4
Formulação Numérica

As simulações numéricas foram realizadas no *software* FLUENT, versão 6.3.26, a partir de geometria/ malha criadas no *software* GAMBIT, versão 2.2.30.

O FLUENT é um *software* comercial capaz de simular escoamentos de fluidos e transferência de calor em geometrias bi/ tridimensionais, utilizando o método dos volumes finitos para discretizar as equações de conservação.

O GAMBIT é um *software* comercial utilizado para pré-processamento, onde é modelada a geometria do problema. A partir desta geometria é gerada a malha (discretizando os volumes) e são definidas as superfícies onde serão impostas as condições de contorno.

A partir da importação da malha gerada no GAMBIT, utiliza-se o FLUENT para definir os modelos físicos, as condições de contorno, as propriedades dos materiais, o método de solução do sistema de equações e, consecutivamente, o pós-processamento das informações.

Neste capítulo serão descritos os parâmetros utilizados no FLUENT, para solução das equações, que consiste em:

- Divisão do domínio computacional em volumes de controle discretos;
- Integração das equações de governo em cada volume de controle, gerando equações algébricas que tem como incógnitas os componentes da velocidade, pressão e outras grandezas escalares;
- Linearização das equações discretizadas e solução do sistema de equações lineares.
- Método numérico para solução das equações linearizadas.

4.1.
Modelo Multifásico

Foi utilizado o modelo VOF, para a simulação do escoamento multifásico. A descrição deste modelo encontra-se no Capítulo 3.2 - Abordagem Multifásica.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

4.1.1.
Interpolação na Interface

O FLUENT possui quatro esquemas de interpolação disponíveis para determinação da interface dentro do volume de controle. Nesse trabalho foi utilizado o esquema *Geo-Reconstruction* para determinação da interface.

Geo-Reconstruction Scheme – neste esquema, considera-se que a interface entre dois fluidos tem uma inclinação linear na célula, gerada a partir de uma interpolação linear (*piecewise-linear*). Essa inclinação é usada para o cálculo do fluxo convectivo de fluido através das faces das células.

A primeira etapa é o cálculo da posição da interface linear relativa ao centro de cada célula parcialmente preenchida, baseada na informação sobre a fração volumétrica e suas derivadas.

A segunda etapa é o cálculo da quantidade de fluido proveniente de cada face, usando informações sobre a distribuição normal e tangencial da velocidade na face.

A terceira etapa é o cálculo da fração de volume em cada célula usando o balanço dos fluxos calculados durante a etapa precedente. Este esquema é o mais exato e é aplicável para malhas não estruturadas, conforme observado na Figura 4.1.

Figura 4.1 – Interface real *versus* interface *Geometric Reconstruction*

4.2.
Discretização

O FLUENT usa uma técnica baseada no volume de controle para converter as equações de governo às equações algébricas que podem ser resolvidas numericamente. Esta técnica consiste em integrar as equações de governo sobre cada volume de controle, resultando em equações discretas.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

4.2.1.
Discretização da Equação da Quantidade de Movimento Linear

Para as equações de conservação de quantidade de movimento linear, não é permitido escolher o esquema de discretização dos termos viscosos. O FLUENT utiliza um esquema de segunda ordem. Entretanto, para os termos convectivos, é possível escolher entre os seguintes esquemas de discretização: *First-Order Upwind, Power-Law, Second-Order Upwind, Second-Order QUICK, Modified HRIC.*

Como padrão do algoritmo segregado, todas as equações são resolvidas usando o esquema de primeira ordem para a convecção. Neste trabalho foi utilizado o esquema *First-Order Upwind* para discretização dos termos viscosos da equação de conservação da quantidade de movimento.

First-Order Upwind Scheme – o valor nominal do termo convectivo da face é igual ao valor do termo convectivo do centro da célula à montante (relativo ao sentido da velocidade normal).

Se o campo de pressão e os fluxos mássicos da face forem conhecidos, a discretização da equação da quantidade de movimento fornece a eq. 4-1:

$$\oint \rho \vec{u}\vec{u} \cdot d\vec{A} = -\oint pI \cdot d\vec{A} + \oint \bar{\bar{\tau}} \cdot d\vec{A} + \int_V \vec{F} dV \qquad (4\text{-}1)$$

Esta equação pode ser integrada, sobre o volume de controle, para fornecer uma equação discreta, onde $\phi = u$, conforme eq. 4-2:

$$a_p u = \sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + \sum p_f A \cdot \hat{i} + S \qquad (4\text{-}2)$$

onde a_p é o coeficiente linearizado de ϕ, a_{nb} é o coeficiente linearizado de ϕ_{nb}, p_f é a pressão na face e u_{nb} é a velocidade na célula vizinha.

Entretanto, o campo da pressão e os fluxos mássicos da face não são conhecidos *à priori* e devem ser obtidos como parte da solução. O FLUENT utiliza um esquema em que os valores de pressão e velocidade são armazenados nos centros das células. A eq. 4-2 exige o valor da pressão na face entre as células adjacentes. Logo, é necessário um esquema de interpolação para computar os valores nominais da pressão dos valores da célula.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

4.2.2.
Interpolação da Pressão

O esquema padrão do FLUENT interpola os valores da pressão nas faces usando coeficientes da equação da quantidade de movimento. Quando há grandes gradientes nos termos fonte entre os volumes de controle, o perfil da pressão tem um gradiente elevado na face da célula, e não pode ser interpolado usando este esquema.

Neste trabalho foi utilizado o esquema PRESTO! para interpolação da pressão.

***PRESTO! Scheme* (*PREssure STaggering Option*)** – utiliza o balanço discreto da continuidade para um volume de controle inercial sobre a face para computar a pressão da face.

4.2.3.
Discretização da Equação da Continuidade

A equação da continuidade em regime permanente (eq. 4-3),

$$\oint \rho \vec{u} \cdot d\vec{A} = 0 \tag{4-3}$$

Pode ser integrada, sobre o volume de controle, para fornecer a equação discreta:

$$\sum_{f}^{N_{faces}} J_f A_f = 0 \tag{4-4}$$

onde J_f é o escoamento mássico através da face f.

Como descrito na seção 4.4, as equações da quantidade de movimento e da continuidade são resolvidas sequencialmente, onde a equação da continuidade é usada como uma equação para a pressão. Entretanto, para escoamentos incompressíveis, a pressão não aparece explicitamente na eq. 4-4, desde que a densidade não esteja diretamente relacionada à pressão. Logo, é necessário um método para acoplamento entre pressão e velocidade.

4.2.4.
Acoplamento Pressão-Velocidade

Para escoamentos incompressíveis é necessário utilizar um método para acoplamento entre pressão e velocidade. O FLUENT utiliza os métodos SIMPLE, SIMPLEC ou PISO para introduzir a pressão na equação da continuidade. Neste trabalho foi utilizado o método SIMPLE para acoplamento entre pressão e velocidade.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) – Este algoritmo utiliza uma relação entre a velocidade e correções da pressão para reforçar a conservação de massa e obter o campo da pressão.

4.3. Discretização Temporal

Para simulações transientes, as equações de governo devem ser discretizadas no espaço e no tempo. A discretização espacial para equações transientes é idêntica ao caso estacionário. Todavia, a discretização temporal envolve a integração de cada termo das equações diferenciais sobre uma etapa de tempo Δt. Neste trabalho foi utilizado o esquema *first-order implicit* para discretização dos termos transientes.

Discretização *first-order*

A discretização dos termos transientes é executada através do método das diferenças finitas, para termos de primeira ordem, conforme eq. 4-5.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^{n}}{\Delta t} \tag{4-5}$$

onde ϕ é uma quantidade escalar, ϕ^{n+1} é o valor de ϕ no nível de tempo seguinte ($t + \Delta t$) e ϕ^{n} é o valor de ϕ no nível de tempo atual (t).

Integração implícita do tempo

Há dois métodos para avaliar $\partial\phi/\partial t$ em um passo de tempo futuro: implícito e explícito. A integração implícita considera que ϕ^{n+1} (em uma dada célula) relaciona-se com ϕ^{n+1} (nas células vizinhas), através de uma função. Todavia, a integração explícita considera que ϕ^{n+1} (em uma dada célula) relaciona-se com o valor existente de ϕ^{n} (nas células vizinhas), através de outra função.

A vantagem do esquema inteiramente implícito (espaço/ tempo) está na estabilidade da convergência, que é independente do tamanho do passo de tempo.

A discretização da equação de transporte segue a formulação conforme eq. 4-6.

$$\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \oint \rho\phi\vec{u} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \tag{4-6}$$

onde $\partial(\rho\phi)/\partial t$ é a derivada transiente da variável transportada ϕ, ρ é a densidade, $\vec{u}$ é o vetor velocidade, $\vec{A}$ é o vetor área da superfície, Γ_ϕ é o coeficiente de difusão para ϕ, $\nabla\phi$ é o gradiente de ϕ e S_ϕ é o termo fonte de ϕ por unidade de volume.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

O algoritmo segregado utiliza uma discretização implícita da equação de transporte. Como padrão, todos os termos convectivos, difusivos e fonte são avaliados no nível de tempo n+1 (eq. 4-7).

$$\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \oint \rho^{n+1}\phi^{n+1}\vec{u}^{n+1} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi^{\ n+1} \nabla \phi^{n+1} \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi^{\ n+1} dV \qquad (4\text{-}7)$$

4.3.1. Esquemas de Avanço de Tempo

No algoritmo segregado, o erro total de discretização do tempo é determinado pela escolha da discretização temporal (*first-order* ou *second-order*) e pela maneira em que as soluções são avançadas à próxima etapa (esquemas de avanço do tempo). Há duas aproximações para o esquema de avanço do tempo: iterativo e não iterativo.

Esquema iterativo de avanço de tempo

No esquema iterativo, todas as equações estão resolvidas iterativamente, para um dado passo de tempo, até que os critérios de convergência sejam atingidos. Desta forma, o avanço da solução em um passo de tempo exige iterações externas (Figura 4.2).

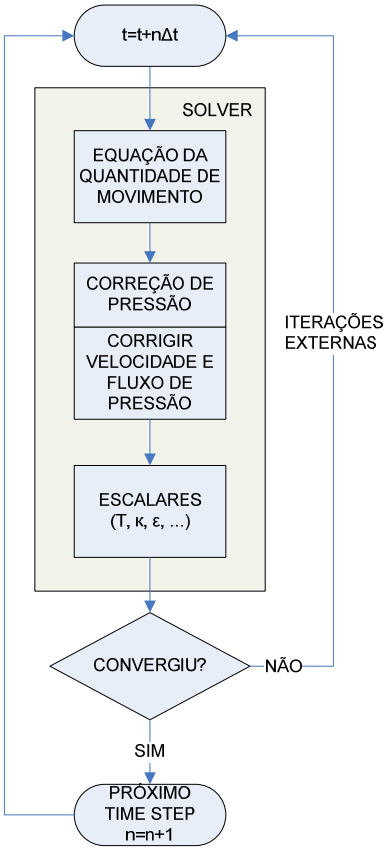

Figura 4.2 – Esquema iterativo de avanço do tempo

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

4.4. Método Numérico

O FLUENT permite ao usuário a escolha entre dois algoritmos numéricos para solução do sistema algébrico (segregado ou acoplado). As abordagens segregada e acoplada diferem na maneira que as equações de continuidade e quantidade de movimento são resolvidas: o algoritmo segregado resolve estas equações sequencialmente, enquanto o algoritmo acoplado as resolve simultaneamente.

Neste trabalho foi escolhido o algoritmo segregado para resolução das equações.

Algoritmo segregado – as equações de governo são resolvidas sequencialmente (isto é, uma segregada da outra). Diversos ciclos de iterações da solução devem ser executados até que seja obtida uma solução convergida, porque as equações de governo são não lineares (e acopladas). Cada ciclo de iterações consiste nas etapas ilustradas na Figura 4.3:

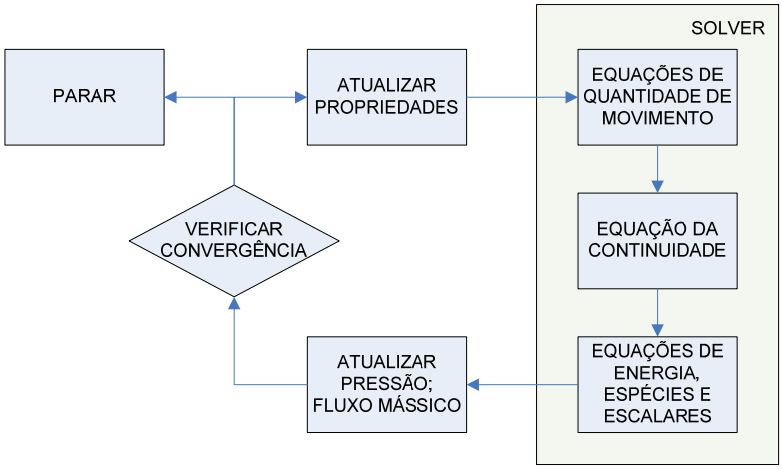

Figura 4.3 – Algoritmo segregado

4.5. Linearização

Em ambos os métodos numéricos, segregado e acoplado, a solução das equações de governo discretas (não lineares) são transformadas em lineares para produzir um sistema de equações com variáveis dependentes em cada célula computacional. O sistema linear resultante é resolvido então para obter uma solução atualizada do campo de escoamento do fluido.

Os métodos de linearização, implícito e explícito, diferem na sequencia de determinação das variáveis no domínio computacional. O método implícito resolve as

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA

variáveis em todas as células ao mesmo tempo, enquanto o método explícito resolve uma célula de cada vez.

Neste trabalho foi utilizada a formulação implícita para linearização das equações.

Método implícito - Para uma determinada variável, a solução é computada usando uma relação que inclua os valores conhecidos e desconhecidos das células vizinhas. Consequentemente, cada valor desconhecido aparecerá em mais de uma equação do sistema. Estas equações devem ser resolvidas simultaneamente.

4.6. Sub-relaxação

Por causa da não linearidade das equações é necessário controlar a mudança de ϕ. Isto é obtido através da sub-relaxação, de forma a reduzir a mudança de ϕ produzida durante cada iteração, conforme eq. 4-8.

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta \phi \tag{4-8}$$

onde ϕ é o novo valor da variável dentro de uma célula, ϕ_{old} é o valor anterior de ϕ, $\Delta\phi$ é a mudança computada em ϕ e α é o fator de sub-relaxação.

4.7. Resumo dos Parâmetros Numéricos

Modelo multifásico	Volume of Fluid (VOF)
Algoritmo	Segregado, implícito
Modelo de viscosidade	Laminar
Acoplamento Pressão-Velocidade	SIMPLE
Esquema de Discretização/ Linearização	
▪ Pressão	PRESTO!
▪ Quantidade de movimento	First Order Upwind
▪ Fração de Volume	Geo-Reconstruct
▪ Tempo	First Order Implicit
Método de avanço do tempo	Método iterativo

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0621123/CA