INEXISTENTE

Ordem Efetiva

As ordens efetivas para as malhas utilizadas neste estudo estão mostradas nas Tabelas 5.8 e 5.9. Notam-se alguns valores relativamente baixos e algumas inversões de sinal. Este comportamento também foi notado nos problemas anteriores.

Tabela 8 Ordens efetivas para a variável espessura de deslocamento.

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0
A-B	0,34444667087438	-0,71826446140297
B-C	0,28448930892671	-0,60578113184400
C-D	0,16018612683529	-0,31090310895302

Tabela 9 Ordens efetivas para a variável coeficiente de arrasto.

Malhas	Blend Factor = 1	Blend Factor = 0
A-B	0,31268077032378	-1,32486298161877
B-C	2,24597667128300	-0,42153874008924
C-D	-1,51133782831680	0,53013915935902

Extrapolação de Richardson / Erro Numérico

As poucas ordens aparentes calculadas impendem o cálculo e uma análise mais apurada do comportamento do estimador extrapolção de Richardson baseada nesta ordem.

Os resultados para a variável espessura de deslocamento (Figura 8) mostram que o fato de se ter um comportamento divergente nas soluções ou mesmo de difusão numérica não é empecilho para o cálculo dos erros, haja vista que as estimativas dos erros para *Blend Factor* = 0 puderam ser calculadas.. Isto porque as estimativas do erro dependem apenas da variação das soluções obtidas e não ao erro numérico destas.

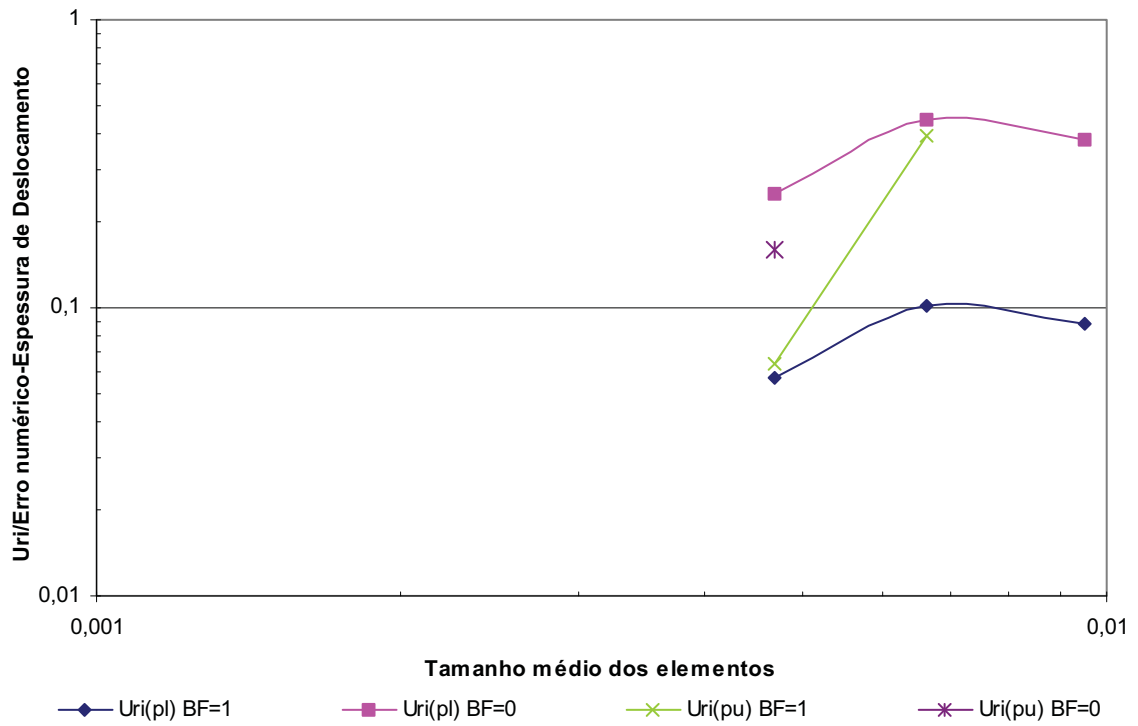


Figura 8 Comportamento do estimador extrapolação de Richardson para a variável espessura de deslocamento.

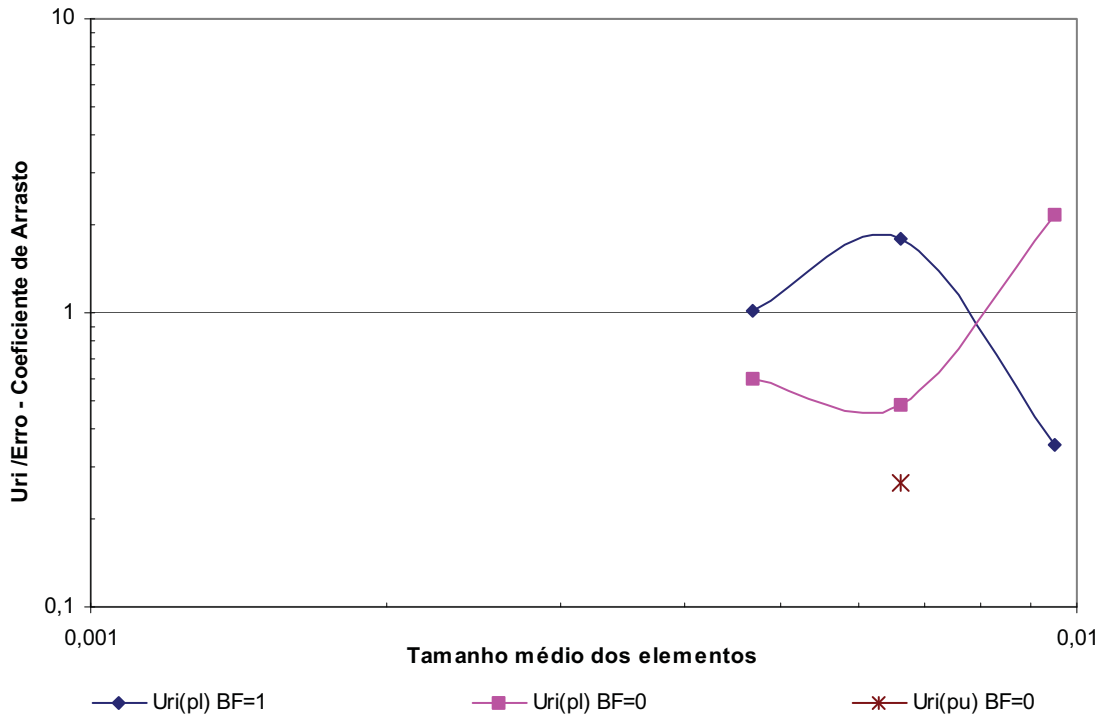


Figura 9 Comportamento do estimador extrapolação de Richardson para a variável coeficiente de arrasto.

Já para a variável coeficiente de arrasto as incertezas baseadas na ordem aparente se comportam de maneira simétrica a uma linha média bastante próxima da unidade. Não há

como analisar previsões baseadas na ordem aparente pelo fato de se ter apenas uma, ainda assim bastante baixa.

GCI / Erro Numérico

Para a variável espessura de deslocamento (Figura 10) o coeficiente aplicado ao Estimador de Richardson não foi suficiente para não se ter sub-estimativas dos erros para a maioria dos pontos obtidos. Outro ponto a se notar é o comportamento similar das curvas do erro para a ordem assintótica com *Blend Factor* = 0 e 1. Elas diferem apenas de um fator praticamente constante para as três malhas possíveis.

Já as previsões baseadas na ordem assintótica para a variável coeficiente de arrasto (Figura 11) são bastante boas, para ambos os esquemas de discretização estando acima, porém não muito distantes da unidade.

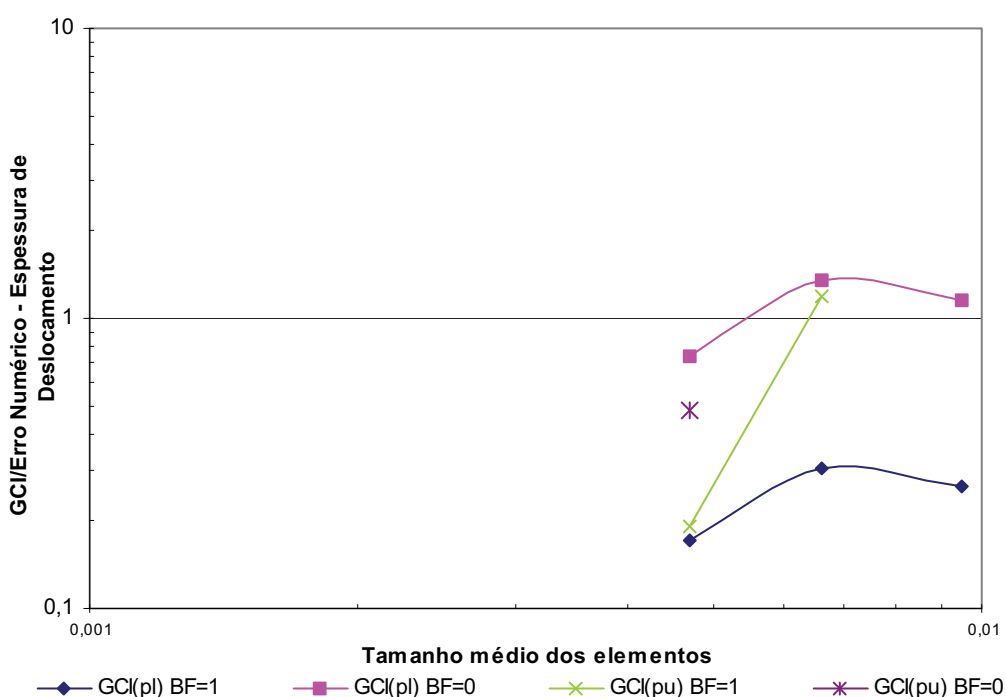


Figura 10 Comportamento do estimador GCI para a variável espessura de deslocamento.

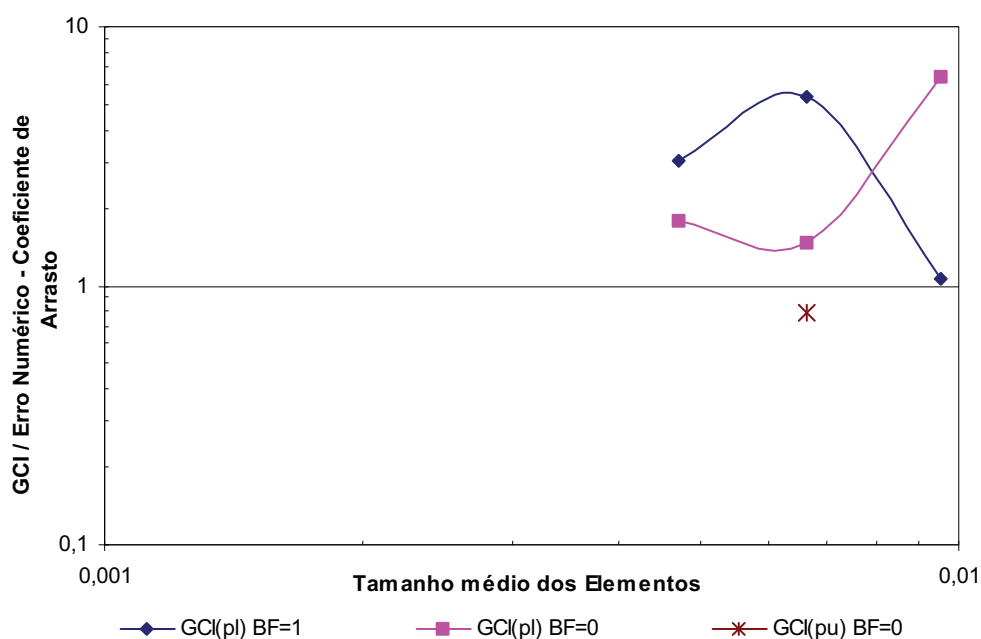


Figura 11 Comportamento do estimador GCI para a variável coeficiente de arrasto.

Conclusão

Apresentou-se um estudo do comportamento dos estimadores GCI e Extrapolação de Richardson para o problema do escoamento sobre uma placa plana, paralela à direção do fluxo, em regime laminar, comparando-se os resultados numéricos obtidos com a solução de Blasius. Os coeficientes da solução de Blasius foram obtidos com o procedimento de Runge-Kutta de quarta ordem.

Inicialmente, se mostraram as soluções analíticas para as variáveis de interesse escolhidas, as quais foram a espessura de deslocamento e o coeficiente de arrasto. Mostraram-se também um comparativo entre as soluções analítica e numérica para duas variáveis locais (velocidade adimensional e coeficiente de arrasto) para uma seção, apenas para fins de comparação. Notou-se também o comportamento divergente da variável espessura de deslocamento com o refino de malha.

Os erros numéricos das soluções obtidas foram bastante grandes com variações relativamente pequenas entre as malhas para o esquema *Blend Factor* = 1, indicando que subestimativas de erros ocorreriam.

Assim como no Capítulo 4 não foi possível obter a ordem aparente para muitas das malhas em estudo, prejudicando uma melhor análise dos estimadores de erro baseados nesta ordem. Das ordens calculadas apenas uma se apresentou distante da ordem assintótica.

A análise da eficiência dos estimadores de erro GCI e Extrapolção de Richardson não foi possível devido ao fato de a solução de referência e as soluções numérica serem referentes a diferentes modelos matemáticos. Os gráficos apresentados nas seções anteriores tiveram um caráter ilustrativo apenas.

Morais, Emerson Luiz de

Verificação de soluções numéricas de escoamentos laminares obtidas com o método dos volumes finitos e malhas não-estruturadas / Emerson Luiz de Moraes. - Curitiba, 2004.

127 f. : il.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi

Co-orientador: Prof. Fábio Alencar Schneider

Dissertação (Mestrado) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Inclui Bibliografia.

1. Análise de incerteza numérica. 2. Mecânica dos fluídos computacional. 3. Métodos dos volumes finitos. 4. Cálculos numéricos.
I. Título. II. Marchi, Carlos Henrique. III. Schneider, Fábio Alencar.
IV. Universidade Federal do Paraná.

CDD 532.05