

**MINISTÉRIO DA DEFESA  
EXÉRCITO BRASILEIRO  
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA  
PROGRAMA DE MESTRADO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**RENAN DE SOUZA TEIXEIRA**

**ANÁLISES DE CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO NA  
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE CAMADAS DE MISTURA  
PLANAS**

**Rio de Janeiro  
2010**

**INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA**

**RENAN DE SOUZA TEIXEIRA**

**ANÁLISE DE CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO NA SIMULAÇÃO  
COMPUTACIONAL DE CAMADAS DE MISTURA PLANAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Leonardo S. de B. Alves, Ph.D

Rio de Janeiro  
2010

c2010

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA  
Praça General Tibúrcio, 80-Praia Vermelha  
Rio de Janeiro-RJ CEP 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmar ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do(s) autor(es) e do(s) orientador(es).

T266 Teixeira, Renan de Souza

Análise de Condições Iniciais e de Contorno na Simulação Computacional de Camadas de Mistura Planas/ Renan de Souza Teixeira. - Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2010.

67p.: il, graf., tab.

Dissertação: (mestrado) - Instituto Militar de Engenharia-  
Rio de Janeiro, 2010.

1. Mecânica dos Fluidos. 2. Métodos Numéricos. 3.  
Estabilidade Hidrodinâmica  
I. Análise de Condições Iniciais e de Contorno na Simulação Computacional  
de Camadas de Mistura Planas. II. Instituto Militar de Engenharia

CDD 532

**INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA**

**RENAN DE SOUZA TEIXEIRA**

**ANÁLISE DE CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO NA SIMULAÇÃO  
COMPUTACIONAL DE CAMADAS DE MISTURA PLANAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Leonardo S. de B. Alves, Ph.D

Aprovada em 01 de fevereiro de 2010 pela seguinte Banca Examinadora:

---

Prof. Leonardo S. de B. Alves, Ph.D do IME - Presidente

---

Prof. Francesco Scofano Neto, D.C. do IME

---

Prof. Gustavo Cesar Rachid Bodstein, Ph.D da UFRJ

---

Prof. Márcio Teixeira de Mendonça, Ph.D do ITA

Rio de Janeiro  
2010

A minha família que tanto se sacrificou para que eu estivesse concluindo este mestrado e em particular a minha companheira.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a todas as pessoas que me incentivaram, apoiaram e possibilitaram esta oportunidade de ampliar meus horizontes. Meus familiares, que acreditaram sempre no meu potencial de lutar pelos meus sonhos. A minha namorada que sempre esteve ao meu lado neste tempo difícil. Aos meus amigos que confiam e depositam suas alegrias no meu sucesso. Ao meu orientador pela atenção e disponibilidade.

"Sempre me pareceu estranho que todos aqueles que estudam seriamente esta ciência acabam tomados de uma espécie de paixão pela mesma. Na verdade o que proporciona o máximo de prazer não é o conhecimento e sim a aprendizagem, não é a posse, mas a aquisição, não é a presença mas o ato de atingir a meta. "

CARL FRIEDRICH GAUSS

## SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES .....	8
LISTA DE TABELAS .....	10
LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS .....	11
<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>15</b>
1.1 Camada de Mistura Plana .....	15
1.2 Análise de Estabilidade .....	16
1.3 Condições Iniciais e de Contorno .....	19
1.4 Simulação Numérica com Baixo Mach .....	21
<b>2 SIMULAÇÃO NUMÉRICA .....</b>	<b>23</b>
2.1 Equações de Governo Compressíveis .....	23
2.2 Método Précondicionador para Baixo Mach .....	26
2.3 Discretização das Equações de Governo .....	28
2.3.1 Discretização Temporal .....	29
2.3.2 Discretização Espacial .....	32
<b>3 CONDIÇÕES DE CONTORNO .....</b>	<b>33</b>
3.1 Condição de Contorno Local .....	34
3.2 Condição de Contorno Global .....	36
<b>4 RESULTADOS .....</b>	<b>37</b>
4.1 Avanços e Validação .....	37
4.2 Condições de Contorno nas Paredes Transversais .....	43
4.3 Condições de Contorno de Entrada e Saída Locais .....	46
4.4 Condições de Contorno de Entrada e Saída Globais .....	53
<b>5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES .....</b>	<b>61</b>
<b>6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>64</b>



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIG.1.1	Configuração espacial da camada de mistura com espessura de quantidade de movimento $\theta$ .....	16
FIG.1.2	Instabilidade local <i>a)</i> convectiva e <i>b)</i> absoluta .....	18
FIG.4.1	Refinamento da malha na direção transversal .....	38
FIG.4.2	Refinamento da malha na direção transversal e longitudinal .....	39
FIG.4.3	Taxa de crescimento de perturbações lineares pela frequência .....	39
FIG.4.4	Camada de mistura adimensionalizada com $AD_e$ distintos para discretização espacial de 2º ordem .....	40
FIG.4.5	Camada de mistura para a malha não-uniforme e com discretização espacial centrada de 2º ordem .....	41
FIG.4.6	Camada de mistura para a malha uniforme em ambas direções e com discretização espacial centrada de 4º ordem .....	42
FIG.4.7	Camada de mistura para a malha não-uniforme apenas na direção transversal e com discretização espacial centrada de 4º ordem .....	42
FIG.4.8	Isolinhas de velocidade constante da componente transversal da velocidade em regime permanente . Condições de Contorno da equação (4.2) .....	44
FIG.4.9	Isolinhas de velocidade constante da componente transversal da velocidade em regime permanente . Condições de Contorno da equação (4.3) .....	45
FIG.4.10	Velocidade Transversal em diferentes distâncias da entrada. Contorno 4.2 .....	45
FIG.4.11	Velocidade Transversal em diferentes distâncias da entrada. Contorno 4.3 .....	45
FIG.4.12	Amplificação temporal para LODI padrão com condição inicial tangente hiperbólica .....	46
FIG.4.13	Isolinhas da Perturbação na Velocidade Transversal da Figura 4.12 em diferentes tempos $t = 1.74s, 2.17s, 2.61s$ e $3.04s$ . .....	47
FIG.4.14	Amplificação temporal para LODI modificado invíscido e condição inicial tangente hiperbólica .....	48
FIG.4.15	Amplificação temporal para LODI modificado invíscido/viscoso e condição inicial tangente hiperbólica .....	49

FIG.4.16	Amplificação temporal para LODI padrão com condição inicial de regime permanente .....	51
FIG.4.17	Amplificação temporal para LODI modificado invíscido e condição inicial de regime permanente .....	51
FIG.4.18	Amplificação temporal para LODI modificado invíscido/viscoso e condição inicial de regime permanente .....	52
FIG.4.19	Amplificação temporal para LODI modificado invíscido, malha não uniforme em ambas as direções e condição inicial em regime permanente .....	54
FIG.4.20	Amplificação temporal para LODI modificado invíscida/viscoso, malha não uniforme em ambas as direções e condição inicial em regime permanente .....	54
FIG.4.21	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial tangente hiperbólica com constante $\sigma = 0.1$ .....	55
FIG.4.22	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial tangente hiperbólica com constante $\sigma = 1.0$ .....	56
FIG.4.23	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial de regime permanente com constante $\sigma = 0.1$ .....	57
FIG.4.24	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial de regime permanente com constante $\sigma = 1.0$ .....	57
FIG.4.25	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de tangente hiperbólico com constante $\sigma = 0.1$ .....	58
FIG.4.26	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de tangente hiperbólico com constante $\sigma = 1.0$ .....	58
FIG.4.27	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de regime permanente com constante $\sigma = 0.1$ .....	59
FIG.4.28	Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de regime permanente com constante $\sigma = 1.0$ .....	59

## LISTA DE TABELAS

TAB.2.1	Coeficientes das derivadas no tempo físico .....	30
TAB.3.1	Número de condições de implementação do <i>LODI</i> .....	36

## LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS

### ABREVIATURAS

$AD_e$	-	Dissipação numérica explícita
$AD_i$	-	Dissipação numérica implícita
$ADI$	-	Método implícito da direção alternada
$AEL$	-	Análise de Estabilidade Linear
$\mathbf{A}, \hat{\mathbf{A}}$	-	Jacobiano do fluxos invscidos na direção do escoamento
$\mathbf{B}, \hat{\mathbf{B}}$	-	Jacobiano do fluxos invscidos transversal escoamento
$C_p$	-	Pseudo velocidade do som
$c$	-	Velocidade do som
$CFL$	-	Número de Courant
$d$	-	Altura do domínio truncado
$\mathbf{D}$	-	Jacobiano do termo fonte
$\mathbf{E}$	-	Vetor dos fluxos invcidos na direção do escoamento
$\mathbf{E}_v$	-	Vetor dos fluxos viscosos na direção do escoamento
$\mathbf{F}$	-	Vetor dos fluxos invcidos transversal ao escoamento
$\mathbf{F}_v$	-	Vetor dos fluxos viscosos transversal ao escoamento
$L$	-	Comprimento longitudinal do domínio
$LODI$	-	Local one-dimensional inviscid equations
$M_1$	-	Número de Mach do fluido na camada superior ( $= U_1/c$ )
$M_2$	-	Número de Mach do fluido na camada inferior ( $= U_2/c$ )
$N_X$	-	Número de pontos na malha na direção longitudinal
$N_Y$	-	Número de pontos na malha na direção transversal
$P_0$	-	Pressão hidrostática
$P_g$	-	Pressão hidrodinâmica
$Re_\delta$	-	Número de Reynolds ( $= \rho U_1 \delta / \mu$ )
$R_U$	-	Razão de velocidades ( $= U_1 - U_2 / U_1 + U_2$ )
$t$	-	Tempo físico
$T$	-	Período da perturbação
$\mathbf{T}$	-	Jacobiano entre as variáveis primitivas e conservativas
$u$	-	Velocidade longitudinal do fluido
$U_1$	-	Velocidade longitudinal uniforme do fluido na camada superior
$U_2$	-	Velocidade longitudinal uniforme do fluido na camada inferior

- $v$  - Velocidade transversal do fluido  
 $VNN$  - Número de von Neumann  
 $x$  - Coordenada longitudinal  
 $y$  - Coordenada transversal

## SÍMBOLOS

- $\alpha_1$  - Taxa de crescimento espacial  
 $\delta$  - Espessura de vorticidade da camada limite  
 $\Lambda$  - Comprimento de onda da perturbação  
 $\mu$  - Viscosidade cinemática  
 $\tau$  - Pseudo-tempo  
 $\lambda$  - Autovalores  
 $\Gamma$  - Matriz Précondicionadora  
 $\omega$  - Frequência adimensional da perturbação  
 $\theta$  - Espessura da quantidade de movimento  
 $\rho$  - Densidade do fluido

## RESUMO

Simulações numéricas de escoamentos externos tem sido um dos maiores desafios para mecânica dos fluidos computacionais devido ao domínio infinito ou semi-infinito que precisa ser truncado. Então, ao invés de implementar condições de contorno simples, equações de governo são implementadas em um contorno artificial. Como o escoamento passa através do contorno, reflexões numéricas indesejadas são refletidas de volta para o domínio e comprometem o resultado da simulação. Isto pode criar fenômenos não-físicos e também instabilidade numérica. Dois tipos de condições de contorno artificiais de alta precisão são encontrados na literatura. O primeiro é conhecido como condição de contorno global, por exigir uma região finita do domínio para minimizar erros gerados no contorno. O segundo tipo é conhecido como condição de contorno local pois atua no controle das ondas que atravessam o contorno. Nosso objetivo é estudar os impacto que a precisão de soluções de referência tem na simulação numérica de camadas de mistura planas quando usadas como condições inicial e/ou de contorno.

## **ABSTRACT**

Numerical simulations of external flow problems pose one of the most difficult challenges in computational fluid mechanics because the original unbounded domain must be limited to a bounded one. Hence, simplified boundary conditions have to be implemented instead of the governing equations themselves at the artificial boundaries created. As the flow exits through the boundaries, undesirable numerical waves are reflected back into the bounded domain and corrupt the solution. This may create non-physical phenomena and also numerical instabilities. Two types of high accuracy artificial boundary conditions can be found in the literature. The first type is known as global boundary conditions because they require a finite region that extends away from the boundary to be effective. The second type is known as local boundary conditions because they only act on the artificial boundary controlling the inflow and outflow of waves crossing it. Our objective is to test the relative impact of these different boundary and initial conditions on the simulation of spatially developing planar mixing layers.

# 1 INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é fazer um estudo numérico sobre a estabilidade hidrodinâmica da camada de mistura plana em regime incompressível. Este escoamento representa uma camada cisalhante livre, ou seja longe de paredes sólidas, que se desenvolve no espaço. O caso clássico com propriedades constantes é convectivamente instável. Contudo a transição para um escoamento globalmente instável pode ocorrer devido a variações de temperatura ou quando as camadas se movem em direções opostas. O maior desafio encontrado ao simular numericamente este problema é a especificação de condições iniciais e de contorno. Caso isto não seja feito de maneira adequada, a transição de estabilidade pode ocorrer devido a reflexão de erros numéricos nos contornos. O foco principal deste trabalho é controlar este problema numérico.

No presente capítulo, após uma breve descrição da relevância do problema, serão apresentadas as principais características de uma camada de mistura e de sua estabilidade. Em seguida será apresentada uma revisão bibliográfica dos trabalhos mais relevantes existentes na literatura. Finalmente, serão apresentados em maiores detalhes os objetivos e escopo do trabalho.

## 1.1 CAMADA DE MISTURA PLANA

A camada de mistura é gerada por uma placa que divide um escoamento em duas extremidade com velocidades distintas, como mostra a Figura 1.1. A jusante da placa, o fluido se mistura ao longo de sua interface, criando a região de camada cisalhante livre ou região de mistura, onde a vorticidade está concentrada. Em nosso contexto, a velocidade do fluido acima da placa é dado por  $U_1$ , ao passo que a velocidade do fluido abaixo da placa é dado por  $U_2$ , que é menor do que  $U_1$ .

Esta simples configuração de escoamento é um modelo genérico de numerosos fenômenos naturais e dispositivos artificiais, estando presentes nos mais diversos tipos de escoamento com relevância científica e tecnológica para problemas de engenharia em mecânica dos fluidos e transferência de calor. De um ponto de vista prático esta configuração de escoamento busca frequentemente controlar a evolução da mistura à jusante do escoamento na camada cisalhante para melhorar a eficiência de certos processos industriais. A camada de mistura plana, o jato livre e o jato transversal representam escoamentos onde camadas de mistura são mais comumente encontradas. Alguns exemplos importantes ocorrem nos motores de propulsão aspiradas, como turbinas a gás, onde camadas de mistura são utilizadas para i) o controle da mistura



ar/combustível na zona primária dos combustores, ii) a redução da temperatura média do ar aspirado visando melhorar o desempenho do motor e iii) o resfriamento das palhetas da turbina a gás para aumentar a vida útil desta. Camadas de mistura também são encontradas na dispersão de poluentes tanto na atmosfera quanto em rios e mares, onde são responsáveis pela mistura do poluente com o fluido ambiente.

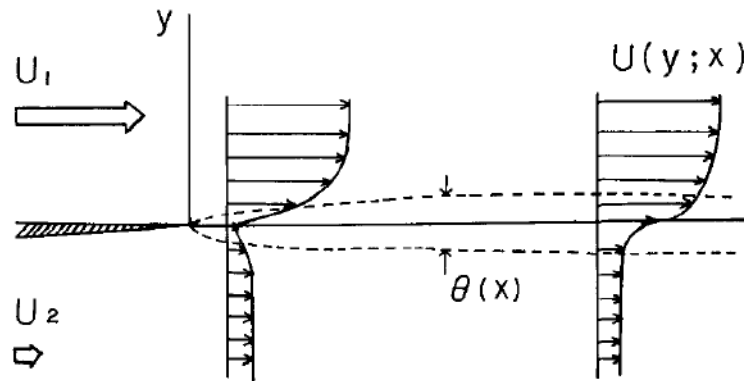


FIG. 1.1: Configuração espacial da camada de mistura com espessura de quantidade de movimento  $\theta$

## 1.2 ANÁLISE DE ESTABILIDADE

Escoamentos externos, como a camada de mistura plana, possuem uma transição para turbulência bastante característica, uma vez que eles são fortemente instáveis e se desenvolvem no espaço na direção do escoamento. Escoamentos laminares são sensíveis a pequenas perturbações que são derivadas de vários fatores, assim como, rugosidade, turbulência externa, ruído, etc. Caso essas perturbações não sejam dissipadas, escoamento pode transitar para um estado mais complexo, mas não necessariamente o estado de escoamento turbulento. Ho e Huerre HO (1984) apresentam um estudo de investigações experimentais e numéricas para escoamentos incompressíveis e moderadamente compressíveis, tal que uma única estrutura se forma centrada com a camada cisalhante. A dinâmica deste escoamento pode ser descrita a partir de observações experimentais. Estas estruturas seguem um mecanismo de evolução espacial onde uma sequência de bifurcações ocorrem sucessivamente no espaço em um processo predominantemente bidimensional. A evolução inicial começa com um mecanismo de instabilidade linear. A distribuição de pequenas perturbações ocorre via um mecanismo de instabilidade bidimensional de Kelvin-Helmholtz, governada pela equação de Rayleigh para escoamento não viscoso. Daí, as ondas bidimensionais crescem exponencialmente à jusante do escoamento conduzindo

a um processo não-linear que causa sua eventual saturação, associada à formação das primeiras linhas de vorticidade BROWN (1974). Estes vórtices iniciais crescem na camada cisalhante e são propagados na direção jusante em um processo de emparelhamento associado ao crescimento espacial do primeiro sub-harmônico WINANT (1974). A partir de então estes modos secundários crescem chegando a saturação, tal que geram novas linhas de vorticidade com o dobro do espaçamento inicial entre vórtices consecutivos. Não obstante, o aumento da mistura ocorre durante o emparelhamento e outros processos de fusão. Esta seqüência de desestabilização e saturação se repete até o aparecimento de instabilidades secundárias e tridimensionais, que induzem a transição à turbulência BRANCHER (1997).

Camadas de mistura que se desenvolvem no tempo atravessam uma seqüência bastante similar. Nas últimas décadas, este escoamento tem sido significativamente mais estudado que sua versão discutida acima devido à periodicidade espacial que possui. Diversas simulações computacionais PATNAIK (1976); CORCOS (1984); MOSER (1993); SCHOPPA (1995) e análises teóricas KELLY (1967); PIERREHUMBERT (1982) da camada de mistura temporal contribuíram para uma maior compreensão do mecanismo responsável pelo desenvolvimento de instabilidades bi e tridimensionais. Contudo, os resultados obtidos para a camada de mistura temporal são transportáveis para a simulação espacial da camada de mistura apenas para escoamentos convectivamente instáveis, ou seja, camadas de mistura que se desenvolvem no espaço. Isto significa que a dinâmica de um escoamento se desenvolvendo no tempo, onde o futuro não afeta o passado, será equivalente à dinâmica de um escoamento se desenvolvendo no espaço apenas quando o escoamento a jusante não influenciar a instabilidade a montante. Do contrário, a simulação espacial da camada de mistura estará sujeita a instabilidades globais, resultantes da interação do escoamento com si próprio HUERRE (1990).

A teoria de estabilidade linear define o desenvolvimento dos processos de instabilidade iniciais de uma variedade de escoamentos instáveis caracterizando-os através da teoria temporal ou da teoria espacial. Se o escoamento base  $U(y)$  é gerado para ser rigorosamente paralelo e as perturbações são extremamente pequenas, a função de fluxo da perturbação pode ser descrito da forma

$$\psi(x, y, t) = \phi(y) \exp^{i(\alpha x - \omega t)} + cc. \quad (1.1)$$

onde  $\omega = 2\pi f$  é a frequência angular,  $\alpha$  é o número de onda, e  $cc.$  denota o conjugado complexo. No limite da não viscosidade  $Re \equiv \infty$ , a autofunção  $\phi(y)$  é obtida através da equação linear de Rayleigh.

Os estudos de Michalke MICHALKE (1964, 1965) descrevem numericamente a característica da estabilidade de ondas temporais, onde o número de onda  $\alpha$  é real e a frequência  $\omega$

complexa, e ondas espaciais cujo o número de onda  $\alpha$  é complexo e a frequência  $\omega$  é real no limite de  $R = 1$ , onde  $R = \Delta U / (2\bar{U})$  é a razão de velocidade entre a magnitude relativa do total de cisalhamento  $\Delta U = U_2 - U_1$  e a velocidade média  $\bar{U} = (U_1 + U_2)/2$ . O uso da análise de estabilidade desenvolvido pelo Michalke contribui para elucidar o desenvolvimento espacial e temporal de perturbações em torno de um escoamento base paralelo determinando a natureza da instabilidade. As ondas temporais estão associadas a uma instabilidade absoluta e as ondas espaciais associadas a uma instabilidade convectiva. Daí um escoamento é dito absolutamente instável se a perturbação (Figura 1.2 b) evolui com o tempo em todos os pontos do domínio e desenvolve periodicidade espacial e um escoamento é definido como convectivamente instável se a perturbação (Figura 1.2 a) evolui no espaço e em todos os pontos do domínio após um longo período de tempo e possuem periodicidade temporal. Em outras palavras, num escoamento absolutamente instável a presença de uma perturbação transiente em um determinado local do escoamento cresce exponencialmente em todas as direções, inclusive contra a corrente. Em contra partida, no escoamento convectivamente instável a perturbação é produzida numa determinada região e é amplificada ou reduzida sendo levada pelo escoamento a medida que se propaga na direção do escoamento fazendo com que, eventualmente, o escoamento retorne ao seu regime inicial caso a fonte de perturbações desapareça.

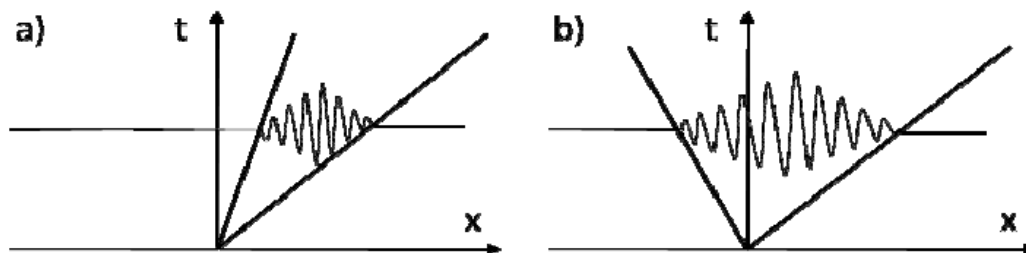


FIG. 1.2: Instabilidade local a) convectiva e b) absoluta

Esta divisão entre instabilidade absoluta e convectiva permite um melhor entendimento do comportamento dinâmico de diversos escoamentos. Por exemplo, escoamentos convectivamente instáveis apresentam uma dinâmica extrínseca. A evolução espacial destes escoamentos transientes é determinada pela natureza das perturbações presentes à montante. Eles são conhecidos como amplificadores de ruído. Por outro lado, escoamentos absolutamente instáveis possuem uma dinâmica intrínseca. A evolução temporal destes escoamentos é determinada por perturbações presentes nos instante iniciais. Eles são conhecidos como osciladores HUERRE (1990).

Todavia, ambos os escoamentos podem sofrer uma transição de instabilidades. Escoamentos convectivamente instáveis podem desenvolver regiões de instabilidade absoluta GASTER

(1968). O crescimento destas regiões faz com que o escoamento se torne globalmente instável. Escoamentos globalmente instáveis são descritos por Huerre *et al* HUERRE (1990), tal que o número de onda  $\alpha$  e frequência  $\omega$  são complexos. Então a dinâmica do escoamento convectivamente instável é alterada devido ao comportamento elíptico da pressão, onde as perturbações amplificadas e levadas para jusante do escoamento afetam a montante, gerando um efeito de auto-excitação ou retro-alimentação, conhecido, em inglês, como efeito feedback. No caso específico das simulações espaciais das camadas de mistura, a transição de instabilidades pode ocorrer devido ao escoamento reverso e ao aquecimento do fluido, como já foi demonstrada através de análises lineares HUERRE (1985); MONKEWITZ (1988) e não-lineares CHOMAZ (2005); LESSHAFFT (2006), além de estudos experimentais STRYKOWSKI (1991); MONKEWITZ (1990).

Contudo, poucas simulações computacionais para camadas de mistura globalmente instáveis podem ser encontradas na literatura. Isto ocorre devido à necessidade de capturar o efeito de auto-excitação proveniente da transição de instabilidade como discutido anteriormente. Ou seja, a instabilidade convectiva pode se tornar auto-sustentável devido à influência de perturbações provenientes de camadas-limite, esteiras e regiões de recirculação ocorrendo à montante do escoamento. Porém, a transição para a instabilidade global em simulações espaciais das camadas de mistura requer que flutuações na pressão à jusante do escoamento afetem a formação da instabilidade à montante deste. Assim sendo, simulações computacionais destas instabilidades globais ficam restritas a escoamentos compressíveis subsônicos GRINSTEIN (1991) ou supersônicos com regiões subsônicas GRINSTEIN (2002). Pelo mesmo motivo, simulações computacionais de escoamentos incompressíveis ficam restritas a camadas de mistura convectivamente instáveis MCMULLAN (2007). Isto ocorre devido ao modelo incompressível para a pressão ser representado por uma equação elíptica, que impõe uma velocidade infinita para a propagação das ondas de pressão de jusante para montante no escoamento. GRINSTEIN (1990).

### 1.3 CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

Provavelmente o maior desafio para simulação computacional de camadas de mistura que se desenvolvem no espaço é a especificação de condições iniciais e de contorno adequadas. O primeiro estudo a chamar atenção para este problema foi feito por Buell e Huerre BUELL, que simularam as equações de conservação incompressíveis para a camada de mistura. Detalhes sobre as condições inicial e de contorno na entrada e saída não foram fornecidos. Sabe-se apenas que a condição inicial é uma aproximação da solução de regime permanente. Estes autores

afirmam que uma descontinuidade na primeira derivada entre as condições inicial e de contorno na entrada é responsável pela formação do vórtice inicial. Eles mostram que este vórtice aumenta de amplitude ao se propagar à jusante, como esperado de um escoamento convectivamente instável. Contudo, um novo vórtice é formado próximo ao contorno de entrada assim que o vórtice inicial atinge o contorno de saída. Desta forma, fica evidente que reflexões numéricas entre os contornos de entrada e saída geram um efeito de auto-excitação responsável por uma instabilidade global artificial.

A pouca quantidade de simulações computacionais deste problema encontradas na literatura pode ser observada no artigo de McMullan *et al* MCMULLAN (2007), que simula camadas de mistura incompressíveis se desenvolvendo no espaço em duas e três dimensões. Eles usam um perfil do tipo tangente hiperbólica e uma solução de camada limite na condição de entrada, mostrando que existem diferenças importantes entre cada um destes casos. As condições iniciais são as condições de entrada estendidas para o resto do domínio. Os autores não mencionam quaisquer problemas com reflexões numéricas nos contornos. Contudo, as significativas diferenças entre os resultados mostrados nos levam a crer que as condições iniciais devem ser o mais próximas possíveis das condições experimentais que desejam simular para boas comparações.

Para estudar o efeito da pressão à jusante na formação da instabilidade à montante, Grinstein *et al* GRINSTEIN (1991) utilizaram as equações de conservação compressíveis para simular a camada de mistura plana se desenvolvendo espacialmente. Na entrada, todas as variáveis foram prescritas exceto a pressão, obtida a partir de uma condição de gradiente nulo. Na saída, as equações invíscidas linearizadas foram reduzidas a equações advectivas para todas as variáveis. A velocidade prescrita na entrada e como condição inicial para todo o domínio em todas as simulações foi uma função tangente hiperbólica clássica. Para evitar problemas numéricos nos contornos, um domínio longo foi usado e as simulações foram restritas a tempos suficientemente pequenos para que os vórtices formados não atingissem esses contornos. Os autores concluíram que gradientes de pressão a jusante afetam a formação de vórtices a montante. Eles ainda mostraram que este efeito é reduzido quando: 1) as velocidades de propagação das ondas de pressão em cada camada tendem a ser iguais, ou seja, no limite incompressível, ou 2) as velocidades convectivas (longe da região de mistura) em cada camada tendem a ser iguais.

Este estudo foi repetido por Grinstein e DeVore GRINSTEIN (2002) para jatos livres coaxiais onde o jato interno é supersônico e o externo é subsônico e se move na direção oposta. A autoexcitação ocorre neste caso devido ao jato anular externo ser subsônico, apesar do jato interno escoar num regime supersônico. Uma revisão destes resultados pode ser encontrada no artigo de Drikakis *et al* DRIKAKIS.

Um problema das abordagens anteriores está na qualidade das condições de contorno uti-

lizadas, tanto nos casos incompressíveis quanto nos compressíveis. Contudo, as melhores condições de contorno para fronteiras artificiais encontradas na literatura hoje são para escoamentos compressíveis COLONIUS (2004), pois o modelo incompressível não permite o estudo das características de propagação das informações no sistema. Elas já foram inclusive utilizadas na simulação computacional de camadas de mistura compressível POINSOT (1992). O desafio então, é estender o uso destas condições de contorno para camadas de mistura incompressíveis.

#### 1.4 SIMULAÇÃO NUMÉRICA COM BAIXO MACH

A simulação computacional das equações de conservação compressíveis no limite incompressível não é possível devido à amplificação de erros no cálculo dos gradientes de pressão SESTERHENN (1999b) e a rigidez das equações de conservação compressíveis discretas TURKEL (1999) para pequenos números de Mach.

As equações incompressíveis aproximam as equações compressíveis quando o número de Mach tende para zero, i. e.,  $M \rightarrow 0$  KLAINERMAN (1982). Entretanto, ao resolver o conjunto de equações compressíveis na sua forma discreta para  $M < 0.3$ , temos um problema significativo: A massa específica se torna independente da pressão SESTERHENN (1999a). Isto não afeta somente a convergência mas também diminui a acurácia, e conduz a diferenças significativas na flutuação de pressão obtida entre a solução numérica e a solução analítica do conjunto de equações.

É possível estender códigos computacionais que foram desenvolvidos para simular escoamentos compressíveis para que possam simular escoamentos incompressíveis. Para tal, é preciso transformar o termo transiente das equações para simular a pressão ao invés da densidade, o que é feito com uma simples regra da cadeia. Contudo, é preciso modificar a matriz Jacobiana associada para que os autovalores convectivos e acústicos sejam da mesma ordem de grandeza. Este procedimento altera a evolução transiente natural do problema, criando um pseudo tempo, porém elimina sua rigidez. De qualquer forma, as equações originais são recuperadas quando o regime permanente é atingido TURKEL (1987).

Simulações transientes acuradas de escoamentos compressíveis de baixa velocidade ainda podem ser feitas utilizando esta técnica. Para isto, basta reintroduzir o termo transiente original nas equações preconditionadas. Precisão temporal é obtida com a convergência para regime permanente no pseudo tempo em cada passo no tempo físico. Este procedimento é conhecido como passo no tempo duplo ou DTS (Dual Time Stepping) MERKLE (1988).

O código desenvolvido pelo professor Leonardo Alves ALVES (2006), com discretização espacial pelo método de diferenças finitas tanto de segunda e quarta ordem com respectiva

dissipação artificial e BDF de primeira e segunda ordem para termo transiente, será utilizado neste trabalho. Ele já foi devidamente validado no início deste trabalho TEIXEIRA (2008). Este código foi melhorado, e validado novamente para o trabalho que será apresentado nesta dissertação, o que possibilitou a simulação de camadas limites planas e incompressíveis com a precisão necessária. Sua descrição detalhada e melhorias introduzidas são apresentadas, no próximo capítulo, e será seguida dos resultados de validação e da análise de estabilidade do problema por simulação computacional no capítulo seguinte.

## 2 SIMULAÇÃO NUMÉRICA

### 2.1 EQUAÇÕES DE GOVERNO COMPRESSÍVEIS

A forma conservativa bidimensional das equações de governo é dada por

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = \mathbf{H} \quad (2.1)$$

onde os vetores  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{E}_i$ ,  $\mathbf{E}_v$ ,  $\mathbf{F}_i$ ,  $\mathbf{F}_v$  e  $\mathbf{H}$  são definidos como:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho Y_1)^T, \\ \mathbf{E}_i &= (\rho, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u, \rho u Y_1)^T, \\ \mathbf{F}_i &= (\rho, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v, \rho v Y_1)^T, \\ \mathbf{E}_v &= (0, \tau_{x,x}, \tau_{x,y}, u\tau_{x,x} + v\tau_{x,y} + \dot{q}_{x,e}, \dot{m}_{x,1})^T, \\ \mathbf{F}_v &= (0, \tau_{x,y}, \tau_{y,y}, u\tau_{x,y} + v\tau_{y,y} + \dot{q}_{y,e}, \dot{m}_{y,1})^T, \\ \mathbf{H} &= (0, -\rho g, 0, 0, S_1)^T, \end{aligned} \quad (2.2)$$

com  $\rho$  para densidade,  $p$  para pressão,  $u$  e  $v$  para os componentes cartesianos da velocidade,  $e$  para energia interna térmica,  $E = e + (u^2 + v^2)/2$  para energia interna total,  $Y_1$  para fração de massa de espécies 1 e  $N$  para o número total de espécies na mistura, que neste caso temos  $N = 2$  onde posteriormente continuaremos as pesquisas para simular duas espécies. O termo de reação química  $S_1$  representa a taxa de consumo ou produção de espécies 1 e é representada na forma de Arrhenius,

$$S_1 = \varsigma e^{E_A/\bar{R}T} \quad (2.3)$$

que para o caso de duas espécies na mistura  $S_1 = 0$ , com  $\varsigma$  uma constante para o fator pré-exponencial,  $E_A$  para a energia de ativação,  $\bar{R}$  para a constante universal dos gases e  $T$  para temperatura. Os tensores normais ( $\tau_{x,x}$  e  $\tau_{y,y}$ ) e o tensor cisalhante ( $\tau_{x,y}$ ), assim como os fluxos difusivos de energia ( $\dot{q}_{x,e}$  e  $\dot{q}_{y,e}$ ) e de espécies ( $\dot{m}_{x,i}$  e  $\dot{m}_{y,i}$ ) são dados por:

$$\begin{aligned} \tau_{x,x} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \\ \tau_{y,y} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \\ \tau_{x,y} = \tau_{y,x} &= \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
\dot{q}_{x,e} &= k \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{i=1}^2 h_i D_{e,i} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, \\
\dot{q}_{y,e} &= k \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{i=1}^2 h_i D_{e,i} \frac{\partial Y_i}{\partial y}, \\
\dot{m}_{x,i} &= \rho D_{e,i} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, \\
\dot{m}_{y,i} &= \rho D_{e,i} \frac{\partial Y_i}{\partial y},
\end{aligned} \tag{2.4}$$

com  $\mu$  constante para viscosidade dinâmica,  $k$  para condutividade térmica,  $D_{i,j}$  para a difusividade binária de massa entre as espécies  $i$  e  $j$  e  $D_{e,i} = (1 - X_i) / \sum_{j \neq i}^N X_j / D_{i,j}$  para difusividade binária das espécies resultante da mistura do gás. A fração dos mols da espécie  $i$  é definido como  $X_i = n_i/n$ , onde  $n_i$  é o número de mols da espécie  $i$  e  $n$  é o número total de mols na mistura. A fração de massa da espécie  $i$  é definida como  $Y_i = \rho_i/\rho$ , onde  $\rho_i$  é a densidade da espécie  $i$ . Já que estaremos usando a equação de continuidade para densidade e uma equação de fração de massa para  $Y_1$ , e a segunda espécie da fração de massa é obtida da seguinte forma:

$$Y_2 = 1 - Y_1. \tag{2.5}$$

De modo convencional em algoritmos numéricos para escoamentos compressíveis, temperatura e pressão são calculados iterativamente das equações SHUEN (b,a),

$$\begin{aligned}
e &= h - \frac{p}{\rho}, \\
h &= Y_1 h_1, \\
h_i &= h_{f,i}^o + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i} dT, \\
p &= \rho \bar{R} T \frac{Y_1}{W_1},
\end{aligned} \tag{2.6}$$

com  $h$  representando a entalpia por unidade de massa e  $T_{ref}$  a temperatura de referência das propriedades termodinâmicas. As propriedades das espécies  $i$  são os pesos moleculares  $W_i$ , o calor específico de pressão constante  $c_{p,i}$ , a entalpia termodinâmica por unidade de massa  $h_i$  e o calor de formação por unidade de massa  $h_{f,i}^o$ . O código foi escrito de maneira a permitir equações de estado arbitrária, mas consideramos apenas gases termicamente perfeitos nas simulações apresentadas neste trabalho MERKLE (1998). Logo,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial P} &= \frac{1}{RT} \quad , \quad \frac{\partial \rho}{\partial T} = -\frac{\rho}{T} \quad , \quad \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} = -\rho \frac{(R_1 - R_2)}{R} \\
\frac{\partial h}{\partial P} &= 0 \quad , \quad \frac{\partial h}{\partial T} = c_p \quad e \quad \frac{\partial h}{\partial Y_1} = h_1 - h_2.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Nas equações de conservação (2.1) à (2.4), os fluxos não-viscosos  $\mathbf{E}_i$  e  $\mathbf{F}_i$  contem os termos convectivos ao passo que os fluxos difusivos  $\mathbf{E}_v$  e  $\mathbf{F}_v$  fornecem os modos de propagação difusiva. Particularmente, os modos não-viscosos são obtidos a partir dos autovalores do Jacobiano dos fluxos não-viscosos  $\mathbf{A} = \partial\mathbf{E}/\partial\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{B} = \partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{Q}$ . Para o nosso caso, onde temos uma única espécie, estes Jacobianos são dados por:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\partial p}{\partial \rho} - u^2 & 2u + \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} & \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial p}{\partial(\rho E)} \\ -uv & v & u & 0 \\ u \frac{\partial p}{\partial \rho} - (\rho E + p) \frac{u}{\rho} & u \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} + \frac{\rho E + p}{\rho} & u \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} & u \left(1 + \frac{\partial p}{\partial(\rho E)}\right) \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ -uv & v & u & 0 \\ \frac{\partial p}{\partial \rho} - v^2 & \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} & 2v + \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial p}{\partial(\rho E)} \\ v \frac{\partial p}{\partial \rho} - (\rho E + p) \frac{v}{\rho} & v \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} & v \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} + \frac{\rho E + p}{\rho} & v \left(1 + \frac{\partial p}{\partial(\rho E)}\right) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

onde as derivadas da pressão em relação as variáveis dependentes conservativas são dadas por FEDKIW:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial \rho} &= (\gamma - 1) \left( \frac{u^2 + v^2}{2} - h + \frac{R_2}{R} c_p T \right), \\ \frac{\partial p}{\partial(\rho u)} &= -(\gamma - 1)u, \\ \frac{\partial p}{\partial(\rho v)} &= -(\gamma - 1)v, \\ \frac{\partial p}{\partial(\rho E)} &= (\gamma - 1), \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde a constante de gás específico de espécies  $i$  é  $R_i$  e para a mistura é  $R = \sum_{i=1}^2 Y_i R_i$  e  $\gamma$  é a razão de calor específico. Além disso,  $c_p = \sum_{i=1}^2 Y_i c_{p,i}$  é o total de calor específico a pressão constante da mistura. Consequentemente, os autovalores de  $\mathbf{A}$  são dados pela velocidade convectiva  $u$ , com dois componentes repetidos, e pelas velocidades acústicas  $u \pm c$ . Similarmente, os autovalores de  $\mathbf{B}$  são dados pela velocidade convectiva  $v$ , também com dois componentes repetidos, e pelas velocidades acústicas  $v \pm c$

## 2.2 MÉTODO PRÉCONDICIONADOR PARA BAIXO MACH

Com base nos autovalores associados às matrizes  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$ , fica evidente o primeiro problema relatado sobre o uso das equações de escoamento compressível para baixas velocidades. No limite do número de Mach tendendo a zero, os valores das velocidades das ondas convectivas e acústicas diferem ordens de magnitude, criando uma fonte de rigidez que impede a simulação numérica das equações (2.1) à (2.4). Análises numéricas posteriores revelaram um segundo problema. Como o gradiente de pressão é inversamente proporcional ao número de Mach ao quadrado, erros de arredondamento da pressão são amplificados durante o processo iterativo comprometendo a convergência e acurácia da solução.

O primeiro problema é resolvido através da inclusão do précondicionador na derivada temporal a equação (2.1). Uma matriz précondicionadora  $\Gamma$  é selecionada de tal forma a re-escalonar os autovalores dos Jacobianos dos (2.8) e (2.9), fazendo com que eles sejam de mesma ordem de grandeza. Contudo, o précondicionador altera a evolução transiente do escoamento, e a solução é obtida em um pseudo-tempo, que apresenta um tempo físico modificado. Entretanto, esta simulação produz um resultado acurado quando o regime permanente no pseudo-tempo é atingido, ou seja, quando a derivada no pseudo-tempo é zero.

O segundo problema é solucionado em duas etapas. Primeiro, a matriz précondicionadora pode ser selecionada tal que o método numérico empregado marche no pseudo-tempo em termos de um novo conjunto de variáveis  $\hat{\mathbf{Q}}$ . Podemos tirar proveito dessa mudança, resolvendo diretamente para a pressão ao invés da densidade. Podemos ainda resolver para a temperatura ao invés da energia, evitando assim ter que calculá-los em um processo iterativo envolvendo as equações (2.6). A segunda etapa para redução da propagação de erros de arredondamento é realizada aproveitando o fato de que é o gradiente de pressão e não a própria pressão que está envolvido no balanço de momento. Assim, pode-se decompor a pressão em uma pressão de referência constante no espaço e uma pressão variável no espaço, ou seja,  $p(x, t) = p_0(t) + p_g(x, t)$ . Em escoamentos abertos, por exemplo,  $p_0$  pode ser escolhida para ser a pressão atmosférica. A pressão variável  $p_g$  equivale à componente de pressão responsável pelo acoplamento pressão-velocidade nas equações de momento. Substituindo  $\nabla p$  por  $\nabla p_g$  nestas equações torna este termo de ordem um quando o número Mach tende à zero, reduzindo ainda mais a propagação de erros de arredondamento.

Modificando as equações de governo (2.1) para incluir a matrix précondicionadora  $\Gamma$  e a variável do pseudo-tempo  $\tau$  como foi descrito nos parágrafos anteriores, obtemos a equação précondicionada

$$\Gamma \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = \mathbf{H} \quad (2.11)$$

onde o novo conjunto de variáveis  $\hat{\mathbf{Q}}$  é dado pelo vetor transposto abaixo

$$\hat{\mathbf{Q}} = (p_g, u, v, T, Y_1)^T. \quad (2.12)$$

A matriz précondicionadora  $\Gamma$  é dada por:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \rho_P & 0 & 0 & \rho_T & \rho_{Y_1} \\ u\rho_P & \rho & 0 & u\rho_T & u\rho_{Y_1} \\ v\rho_P & 0 & \rho & v\rho_T & v\rho_{Y_1} \\ H\rho_P - (1 - \rho \frac{\partial h}{\partial P}) & \rho u & \rho v & H\rho_T + \rho \frac{\partial h}{\partial T} & H\rho_{Y_1} + \rho \frac{\partial h}{\partial Y_1} \\ Y_1\rho_P & 0 & 0 & Y_1\rho_T & \rho + Y_1\rho_{Y_1} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

onde  $H = h + (u^2 + v^2)/2$  é a entalpia total da mistura. Na matriz preconditionadora definimos:

$$\rho_P = \frac{1}{C_p^2} - \rho_T \left(1 - \rho \frac{\partial h}{\partial P}\right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T}\right), \quad \rho_T = \delta \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad e \quad \rho_{Y_i} = \delta \frac{\partial \rho}{\partial Y_i} \quad (2.14)$$

onde  $C_p$  a pseudo velocidade do som. Tomando  $\delta = 0$  temos o précondicionamento de Chen SHUEN (a), desenvolvido para escoamentos com reação química, e tomando  $\delta = 1$  temos o précondicionamento de Merkle CHOI, calculado para escoamento viscosos.

A velocidade do som  $c$  é definida como

$$\frac{\partial \rho}{\partial P} = \frac{1}{c^2} - \frac{\partial \rho}{\partial T} \left(1 - \rho \frac{\partial h}{\partial P}\right) / \left(\rho \frac{\partial h}{\partial T}\right), \quad (2.15)$$

pois escrever a equação (2.15) desta forma permite uma melhor comparação com as equações (2.14).

Os modos não-viscosos do sistema de equações précondicionado (2.11) são obtidos dos autovalores de  $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{A}}$  e  $\Gamma^{-1}\hat{\mathbf{B}}$ , onde  $\hat{\mathbf{A}} = \partial \mathbf{E}_i / \partial \hat{\mathbf{Q}}$  e  $\hat{\mathbf{B}} = \partial \mathbf{F}_i / \partial \hat{\mathbf{Q}}$ . Estes Jacobianos são dados por:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} u \frac{\partial \rho}{\partial P} & \rho & 0 & u \frac{\partial \rho}{\partial T} & u \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} \\ 1 + u^2 \frac{\partial \rho}{\partial P} & 2\rho u & 0 & u^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} & u^2 \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} \\ uv \frac{\partial \rho}{\partial P} & \rho v & \rho u & uv \frac{\partial \rho}{\partial T} & uv \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} \\ u \frac{\partial(\rho H)}{\partial P} & \rho(H + u^2) & \rho uv & u \frac{\partial(\rho H)}{\partial T} & u \frac{\partial(\rho H)}{\partial Y_1} \\ uY_1 \frac{\partial \rho}{\partial P} & \rho Y_1 & 0 & uY_1 \frac{\partial \rho}{\partial T} & u \frac{\partial(\rho Y_1)}{\partial Y_1} \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} v \frac{\partial \rho}{\partial P} & \rho & 0 & v \frac{\partial \rho}{\partial T} & v \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} \\ uv \frac{\partial \rho}{\partial P} & \rho v & \rho u & uv \frac{\partial \rho}{\partial T} & uv \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} \\ 1 + v^2 \frac{\partial \rho}{\partial P} & 2\rho v & 0 & v^2 \frac{\partial \rho}{\partial T} & v^2 \frac{\partial \rho}{\partial Y_1} \\ v \frac{\partial(\rho H)}{\partial P} & \rho uv & \rho(H + v^2) & v \frac{\partial(\rho H)}{\partial T} & v \frac{\partial(\rho H)}{\partial Y_1} \\ v Y_1 \frac{\partial \rho}{\partial P} & \rho Y_1 & 0 & v Y_1 \frac{\partial \rho}{\partial T} & v \frac{\partial(\rho Y_1)}{\partial Y_1} \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

onde temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho H)}{\partial P} &= H \frac{\partial \rho}{\partial P} + \rho \frac{\partial h}{\partial P}, & \frac{\partial(\rho H)}{\partial T} &= H \frac{\partial \rho}{\partial T} + \rho \frac{\partial h}{\partial T}, & \frac{\partial(\rho H)}{\partial Y_i} &= H \frac{\partial \rho}{\partial Y_i} + \rho \frac{\partial h}{\partial Y_i}, \\ \frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial Y_i} &= \rho + Y_i \frac{\partial \rho}{\partial Y_i}, & \frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial Y_j} &= Y_i \frac{\partial \rho}{\partial Y_j}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

A matriz précondicionadora  $\Gamma$  não altera os autovalores associados com a velocidade convectiva. Entretanto, esta matriz é calculada com a pseudo velocidade do som  $C_p$  na formulação (2.14) para que os autovalores convectivos e acústicos tenham a mesma ordem de grandeza. Os últimos assumem a forma:

$$\begin{aligned} u \pm c &\longrightarrow \frac{u}{2} \left( 1 + \frac{C_p^2}{c^2} \right) \pm \sqrt{C_p^2 + \left\{ \frac{u}{2} \left( 1 - \frac{C_p^2}{c^2} \right) \right\}^2} \\ v \pm c &\longrightarrow \frac{v}{2} \left( 1 + \frac{C_p^2}{c^2} \right) \pm \sqrt{C_p^2 + \left\{ \frac{v}{2} \left( 1 - \frac{C_p^2}{c^2} \right) \right\}^2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Para obtermos a solução transiente basta incluir na equação (2.11) a derivada no tempo físico da seguinte forma

$$\Gamma \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} + \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = \mathbf{H} \quad (2.20)$$

onde para cada passo no tempo físico iteramos a derivada no pseudo tempo até  $\partial \hat{\mathbf{Q}} / \partial \tau$  estar tão próximo de zero quanto possível recuperando assim a equação transiente original.

### 2.3 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE GOVERNO

O procedimento de solução computacional para o método com dois tempos distintos trabalha da seguinte forma. Para cada passo no tempo físico, a versão discretizada das equações (2.11) é iterada no pseudo-tempo até a derivada no pseudo-tempo  $\partial \hat{\mathbf{Q}} / \partial \tau$  ser reduzida até um erro arbitrário ( $error \equiv \epsilon$ ) definido pelo usuário e próximo de zero. Com isso, as equações (2.1) e (2.11) passam a ser equivalente segundo um erro da ordem  $O(\epsilon)$ . Se uma solução no

regime transiente for desejada,  $\epsilon$  pode ser ajustado para ser pequeno em cada passo no tempo físico. Caso contrário, se uma solução em regime permanente for desejada,  $\epsilon$  pode ser relativamente grande o equivalente a poucas ordens de magnitude de convergência no pseudo tempo  $\tau$ . O passo no pseudo-tempo  $\Delta\tau$  é, portanto, escolhido para uma convergência ótima em cada iteração, enquanto que o passo no tempo físico  $\Delta t$  é escolhido, em tese, de acordo com a física do problema. Na prática, entretanto,  $\Delta t$  é limitado pela sensibilidade que o sistema pré-condicionado tem em relação a não-linearidade inicial. Maiores detalhes relacionadas ao método numérico desenvolvido são discutidos a seguir.

### 2.3.1 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

Dois procedimentos diferentes foram utilizados até agora em relação a discretização temporal. Suas diferenças residem na forma como as derivadas espaciais são atualizadas em cada passo no pseudo-tempo, ou seja, de forma explícita ou implícita. A formulação explícita pode ser obtida a partir da implícita simplesmente removendo os termos espaciais do operador implícito, que pode ser compreendido através da linearização através da equação (2.24). Apenas a formulação implícita será descrita em detalhes.

A derivada no pseudo-tempo é aproximada pelo método de Euler implícito com um passo uniforme no pseudo-tempo  $\Delta\tau$ ,

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} \simeq \frac{\Delta \hat{\mathbf{Q}}}{\Delta \tau} + O(\Delta\tau), \quad (2.21)$$

com  $\Delta \hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{Q}}^{p+1} - \hat{\mathbf{Q}}^p$ . A derivada no tempo físico é aproximada pelo método de diferença atrasada multi-passo com o passo no tempo físico  $\Delta t$  não-uniforme,

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} \simeq \hat{a}_{N_t} \mathbf{Q}^{p+1} + \sum_{i=0}^{N_t} a_{N_t,i} \mathbf{Q}^{n-i} + O(\Delta t^{N_t+1}), \quad (2.22)$$

onde  $N_t = 0$  para a primeira iteração no tempo físico,  $N_t = 1$  para a segunda iteração e assim por diante. Para as simulações feitas nesta dissertação utilizamos  $N_t = 0$  e  $N_t = 1$  onde a precisão máxima no tempo físico é equivalente a  $O(\Delta t^2)$ . A iteração no tempo físico  $n + 1$  é aproximada pela iteração no pseudo tempo  $p + 1$ . Isto é rigorosamente verdadeiro apenas quando o regime permanente no pseudo tempo é atingido em cada passo no tempo físico. Os coeficientes  $\hat{a}_{N_t}$  e  $a_{N_t,i}$  nas expressões são dados na tabela 2.1.

As equações (2.11) para a iteração  $(p + 1)$  no pseudo-tempo e  $(n + 1)$  no tempo físico são então descritos como:

$$\Gamma^p \frac{\hat{\mathbf{Q}}^{p+1} - \hat{\mathbf{Q}}^p}{\Delta\tau} + \hat{a}_{N_t} \hat{\mathbf{Q}}^{p+1} + \sum_{i=0}^{N_t} a_{N_t,i} \mathbf{Q}^{n-i} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v)^{p+1} + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v)^{p+1} = \mathbf{H}^{p+1}. \quad (2.23)$$

	$N_t = 0$	$N_t = 1$	$N_t = 2$
$\hat{a}_{N_t}$	$\frac{1}{t_{n+1}-t_n}$	$\frac{1}{t_{n+1}-t_{n-1}} + \frac{1}{t_{n+1}-t_n}$	$\frac{1}{t_{n+1}-t_{n-2}} + \frac{1}{t_{n+1}-t_{n-1}} + \frac{1}{t_{n+1}-t_n}$
$a_{N_t,0}$	$-\frac{1}{t_{n+1}-t_n}$	$-\frac{t_{n+1}-t_{n-1}}{(t_{n+1}-t_n)(t_n-t_{n-1})}$	$-\frac{(t_{n+1}-t_{n-2})(t_{n+1}-t_{n-1})}{(t_{n+1}-t_n)(t_n-t_{n-2})(t_n-t_{n-1})}$
$a_{N_t,1}$	$0$	$\frac{t_{n+1}-t_n}{(t_{n+1}-t_{n-1})(t_n-t_{n-1})}$	$\frac{(t_{n+1}-t_{n-1})(t_n-t_{n-1})(t_{n-1}-t_{n-2})}{(t_{n+1}-t_{n-2})(t_{n+1}-t_n)}$
$a_{N_t,2}$	$0$	$0$	$-\frac{(t_{n+1}-t_{n-2})(t_n-t_{n-2})(t_{n-1}-t_{n-2})}{(t_{n+1}-t_{n-2})(t_n-t_{n-2})(t_{n-1}-t_{n-2})}$

TAB. 2.1: Coeficientes das derivadas no tempo físico

Com o intuito de construir um método de marcha implícita no pseudo tempo, a equação (2.23) necessita ser linearizada. Utilizando a série de Taylor um vetor  $\mathbf{f}$  pode ser linearizado da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}^{p+1} &\simeq \mathbf{f}^p + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \tau} \right|^p \Delta \tau + O(\Delta \tau^2) \\
&= \mathbf{f}^p + \left( \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \tau} \right)^p \Delta \tau + O(\Delta \tau^2) \\
&\simeq \mathbf{f}^p + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \right|^p \Delta \hat{\mathbf{Q}} + O(\Delta \tau^2),
\end{aligned} \tag{2.24}$$

onde os fluxos inviscidos contidos no Jacobiano  $\partial \mathbf{f} / \partial \hat{\mathbf{Q}}$  são dados por (2.16) e (2.17). O vetor  $\mathbf{Q}^{p+1}$  é linearizado usando o Jacobiano  $\mathbf{T} = \partial \mathbf{Q} / \partial \hat{\mathbf{Q}}$ , que é equivalente a matriz (2.13) com a exceção de

$$\rho_P = \frac{\partial \rho}{\partial P}, \quad \rho_T = \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad e \quad \rho_{Y_i} = \frac{\partial \rho}{\partial Y_i}, \tag{2.25}$$

onde estas derivadas são retiradas das relações para gases perfeitos (2.7). O termo para o Jacobiano  $\mathbf{D} = \partial \mathbf{H} / \partial \hat{\mathbf{Q}}$  é zero nesta pesquisa.

Os fluxos difusivos são linearizados de um modo diferente. Como  $\hat{\mathbf{Q}}^{p+1} = \hat{\mathbf{Q}}^p + \Delta \hat{\mathbf{Q}}$ , podemos escrever

$$\left( \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} \right)^{p+1} \simeq \left( \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} \right)^p + \left( \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right)^p \Delta \hat{\mathbf{Q}}, \tag{2.26}$$

onde a formulação (2.26) seria exata caso os termos contendo as derivadas cruzadas ( $\mathbf{R}_{x,y}, \mathbf{R}_{y,x}$ ) não fossem abandonados. Os Jacobianos difusivos são dados por

$$\mathbf{R}_{x,x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3/4\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 3/4\mu u & \mu v & k & \rho(D_{e,1}, h_1)^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho D_{e,1} \end{pmatrix}, \tag{2.27}$$

$$\mathbf{R}_{y,y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3/4\mu & 0 & 0 \\ 0 & \mu u & 3/4\mu v & k & \rho(D_{e,1}h_1)^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho D_{e,1} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

onde  $(D_{e,1}h_1)^* = (D_{e,1}h_1 - D_{e,2}h_2)$ .

Depois de linearizar as equações (2.23), obtemos a seguinte equação

$$\left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left( \frac{\partial}{\partial x} (\hat{\mathbf{A}} \cdot) + \frac{\partial}{\partial y} (\hat{\mathbf{B}} \cdot) \right) - \Delta\tau \left( \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\}^p \Delta \hat{\mathbf{Q}} = -\Delta\tau \mathbf{R}^p, \quad (2.29)$$

onde  $\mathbf{S}^p$  e  $\mathbf{R}^p$  equivalem à

$$\mathbf{S}^p = \mathbf{\Gamma}^p + \Delta\tau (\hat{a}_{N_t} \mathbf{T} - \mathbf{D})^p \quad e \quad \mathbf{R}^p = \sum_{i=0}^{N_t} a_{N_t,i} \mathbf{Q}^{n-i} + \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v)^p + \frac{\partial}{\partial y} (\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v)^p - \mathbf{H}^p. \quad (2.30)$$

A solução das equações (2.29) e (2.30) tem o custo computacional muito elevado devido a natureza penta-diagonal da matriz implícita no lado esquerdo de (2.29). Nestes casos, uma aproximação destas matrizes implícitas devem ser usadas. Foi escolhido o método ADI, também conhecido como o método implícito das direções alternadas DOUGLAS. Desta forma, a equação (2.29) pode ser fatorada de maneira aproximada, gerando

$$\left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{\mathbf{A}} - \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\}^p \mathbf{S}^{-1} \left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left( \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mathbf{B}} - \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\}^p \Delta \hat{\mathbf{Q}} = -\Delta\tau \mathbf{R}^p, \quad (2.31)$$

que pode ser resolvida em dois passos

$$\left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{\mathbf{A}} - \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{R}_{x,x} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\}^p \Delta \hat{\mathbf{Q}}^{(1)} = -\Delta\tau \mathbf{R}^p, \quad (2.32)$$

$$\left\{ \mathbf{S} + \Delta\tau \left( \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mathbf{B}} - \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{R}_{y,y} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\}^p \Delta \hat{\mathbf{Q}} = \mathbf{S} \Delta \hat{\mathbf{Q}}^{(1)}, \quad (2.33)$$

As matrizes implícitas nas equações (2.32) e (2.33) tem o custo computacional menor comparado a sua respectiva matriz na equação (2.29). Este aumento de eficiência tem um custo: a equação (2.31) não é igual a equação (2.29). Entretanto, quando a convergência no pseudo-tempo é atingida, o lado esquerdo de ambas as equações vão para zero e o sistema (2.31) e (2.29) geram a mesma solução.



### 2.3.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

No código original todas as derivadas espaciais foram aproximadas com diferenças centradas de segunda ordem com malha não-uniforme, onde foi introduzida uma dissipação artificial de quarta ordem no termo explícito e segunda ordem no termo implícito.

Este código foi melhorado neste trabalho para incluir um discretização espacial centrada de quarta ordem com a malha não-uniforme, onde foi introduzida uma dissipação artificial escalar de sexta ordem no termo explícito para aumentar a estabilidade numérica e nos contornos foi reduzida uma ordem na discretização para evitar introdução de oscilações indesejadas na solução. As primeiras derivadas no termo implícito foram mantidas para que a matriz implícita continuasse a ser tri-diagonal.

Notamos que as fórmulas de dissipação artificial padrão não poderiam ser usadas dentro da estrutura do preconditionador sem fazer alguns ajustes. Estas fórmulas devem ser mudadas por que nós iteramos nosso método no pseudo-tempo e não no tempo físico. Então, a amplitude do termo da dissipação é afetado. A fórmula usada tem a forma:

$$\mathbf{AD}_x = \epsilon_x^m \Delta x^{m-1} \Gamma \lambda_x^+ \frac{\partial^m \hat{\mathbf{Q}}}{\partial x^m}, \quad (2.34)$$

para o termo explícito. Uma fórmula similar é usada para  $\mathbf{AD}_y$ , que é o termo implícito. Os coeficientes  $\epsilon$  foram ajustados nos testes de validação que serão mostrados a seguir.

### 3 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Um dos pontos críticos da simulação computacional de escoamentos externos é a implementação adequada das condições de contorno. Isto ocorre devido à necessidade de truncar o domínio infinito ou semi-infinito, criando um contorno artificial onde condições aproximadas adicionais precisam ser impostas no lugar das equações de conservação, podendo gerar reflexões numéricas indesejadas.

Uma das alternativas para solucionar este problema é utilizar uma transformação de coordenadas, mapeando o domínio infinito ou semi-infinito em um domínio finito GROSCH (1977). Contudo, a perda implícita de resolução na malha introduz oscilações numéricas indesejadas quando o escoamento não reduz assintoticamente para a condição de contorno no infinito.

Dois tipos de condições de contorno artificiais com alta precisão podem ser encontradas na literatura. O primeiro tipo é comumente conhecido como condição de contorno global por exigir uma região finita do domínio para minimizar erros gerados no contorno BLASCHAK (1988); BODONY (2006). Técnicas como o afastamento dos pontos da malha ou o aumento da dissipação artificial próximo ao contorno também são considerados como condições de contorno globais. Contudo, provavelmente o método mais utilizado é conhecido como região de absorção. Este método introduz um termo fonte nas equações de conservação que forçam a solução calculada convergir para uma solução de referência na região próxima ao contorno artificial. Com isso, oscilações indesejadas são amortecidas antes de atingir o contorno. O outro tipo é conhecido como condição de contorno local, uma vez que ele só age na linha (2D) ou superfície (3D) do contorno artificial. Uma das técnicas mais usadas é conhecida como condições não-reflexivas, que modelam o comportamento de perturbações lineares em torno de um escoamento base no contorno GILES (1990); COLONIUS (1993). Outra técnica bastante usada é conhecida como método das características THOMPSON (1987a); POINSOT (1992). Este método impede que ondas características provenientes de fora do domínio truncado entrem no mesmo, minimizando reflexões numéricas indesejadas.

O código computacional original TEIXEIRA (2008) utiliza no contorno o método das características conhecido como LODI POINSOT (1992). Esta técnica local foi melhorada e regiões de absorção foram implementadas para melhor controle de erro no contorno. Neste capítulo a implementação destas novas condições de contorno será discutida com mais detalhes.

### 3.1 CONDIÇÃO DE CONTORNO LOCAL

Uma técnica atraente para condições de contorno locais de sistemas hiperbólicos é baseado na relação de linhas características, ou seja, uma análise das diferentes ondas que atravessam os contornos. Este método tem sido bastante estudado e se baseia nas equações de Euler normais ao contorno POINSOT (1992). Ela determina a direção de propagação das ondas convectivas e acústicas no contorno, filtrando as ondas que estão entrando no domínio THOMPSON (1987a,b). Nesta dissertação será abreviado como LODI.

Como descrito anteriormente a análise das características do sistema tem como base as equações de Euler abaixo

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}_i}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

onde  $\mathbf{Q}$  é vetor das variáveis conservativas e  $\mathbf{E}_i$  vetor dos fluxos não-viscosos descritos em (2.2). Ao aplicarmos uma regra da cadeia na equação (3.1) obtemos a seguinte equação

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}_i}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0 \quad (3.2)$$

onde temos  $\mathbf{A} = \partial \mathbf{E}_i / \partial \mathbf{Q}$ . Logo, podemos escrever

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0. \quad (3.3)$$

Para fazer a análise das ondas características do escoamento é necessário diagonalizar o sistema utilizando a matriz de autovalores de  $\mathbf{A}$ . Assim,

$$\mathbf{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{M}) \mathbf{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0. \quad (3.4)$$

onde  $\mathbf{\Lambda} = (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{M})$ ,  $\frac{\partial \omega}{\partial t} = \mathbf{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t}$  e  $\frac{\partial \omega}{\partial x} = \mathbf{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x}$ . Desta forma, podemos escrever a equação (3.1) como

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

onde  $\mathbf{\Lambda}$  é a matriz diagonal do sistema contendo os autovalores da matriz  $\mathbf{A}$ , ou seja,

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

sendo que os autovalores são

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u \\ \lambda_2 &= u + c \\ \lambda_3 &= u - c \end{aligned} \quad (3.7)$$

Podemos observar que o sistema de equações (3.4) é desacoplado, tomando a forma

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega_1}{\partial t} + \lambda_1 \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \omega_2}{\partial t} + \lambda_2 \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \omega_3}{\partial t} + \lambda_3 \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

onde o vetor  $\omega$  contém as componentes

$$\begin{cases} \omega_1 \rightarrow s \\ \omega_2 \rightarrow u + \frac{2}{\gamma - 1}c \\ \omega_3 \rightarrow u - \frac{2}{\gamma - 1}c \end{cases} \quad (3.9)$$

onde  $s$  é a entropia e  $\gamma$  a razão para calor específico.

De acordo com a direção de propagação, dada pelo sinal dos autovalores e as características do escoamento, podemos descrever a tabela de implementação do contorno. Logo, impomos na entrada as condições referentes a  $\omega_1$  e  $\omega_2$  e calculamos  $\omega_3$ , e na saída calculamos  $\omega_1$  e  $\omega_2$  e impomos a informação referente a  $\omega_3$ . Isto é feito por termos um escoamento subsônico tanto para a entrada quanto na saída. Basta agora retornar com o algebrismo e calcular a equação (3.1) modificada para o calculo do contorno local. Entretanto, nesta formulação *LODI*, são calculadas a informações normais ao contorno, negligenciando os termos tangentes e viscosos. Logo adicionamos à solução do *LODI* os termos inviscidos e viscosos tangentes ao escoamento para uma melhor aproximação para as equações de Navier-Stokes. Contudo, as condições impostas na entrada são:

$$\begin{aligned} U(y) &= \bar{U} \left[ 1 + R \tanh \left( \frac{y}{2\theta_0} \right) \right] \\ v(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde  $R = \Delta U / (2\bar{U})$  é a razão de velocidade entre a magnitude relativa do total de cisalhamento  $\Delta U = U_2 - U_1$  e a velocidade média  $\bar{U} = (U_1 + U_2)/2$ ,  $\theta_0$  é a espessura da quantidade de movimento e para a saída é:

$$p = p_{atm}$$

Logo através da Tabela (3.1) podemos descrevermos a implementação do *LODI* para escoamento subsônico e supersônico.

	Subsônico	Supersônico
Entrada	Duas condições $\omega_1$ e $\omega_2$	Três condições $\omega_1, \omega_2$ e $\omega_3$
Saída	Uma condição $\omega_3$	Zero condição

TAB. 3.1: Número de condições de implementação do *LODI*

### 3.2 CONDIÇÃO DE CONTORNO GLOBAL

Condições de absorção, um subgrupo das condições de contorno globais COLONIUS (2004), são condições onde a física do escoamento é modificada em uma região finita do escoamento. Esta região pode ser a jusante do escoamento, mas em alguns casos esta modificação pode ser feita a montante do escoamento, ou até mesmo em uma região qualquer do mesmo.

Dadas as equações compressíveis de Navier-Stokes (2.1) é introduzido um termo fonte da seguinte forma

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_v) + \frac{\partial}{\partial y}(\mathbf{F}_i - \mathbf{F}_v) = -\sigma(\mathbf{Q} - \mathbf{Q}_0) \quad (3.11)$$

onde  $\mathbf{Q}_0$  é uma solução de referência e  $\sigma$  é uma função que permite a variação da solução resolvida pela simulação para a solução de referência na região do escoamento desejado. A função  $\sigma$  foi escolhida de acordo com Freund FREUND (1997)

$$\sigma(x) = \begin{cases} \sigma_o \left( \frac{W_\sigma - x}{W_\sigma} \right)^\beta & 0 \leq x < W_\sigma \\ 0 & W_\sigma \leq x < W_\sigma - x_{max} \\ \sigma_o \left( \frac{x - (x_{max} - W_\sigma)}{W_\sigma} \right)^\beta & x_{max} - W_\sigma \leq x < x_{max} \end{cases} \quad (3.12)$$

onde  $W_\sigma$  é o comprimento da região de absorção,  $x_{max}$  é o limite do domínio computacional e  $\sigma_o$  é uma constante arbitrária para o uso do contorno de absorção. A ideia por trás da escolha do parâmetro  $\sigma$  é fazer o termo fonte muito maior que os outros termos das equações, que incluem os fluxos inviscidos e viscosos, de modo que a solução de referência possa ser obtida de maneira suave na região escolhida pelo usuário.

## 4 RESULTADOS

Como foi mencionado anteriormente nesta dissertação, o presente trabalho evoluiu a partir de um código desenvolvido anteriormente por Alves TEIXEIRA (2008); ALVES (2006). O algoritmo marcha a solução no pseudo tempo com o método de Euler implícito e no tempo físico com BDF de segunda ordem com passo no tempo variável, sendo que o primeiro passo no tempo físico é dado com BDF de primeira ordem. Além disso o algoritmo utiliza malha cartesiana no espaço, com diferença centrada de segunda-ordem e dissipação artificial escalar que não altera a ordem de erro espacial. As modificações feitas neste código, assim como o aumento de ordem na discretização espacial e a respectiva alteração para dissipação escalar, tiveram como objetivo melhorar a resolução espacial para poder capturar de maneira precisa o desenvolvimento espacial das perturbações e minimizar instabilidades de origem não física.

### 4.1 AVANÇOS E VALIDAÇÃO

O primeiro passo dado teve como objetivo capacitar este código para utilizar malhas espaciais não-uniformes. Isto é importante uma vez que a maior parte dos fenômenos de interesse em uma camada de mistura plana ocorrem apenas em uma pequena região onde a vorticidade está concentrada. Com isso, é possível termos uma malha refinada nesta região e afastar os contornos artificiais o máximo possível sem aumentar o custo computacional de maneira significativa.

As Figuras 4.1 e 4.2 ilustram as malhas não-uniformes usada nas simulações espaciais da camada de mistura. Foi utilizada uma malha com estiramento na direção do escoamento Figura 4.2, pois é uma técnica de condição de contorno global útil para minimizar o erro no contorno de saída. O estudo de convergência da malha foi obtido à medida que mais pontos foram introduzidos em ambas as direções até que não houvesse variação dos resultados em regime permanente.

Para a determinação das dimensões do domínio das simulações realizadas nesta dissertação, primeiramente foi escolhido a espessura da quantidade movimento da camada de mistura na entrada a partir das velocidades nas diferentes regiões. A velocidade máxima na extremidade superior da placa foi selecionada tal que  $U_1 = 0.34605 \text{ m/s}$  e na extremidade inferior  $U_2 = 0.173025 \text{ m/s}$  ( $Re_{1,\theta_0} \simeq 67,87$  e  $Re_{2,\theta_0} \simeq 33,94$ ) e a espessura de quantidade de movimento

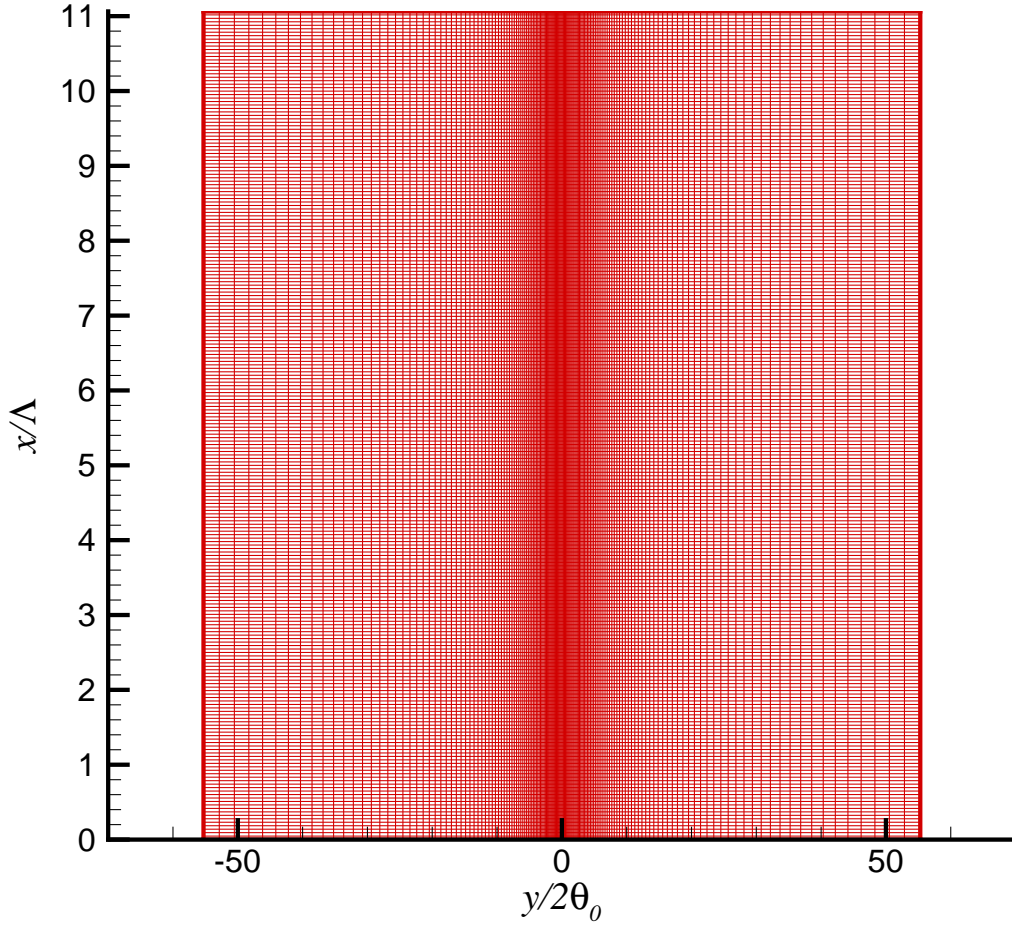


FIG. 4.1: Refinamento da malha na direção transversal

na entrada  $\theta_0 = 0.316488 \text{ mm}$  que é definida pela fórmula

$$\theta_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{4} - \left( \frac{u(x, y) - \bar{U}}{U_1 - U_2} \right)^2 \right) \quad (4.1)$$

onde  $\bar{U} = (U_1 + U_2)/2$  para  $U_1/U_2 = 0.5$ . Com isso, através da análise de estabilidade linear Figura 4.3 obtida por Alves ALVES (2006) determinamos o período e o comprimento de onda de oscilação da perturbação com maior taxa de crescimento espacial. Ou seja, analisamos o número de Strouhal ( $St \equiv \text{frequência} \times \text{comprimento}/\text{velocidade}$ ) que gera a maior taxa de crescimento e obtemos o período da perturbação como o tempo característico da simulação. Para o tamanho do domínio na direção longitudinal calculamos o comprimento de onda da perturbação a partir da frequência que gera maior taxa de crescimento. De acordo com a análise de estabilidade linear, com as condições escolhidas a perturbação com maior taxa de amplificação deveria ser propagada com o período de  $\tau_{AEL} = 0.34827s$  e comprimento de onda

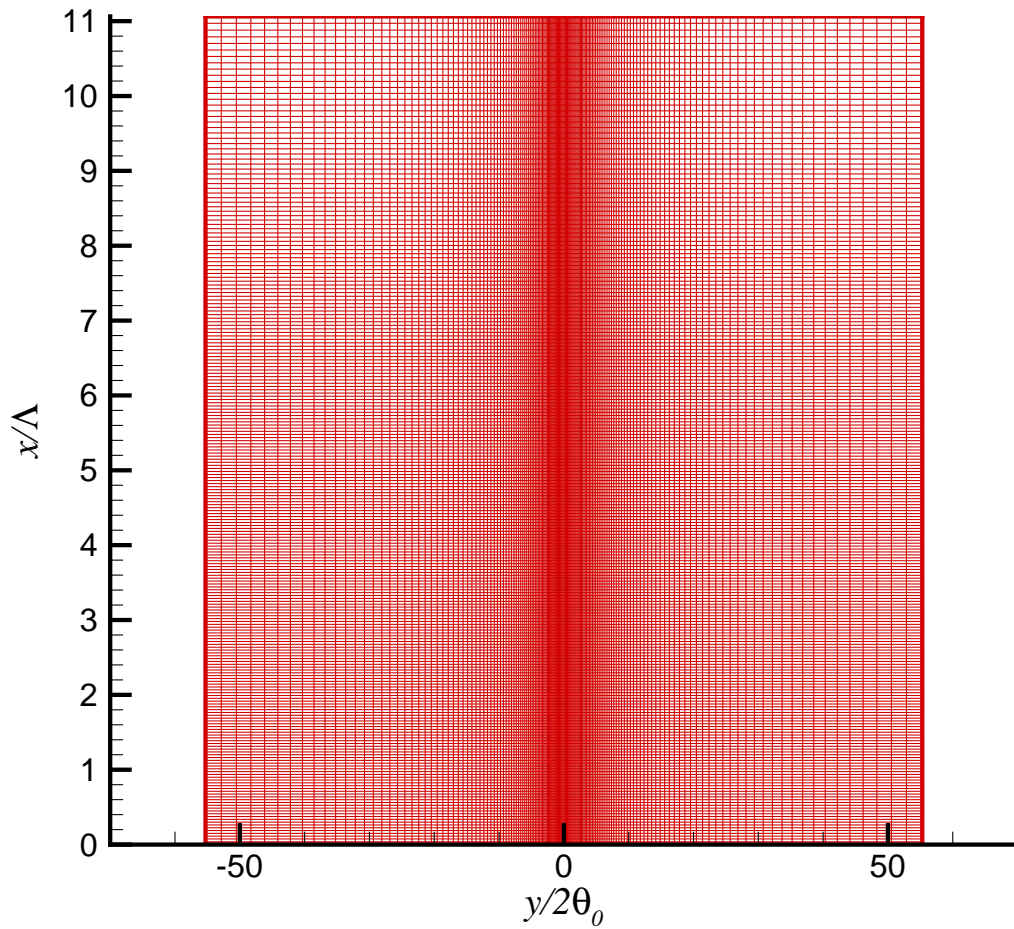


FIG. 4.2: Refinamento da malha na direção transversal e longitudinal

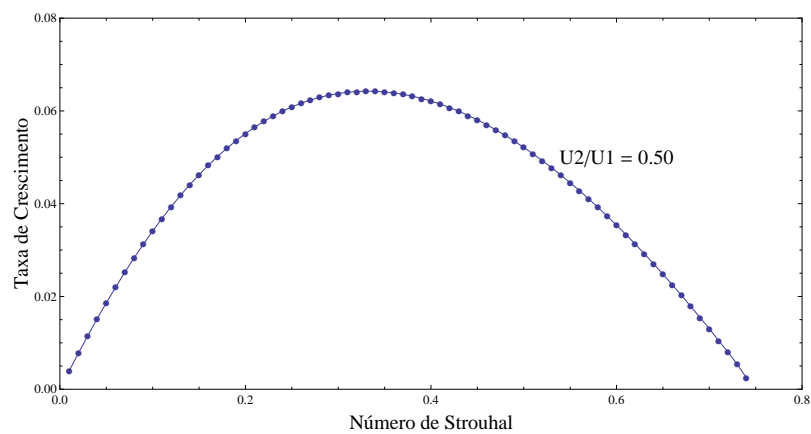


FIG. 4.3: Taxa de crescimento de perturbações lineares pela frequência

$\Lambda_{AEL} = 0.09042m$ . O comprimento do domínio na direção do escoamento contém aproximadamente entre 9 e 10 comprimentos de onda. Tomando como base a espessura da quantidade



movimento da camada de mistura na entrada, afastamos a malha transversal da região cisalhante, em aproximadamente entre  $200\theta_0$  e  $250\theta_0$ , para minimizar a interação entre a camada de mistura e o contorno lateral. Também tivemos como base distâncias utilizadas em outras simulações GRINSTEIN (1991) que estavam em torno de  $150\theta_0$  e  $200\theta_0$ .

Uma parte importante da validação do novo código desenvolvido é ajustar os valores da dissipação artificial escalar. A versão implícita deste parâmetro controla apenas a convergência, sua versão explícita controla a estabilidade numérica da solução final. Uma análise de erro de truncamento de aproximações que usam diferenças centradas mostra que elas não possuem dissipação numérica, o que pode levar a oscilações indesejadas nos resultados. A dissipação artificial consegue minimizar este problema sem afetar a ordem de erro, uma vez que o termo inserido é da mesma ordem ou de ordem maior que o primeiro termo do erro de truncamento. Isto pode ser observado na Figura 4.4, que mostra uma pequena oscilação na região de baixa velocidade do gradiente não nulo na região cisalhante para pequenos valores da dissipação e que isto pode ser virtualmente eliminado com um pequeno ajuste.

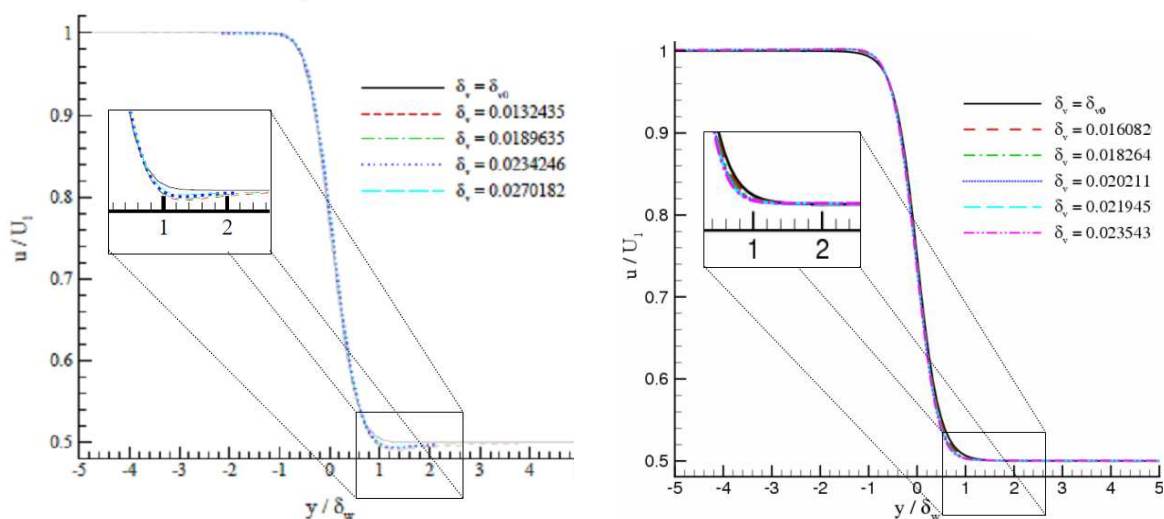


FIG. 4.4: Camada de mistura adimensionalizada com  $AD_e$  distintos para discretização espacial de 2º ordem

Podemos então analisar a solução de regime permanente obtida para baixas velocidades, onde o escoamento ainda é laminar, mostrada na Figura 4.5. Ao adimensionalizarmos as soluções obtidas em varias posições progressivamente mais distantes do contorno de entrada em relação a espessura de vorticidade local ( $\delta_v \equiv (U_1 - U_2)/(du/dy)_{y=0}$ ), observamos que elas colapsam umas sobre as outras. Isso era esperado uma vez que a solução deve apresentar similaridade e serve para validar o estudo numérico com precisão espacial de segunda ordem com malha não-uniforme.

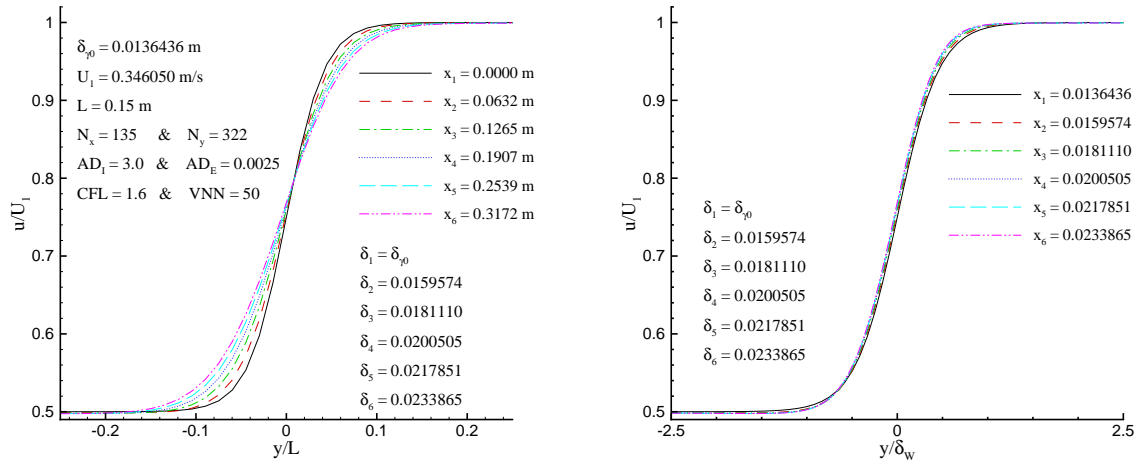


FIG. 4.5: Camada de mistura para a malha não-uniforme e com discretização espacial centrada de 2º ordem

A confiança ganha com a validação dos resultados de segunda-ordem espacial com malha não-uniforme permitiu a extensão do código para discretizações espaciais de quarta-ordem com malhas tanto uniformes quanto não-uniformes. Estes resultados são apresentados nas Figuras 4.6 e 4.7, que mostram tanto a ausência de oscilações quanto o colapso das curvas após a adimensionalização adequada. É importante ressaltar que a dissipação artificial escalar foi novamente ajustada para estas simulações da mesma forma discutida anteriormente. Finalmente, é possível perceber que todos estes resultados, com segunda e quarta-ordem de malha uniforme e não-uniforme, são graficamente idênticos. Um resultado importante para a validação dos novos códigos.

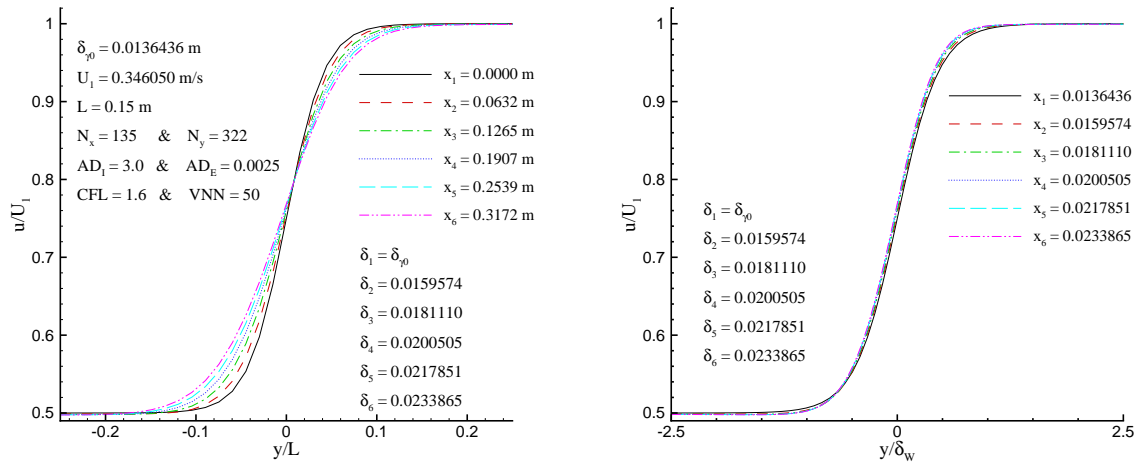


FIG. 4.6: Camada de mistura para a malha uniforme em ambas direções e com discretização espacial centrada de 4º ordem

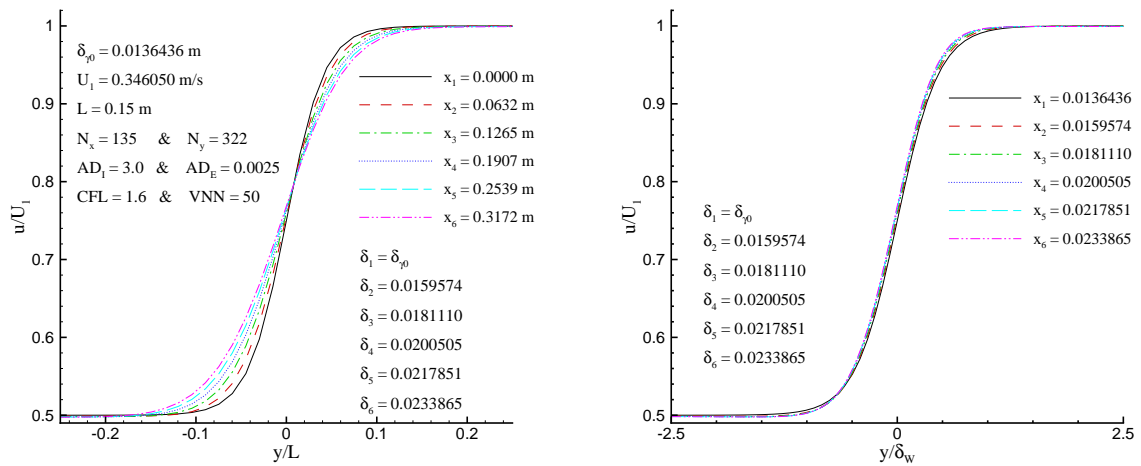


FIG. 4.7: Camada de mistura para a malha não-uniforme apenas na direção transversal e com discretização espacial centrada de 4º ordem

## 4.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO NAS PAREDES TRANSVERSAIS

Tradicionalmente, simulações computacionais de camadas mistura em escoamentos abertos impõem um valor nulo para a primeira derivada normal as paredes laterais artificiais de todas as variáveis dependentes como condição de contorno. A exceção é a pressão, que é prescrita como atmosférica TEIXEIRA (2008); ALVES (2006). Estas condições são escritas abaixo:

$$\begin{aligned} p &= p_0 \\ \frac{du}{dy} &= 0 \\ \frac{dv}{dy} &= 0 \\ \frac{dT}{dy} &= 0. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Esta escolha é baseada na solução por similaridade obtida das equações de camada limite para o problema da camada de mistura plana, onde as primeiras derivadas das duas componentes da velocidade são realmente nulas nestes contornos SCHLICHTING (1986). Contudo, sabemos que esta imposição não é adequada pois implica que o centro da camada de mistura permanece em  $y = 0$  para qualquer  $x$ , o que não é observado computacionalmente ou experimentalmente KUNDU (2002).

Ao invés destas condições, impomos que a segunda derivada da velocidade transversal é nula, o que nos leva a uma nova condição de contorno para a pressão POINSOT (1992). Mantendo a mesma condição para a componente longitudinal da velocidade podemos escrever:

$$\begin{aligned} \rho v \frac{dv}{dy} + \frac{dp}{dy} &= 0 \\ \frac{du}{dy} &= 0 \\ \frac{d^2v}{dy^2} &= 0 \\ \frac{dT}{dy} &= 0. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Estas condições de contorno paralelas podem ser comparadas analisando as Figuras 4.8 e 4.9, que mostram as isolinhas da velocidade constante associadas a componente transversal da velocidade para cada caso. É possível ver que as condições tradicionais introduzem oscilações indesejadas nas laterais, que não estão presentes quando as novas condições são usadas. A qualidade desta nova proposta pode ser melhor entendida analisando as Figuras 4.10 e 4.11, que mostram  $v(y)$  em diferentes distâncias da entrada. Podemos ver claramente que a velocidade

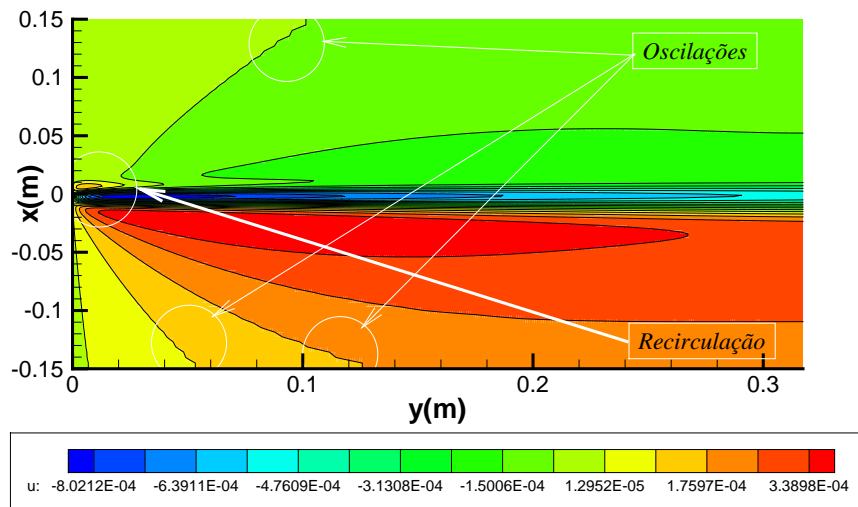


FIG. 4.8: Isolinas de velocidade constante da componente transversal da velocidade em regime permanente . Condições de Contorno da equação (4.2)

transversal não possui uma primeira derivada nula nos contorno, mas sim uma segunda derivada nula nestas regiões.

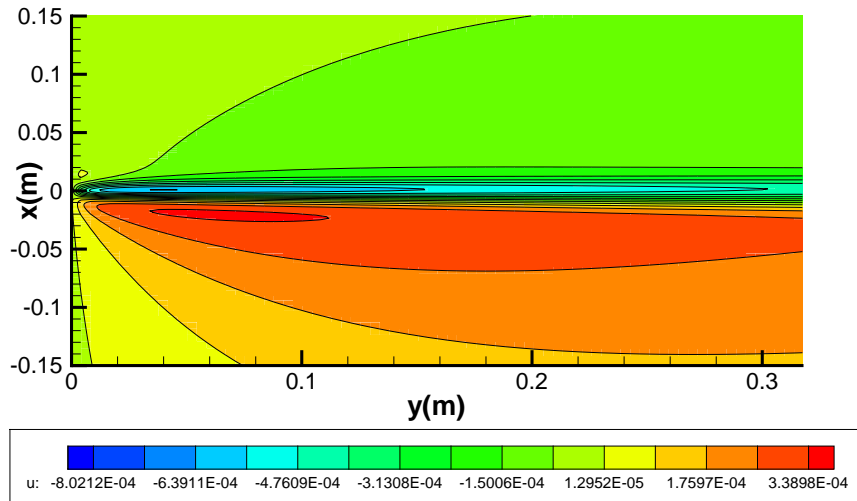


FIG. 4.9: Isolinas de velocidade constante da componente transversal da velocidade em regime permanente . Condições de Contorno da equação (4.3)

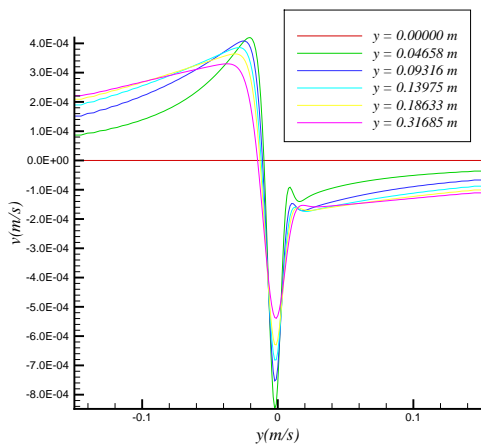


FIG. 4.10: Velocidade Transversal em diferentes distâncias da entrada. Contorno 4.2

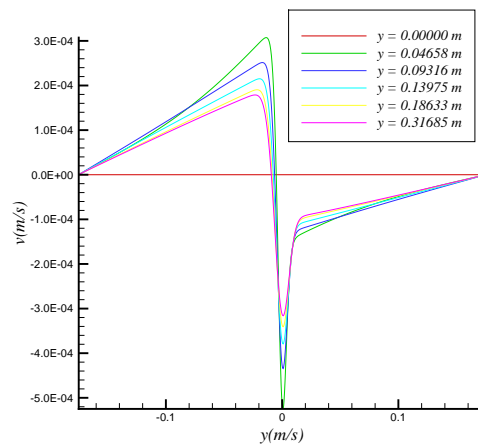


FIG. 4.11: Velocidade Transversal em diferentes distâncias da entrada. Contorno 4.3

### 4.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO DE ENTRADA E SAÍDA LOCAIS

As primeiras simulações da camada de mistura plana usaram como condição de entrada e inicial uma função tangente hiperbólica para a velocidade longitudinal, zero para a velocidade transversal e a pressão atmosférica para a pressão. Lembrando que, no trabalho original, a formulação LODI tradicional discutida no capítulo 3 na secção 1 foi usada na entrada e na saída para calcular as informações que não poderiam ser prescritas TEIXEIRA (2008), como foi explicado no capítulo anterior. A malha usada é descrita na Figura 4.1 e as velocidades são  $U_1 = 0.34605 \text{ m/s}$  e  $U_2 = 0.173025 \text{ m/s}$ . Contudo, um vórtice inicial foi detectado nas simulações. Ele pode ser visto na Figura 4.12 e 4.13, que mostra como a perturbação na velocidade transversal em distâncias uniformemente maiores da entrada varia com o tempo. Os números em cada linha mostram a amplitude máxima de cada onda. Podemos ver que a amplitude aumenta com a distância, um comportamento esperado de perturbação em um escoamento convectivamente instável. Este fenômeno é conhecido na literatura como start-up vortex, e sempre aparece desde as primeiras simulações contendo camadas de mistura BUELL. Este vórtice aumenta significativamente de amplitude quando a diferença de velocidades das duas camadas aumenta ou quando o número de Mach delas aumenta, o que também já havia sido mostrado na literatura GRINSTEIN (1991). Ele é encontrado até em simulações mais recentes deste problema MCMULLAN (2007)

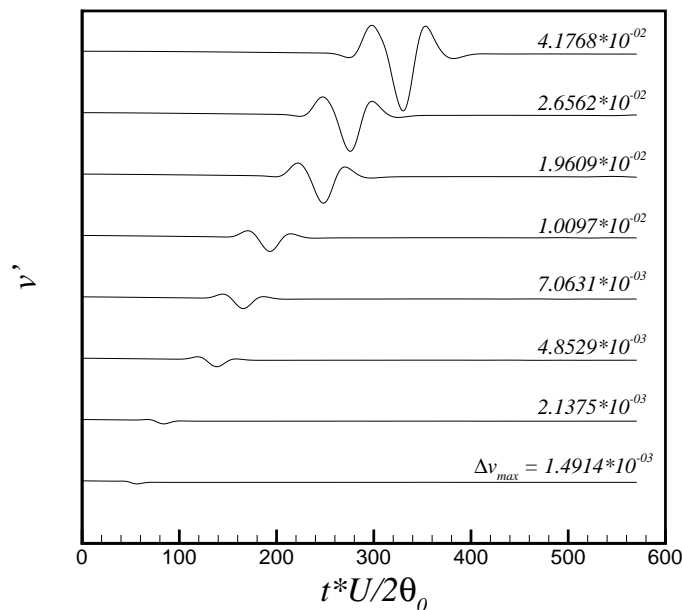


FIG. 4.12: Amplificação temporal para LODI padrão com condição inicial tangente hiperbólica

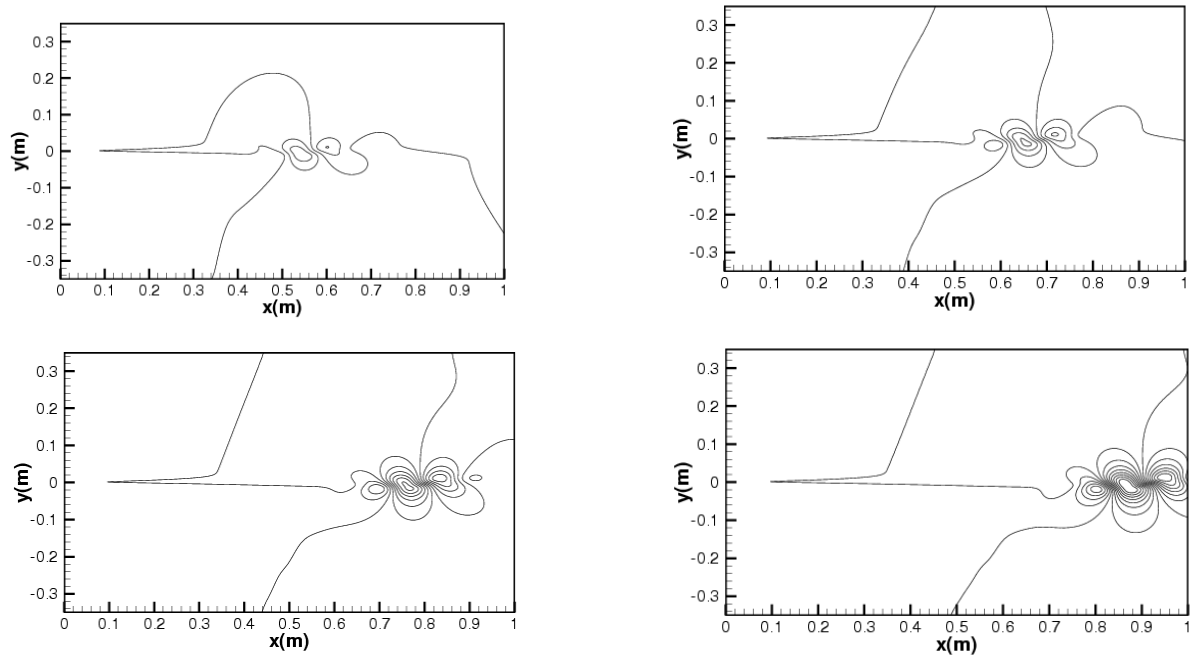


FIG. 4.13: Isolinhas da Perturbação na Velocidade Transversal da Figura 4.12 em diferentes tempos  $t = 1.74s, 2.17s, 2.61s$  e  $3.04s$ .



As condições de contorno de entrada e saída foram então modificadas para minimizar este problema. Duas simples alternativas colocam de volta nestas condições os termos nas direções não-normais originalmente desprezados para viabilizar a seleção das ondas entrando ou saindo do domínio usando o método das características. Estas abordagens são robustas e acuradas, apesar de arbitrárias, e bastante utilizadas para escoamentos compressíveis de alta velocidade COLONIUS (2004). Elas são usadas aqui pois sua extensão para escoamentos com baixo Mach não requer modificações devido a presença dos preconditionadores. LODI modificado inviscido e LODI modificado inviscido/viscoso serão os nomes usados nesta dissertação, por terem os respectivos fluxos re-introduzidos como os próprios nomes sugerem, são seus nomes usados neste estudo.

As Figuras 4.14 e 4.15 mostram o mesmo resultado da Figura 4.12, porém com as novas condições de contorno de entrada e saída: LODI modificado inviscido e inviscido/viscoso, respectivamente. Podemos ver que a onda inicial formada próximo a entrada tem aproximadamente a mesma amplitude nos três casos, apesar das novas condições de contorno serem significativamente mais precisas. A onda final na saída também tem a mesma amplitude nos três casos, mas isto era esperado devido a instabilidade convectiva do escoamento.

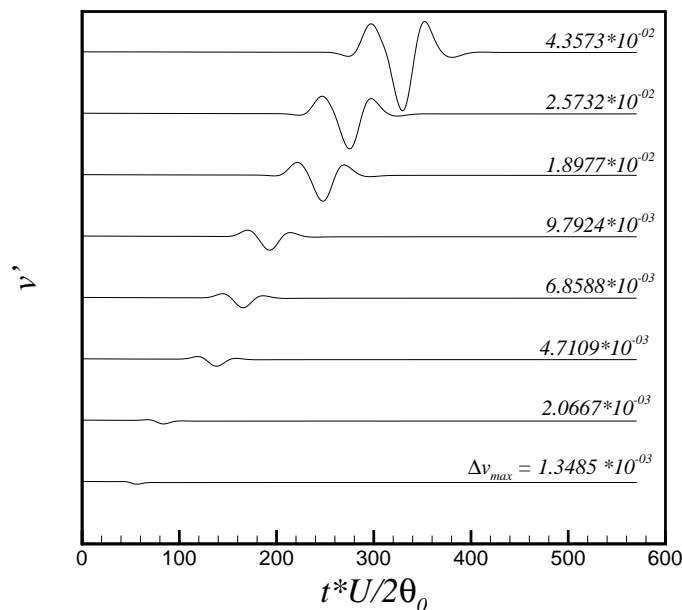


FIG. 4.14: Amplificação temporal para LODI modificado inviscido e condição inicial tangente hiperbólica

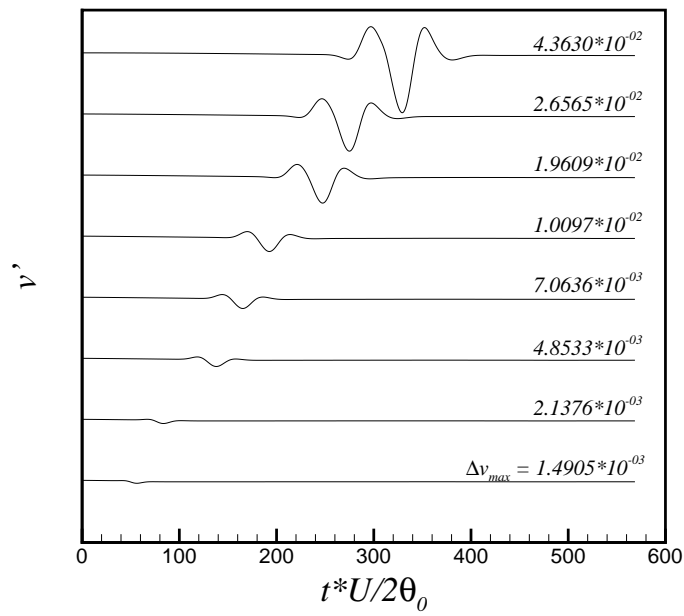


FIG. 4.15: Amplificação temporal para LODI modificado invíscido/viscoso e condição inicial tangente hiperbólica

Esta análise indica que existe alguma fonte de erro contaminando a simulação numérica e, desta forma, impedindo que as novas condições de contorno sejam observadas com clareza. Um candidato é a condição inicial. Recentemente, um estudo de camadas de mistura planas com periodicidade espacial mostrou que usar a solução de similaridade tradicional como condição inicial introduz oscilações de alta frequência na simulação numérica LARDJANE (2004). Este problema foi minimizado com o uso de uma nova solução de similaridade obtida de um problema de camada limite com periodicidade espacial. Contudo, tais soluções ainda são uma aproximação do caso real e não podem ser obtidas para qualquer problema. Este modesto ganho de precisão e falta de generalidade pede a busca de melhores condições iniciais. Uma outra alternativa seria usar a condição de regime permanente como condição inicial. Contudo, diversos problemas em mecânica dos fluidos são instáveis. Dissipação numérica pode ser introduzida na simulação para gerar tais soluções. Entretanto, muito cuidado é necessário para evitar que solução não físicas sejam geradas. A melhor maneira de atingir este objetivo é introduzir dissipação através do termo transiente, uma vez que ele desaparece no regime permanente. O método de Euler para a direção de marcha é o mais dissipativo por ter precisão de primeira ordem. Ele é implementado de maneira implícita para que maiores passos no tempo sejam possíveis durante a simulação. Isto permite aumentar a quantidade de dissipação introduzida, uma vez que ela é proporcional ao passo no tempo. Um cuidado adicional necessário ao usar este procedimento é marchar a solução na forma residual, já que o regime permanente passa a ser independente do passo no tempo escolhido TANNEHILL. Finalmente, é importante lembrar que estas soluções de regime permanente são artificiais, visto que o escoamento é instável. Elas são apenas um artifício matemático para minimizar o erro.

As simulações mostradas nas três últimas figuras foram repetidas, porém usando as respectivas soluções de regime permanente como condição inicial, e são mostradas nas Figuras 4.16, 4.17 e 4.18. Agora, o erro introduzido pela condição inicial foi reduzido drasticamente e a maior fonte de erro na simulação voltou a ser as condições de contorno na entrada e saída. As amplitudes das ondas refletidas devido aos LODI modificados inviscidos e inviscidos/viscosos são da mesma ordem, porém de uma a duas ordens de magnitude menores que as respectivas ondas refletidas devido ao LODI tradicional. Este resultado confirma a maior precisão esperada das condições de contorno baseados em ambos os LODI modificados. Ainda mais importante, as ondas refletidas com a nova condição inicial chegam a ser três ordens de magnitude menores que as refletidas com a condição inicial antiga.

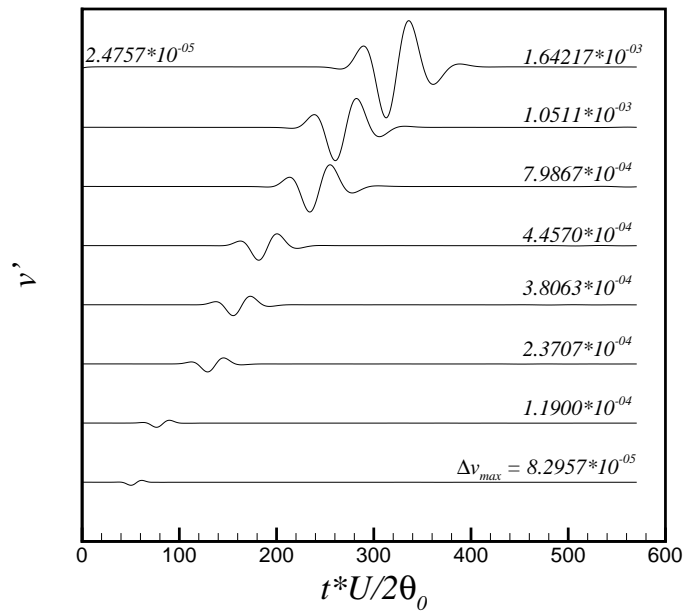


FIG. 4.16: Amplificação temporal para LODI padrão com condição inicial de regime permanente

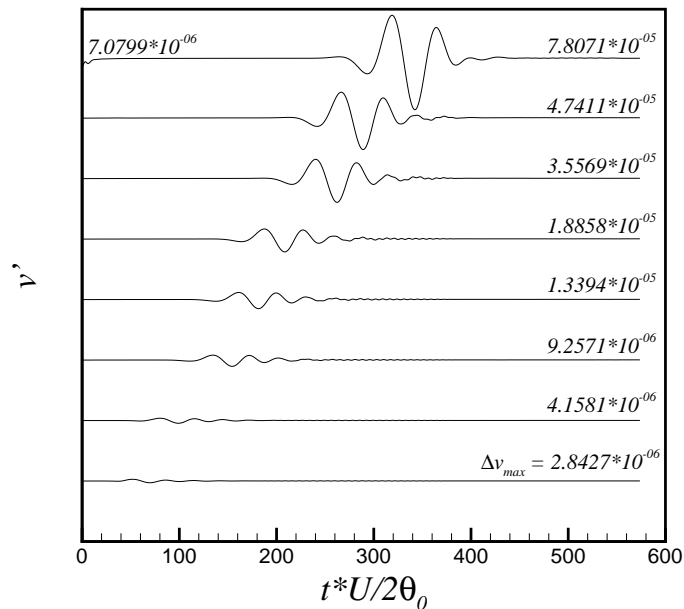


FIG. 4.17: Amplificação temporal para LODI modificado invíscido e condição inicial de regime permanente

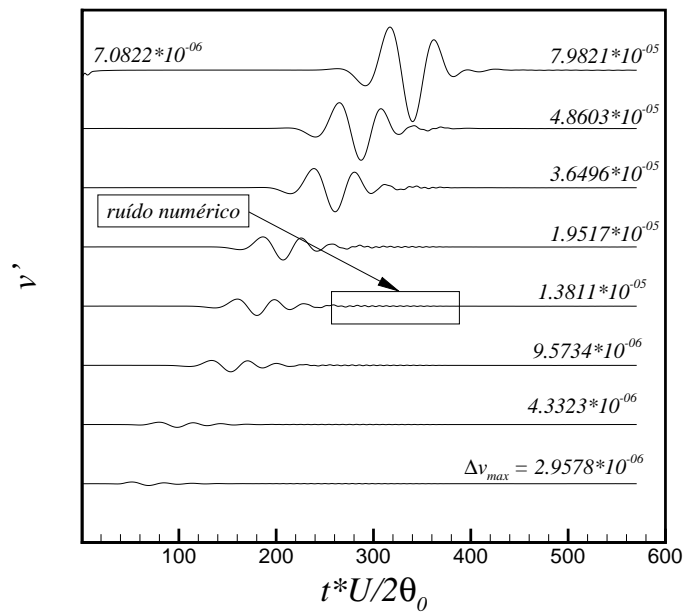


FIG. 4.18: Amplificação temporal para LODI modificado invíscido/viscoso e condição inicial de regime permanente

Agora que a maior fonte de erro voltou a ser as condições de contorno na entrada e/ou saída, outro resultado importante pode ser observado nestas figuras. A origem do vórtice inicial, conhecido como “start-up vortex”, é atribuída na literatura à descontinuidade na primeira derivada entre as condições inicial e de contorno na entrada e, por isso, assumida inevitável BUELL. Esta é provavelmente a principal razão pela qual condições iniciais aproximadas, como a tangente hiperbólica ou a solução de camada limite, são usadas até hoje na literatura, como mencionado anteriormente. Contudo as Figuras 4.17 e 4.18 mostram uma oscilação no início da simulação próximo ao contorno de saída. Ela tem uma amplitude mais de duas vezes maior que a onda refletida próximo ao contorno de entrada. Isto é um forte indício que o vórtice inicial é formado por alguma descontinuidade entre a condição inicial e a condição de contorno de saída, e não na entrada. Portanto, ele já é uma consequência da auto-excitação induzida por reflexões numéricas entre os contornos de entrada e saída. Este resultado é importante pois diversos estudos computacionais publicados recentemente GRINSTEIN (2002, 1991, 1990) argumentam a favor da existência de um efeito de auto-excitação causado pela interação não-linear associada à junção de dois vórtices consecutivos, a jusante da entrada, para camadas de mistura tanto incompressíveis quanto compressíveis. Todos usam uma condição inicial aproximada por funções do tipo tangente hiperbólica. A presente descoberta está de acordo com a análise de estabilidade linear HO (1984); HUERRE (1990) e não-linear CHOMAZ (2005) de camadas de mistura, que confirmam a inexistência deste efeito de auto-excitação nos casos discutidos neste trabalho.

#### 4.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO DE ENTRADA E SAÍDA GLOBAIS

O caminho natural após estes resultados é descobrir o impacto desta nova solução de referência, nada mais que o regime permanente gerado com o uso de dissipação artificial associada a discretização do termo transiente nas equações de conservação, na construção de condições de contorno globais. Uma técnica comumente usada para aglomerar pontos da malha na região de interesse e afastar contornos artificiais dela também costuma ser considerada uma condição de contorno global COLONIUS (2004). As Figuras 4.19 e 4.20 mostram o que ocorre com as ondas refletidas nas simulações mostradas nas Figuras 4.17 e 4.18, respectivamente, quando os pontos da malha na direção longitudinal progressivamente se afastam uns dos outros da entrada para a saída do domínio. Como era de se esperar, a onda refletida tem menor amplitude em todo o domínio devido ao efeito dissipativo que este tipo de malha causa. Contudo, o erro gerado inicialmente no contorno de saída é ainda maior. Isso ocorre porque a distância entre pontos consecutivos da malha nesta região é maior que no caso uniforme, causando um erro maior no

cálculo dos gradientes normais ao contorno de saída usados no LODI, tanto tradicional quanto modificado.

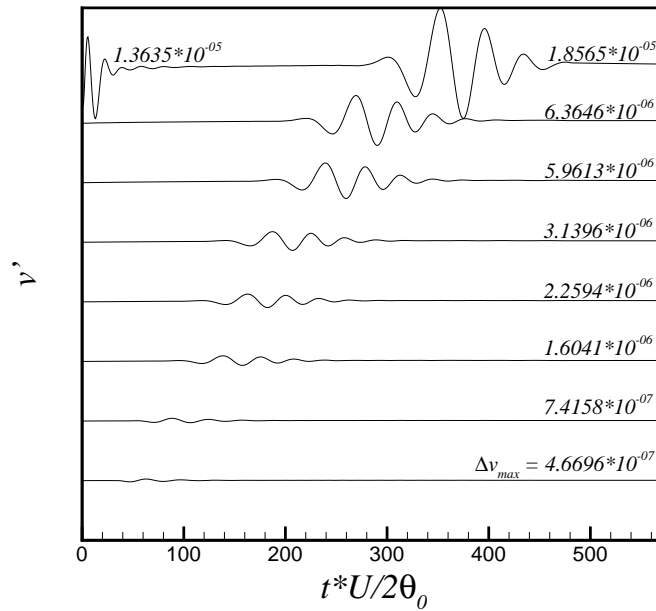


FIG. 4.19: Amplificação temporal para LODI modificado invíscido, malha não uniforme em ambas as direções e condição inicial em regime permanente

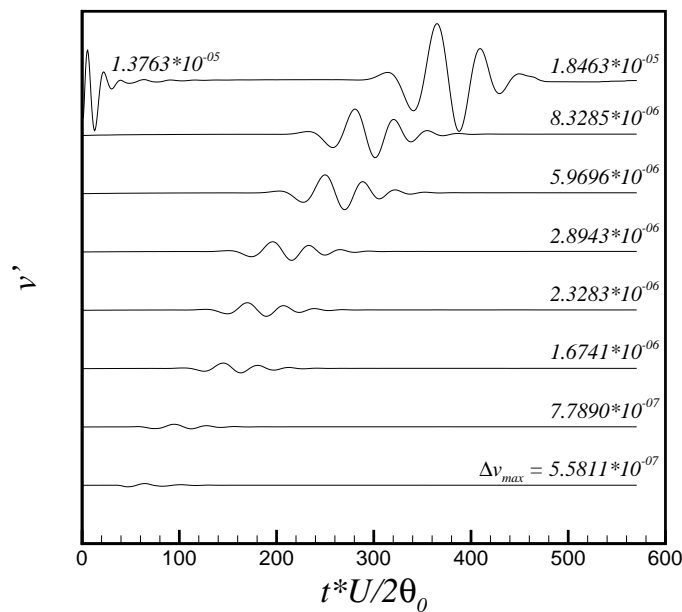


FIG. 4.20: Amplificação temporal para LODI modificado invíscida/viscoso, malha não uniforme em ambas as direções e condição inicial em regime permanente

Provavelmente a condição de contorno global mais eficiente, e por isso a mais usada, encontrada na literatura é chamada de região de absorção ou buffer-zone. Como esta técnica utiliza uma solução de referência para reduzir a amplitude de oscilações numéricas indesejadas antes que estas cheguem aos contornos artificiais, usar a condição de regime permanente como referência deve ter um impacto benéfico na simulação computacional. Apesar de ser a metodologia mais precisa para evitar reflexões indesejadas nos contornos, ela própria pode gerar ondas numéricas indesejadas. Este problema pode ser virtualmente eliminado aumentando o tamanho da região de absorção. Contudo, isto aumenta o custo computacional desta técnica devido ao tamanho excessivo do domínio simulado. Há também um custo computacional adicional indireto, devido a necessidade de simular longos períodos de tempo. Isto é feito para que transientes iniciais devido a possíveis reflexões no contorno sejam desprezados, aumentando a confiabilidade dos resultados. Apesar disto, seu uso junto com condições de contorno não-reflexivas permitiu o recente sucesso de simulações do ruído gerado por camadas de mistura em escoamentos compressíveis COLONIUS (1993); FREUND (1997, b,a); WEI.

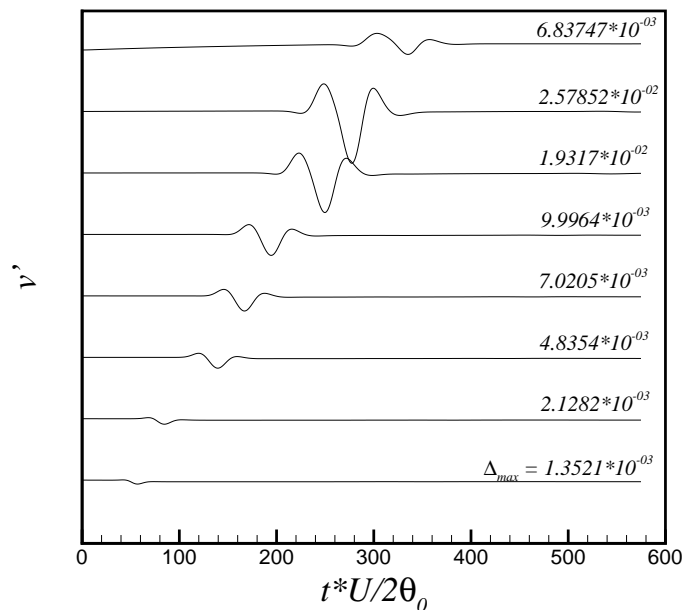


FIG. 4.21: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial tangente hiperbólica com constante  $\sigma = 0.1$

O primeiro teste utiliza uma região de absorção próximo ao contorno de saída. Apenas os resultados obtidos com a condição de contorno do tipo LODI modificado invícido/viscoso serão mostrados, uma vez que o outro LODI modificado leva a resultados semelhantes. As Figuras 4.21 e 4.22 contém a mesma simulação da Figura 4.15, porém com zonas de absorção com



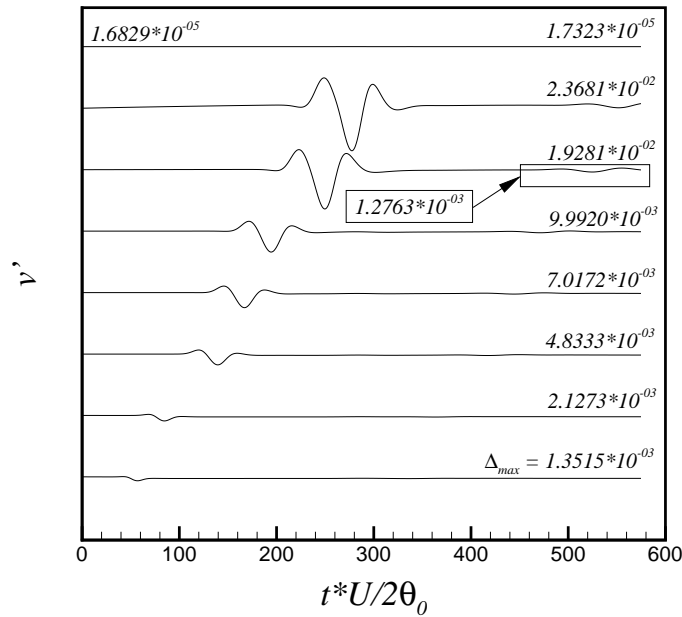


FIG. 4.22: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial tangente hiperbólica com constante  $\sigma = 1.0$

comprimentos diferentes. Elas mostram que a região de absorção realmente reduz a amplitude da onda antes de chegar ao contorno, porém não impede que uma segunda onda seja refletida de volta pelo contorno de saída. Como a simulação na Figura 4.15 não contém esta segunda onda, ela foi gerada nas Figuras 4.21 e 4.22 a partir do erro introduzido pela região de absorção. Comparando estas figuras entre si, podemos ver que a amplitude da segunda onda refletida aumenta quando a amplitude da região de absorção aumenta. Isso mostra que o ajuste destas condições de contorno globais não é trivial e requer alguns testes antes de ser usada adequadamente.

Já as Figuras 4.23 e 4.24 são equivalentes as Figuras 4.21 e 4.22, porém com a solução de regime permanente artificial como solução de referência para a região de absorção. Elas mostram um comportamento semelhante ao descrito no parágrafo anterior. A amplitude da primeira onda formada é significativamente menor. Contudo, não podemos tirar maiores conclusões da menor amplitude da segunda onda formada devido à região de absorção.

O segundo teste utiliza uma região de absorção próxima ao contorno de entrada. Novamente, apenas os resultados obtidos com a condição de contorno do tipo LODI modificado invíscido/viscoso serão mostrados, uma vez que o outro LODI modificado leva a resultados semelhantes. As Figuras 4.25 e 4.26 contém a mesma simulação da Figura 4.15, porém com zonas de absorção com comprimentos diferentes. Elas mostram apenas uma onda refletida, ao contrário dos resultados mostrados nas figuras 4.21 e 4.22. Além disso, as ondas refletidas tem

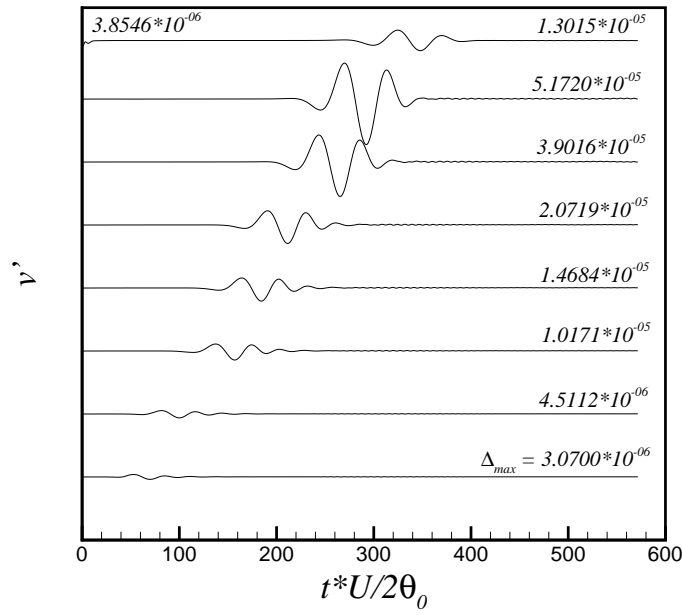


FIG. 4.23: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial de regime permanente com constante  $\sigma = 0.1$

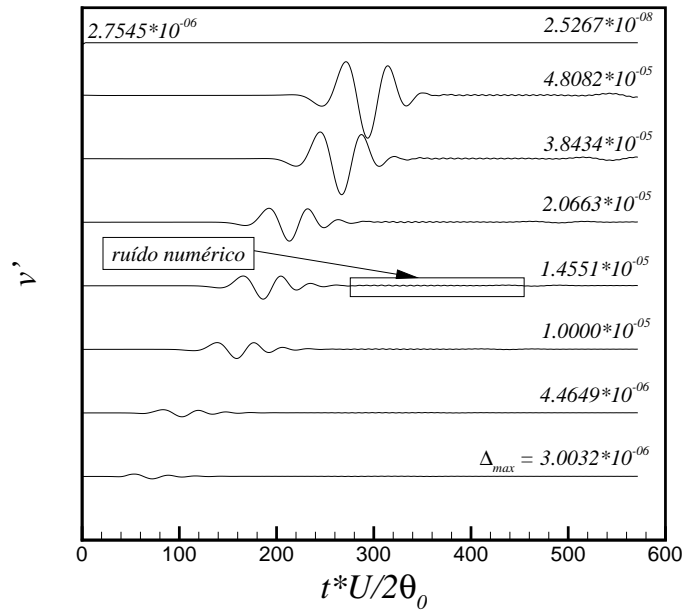


FIG. 4.24: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na saída, condição inicial de regime permanente com constante  $\sigma = 1.0$

amplitudes aproximadamente uma ordem de magnitude menores que as ondas apresentadas na Figura 4.15, independente da amplitude escolhida para a região de absorção. Esta é a razão

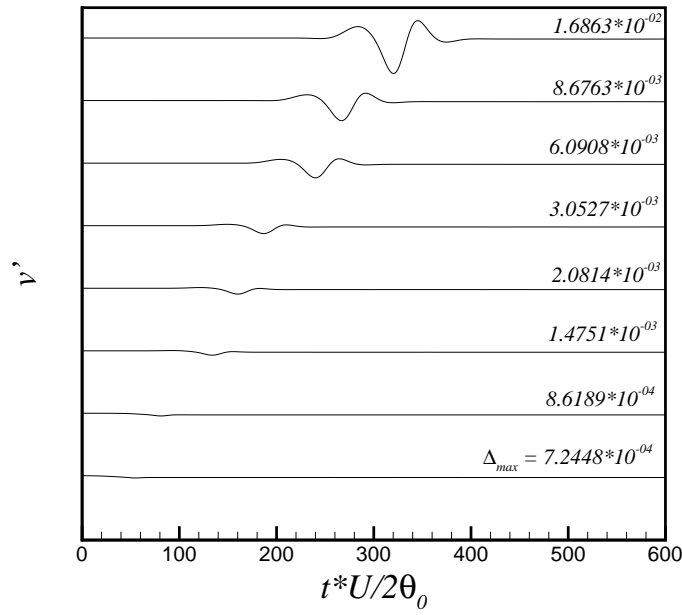


FIG. 4.25: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de tangente hiperbólico com constante  $\sigma = 0.1$

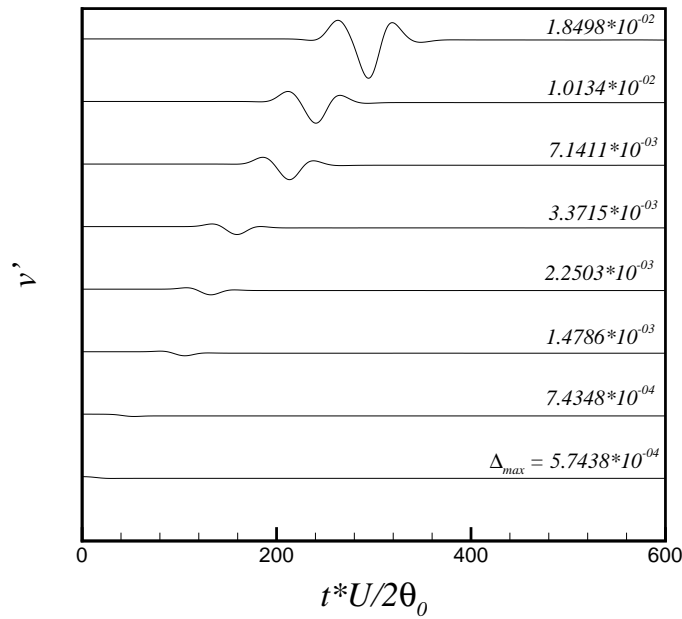


FIG. 4.26: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de tangente hiperbólico com constante  $\sigma = 1.0$

pela qual estas regiões são mais usadas próximo ao contorno de entrada, quando não são usadas próximo aos contornos de entrada e saída simultaneamente.

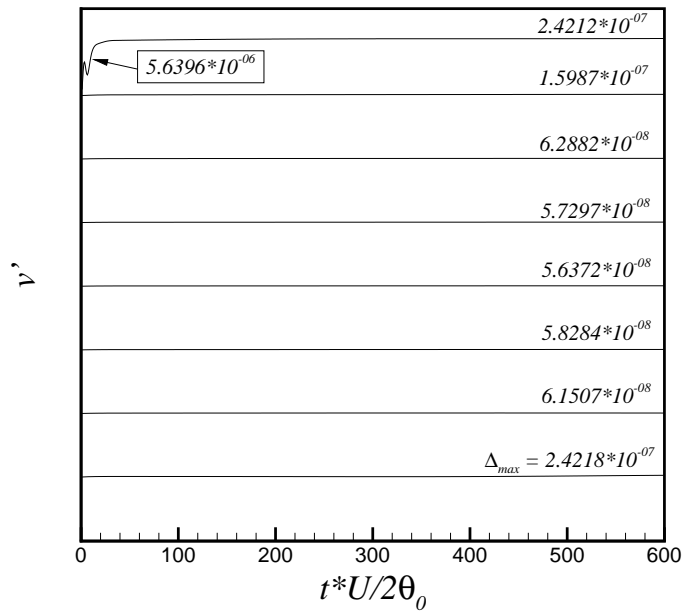


FIG. 4.27: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de regime permanente com constante  $\sigma = 0.1$

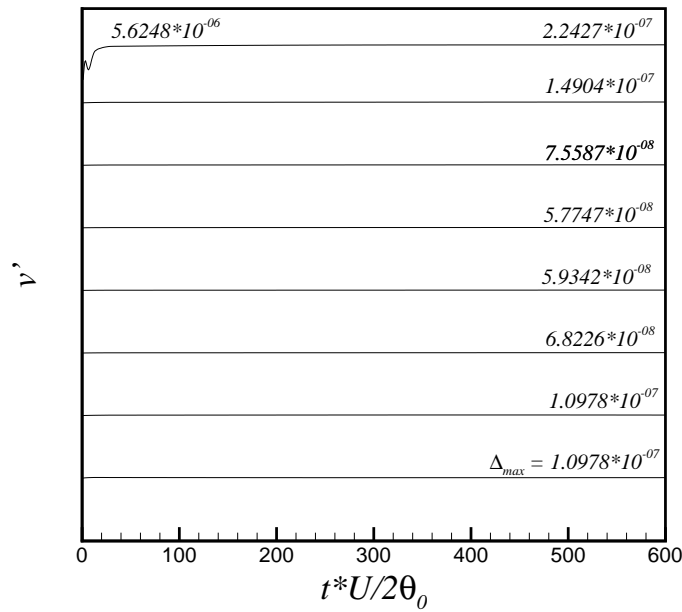


FIG. 4.28: Amplificação temporal para o Buffer-Zone na entrada, condição inicial de regime permanente com constante  $\sigma = 1.0$

Já as Figuras 4.27 e 4.28 são equivalentes as Figuras 4.25 e 4.26, porém com a solução de regime permanente artificial como solução de referência para a região de absorção. Apesar do

erro no contorno de saída ainda ser visto nas duas figuras, elas mostram claramente que nenhuma onda é refletida. Este resultado demonstra que o uso de soluções de regime permanente artificiais também são extremamente eficientes quando combinadas com condições de contorno globais. Esta descoberta é um novo e importante resultado, que não somente facilita o uso destas condições de contorno como também reduz o custo computacional associado ao seu uso.

## 5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste trabalho foi desenvolvido e validado um código computacional de 2º e 4º ordens de resolução para derivadas espaciais com malha uniforme e não uniforme, com condições de contorno baseadas nas relações características, zona de amortecimento e 2ª ordem para integração temporal, que permite analisar a evolução da perturbação em uma camada cisalhante.

Primeiramente estudou-se a simulação da camada de mistura plana e a instabilidade convectiva. Para determinar a validade dos resultados obtidos tanto para a discretização espacial centrada de 2º quanto de 4º ordem. Observou-se o comportamento das perturbações para os casos simulados. Após a validação das simulações foi investigado o impacto de uma condição de inicial baseado no perfil de tangente hiperbólico e outra condição inicial baseado em regime permanente artificial, obtido de um código com marcha temporal de Euler implícito, na simulação do escoamento. Observou-se redução das amplitudes das ondas causadas por erros numéricos com o uso da condição inicial em regime permanente. Com efeito, a medida que as amplitudes das ondas no escoamento foram reduzidas notou-se uma nova fonte de erro na simulação proveniente das condições de contorno. Para diminuir o erro implementamos uma condição de contorno global com o afastamento de malha na direção do escoamento e depois uma outra condição de contorno global conhecida como região de absorção, que necessita de uma condição de referência. Logo, fizemos o estudo de duas soluções de referência: tangente hiperbólico e regime permanente, observando os impactos causados por ambas as soluções de referência na simulação. Foi constatado que as perturbações numéricas provenientes do contorno podem ser reduzidas significativamente quando utilizamos as condições de regime permanente artificiais como solução de referência. Entretanto é necessário a simulação de novos casos para confirmar as hipóteses geradas com este estudo.

Recomendações e Trabalhos futuros:

- Simular o efeito combinado das condições inicial e de contorno local variando o Mach = 0.01, 0.1 e 0.3 e variando a razão de velocidades para cada caso. Teremos que usar a malha não-uniforme na direção longitudinal para mais evidências.
- Testar o efeito combinado das condições inicial e de contorno global (amortecimento) para os casos acima.
- Testar o amortecimento na entrada, saída e entrada/saída.

- Usar as soluções de regime permanente artificiais nas condições de contorno não-reflexivas.





## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVES, L. S. D. B. **Transverse Jet Shear-Layer Instabilities: Linear Stability Analysis and Numerical Simulations**, March 2006.
- BLASCHAK, J. G. K. G. A. **A comparative Study of Absorbing Boundary Conditions**. Journal of Computational Physics, 77:109–139, 1988.
- BODONY, D. J. **An Analysis of Sponge Zones for Computational Fluid Mechanics**. Journal of Computational Physics, 212(2):681–702, 2006.
- BRANCHER, P.; CHOMAZ, J. L. **Absolute and Convective Secondary Instabilities in Spatially Periodic Shear Flows**. Physical Review Letters, 78:658–661, 1997.
- BROWN, G. L.; ROSHKO, A. **On Density Effects and Large Structure in Turbulent Mixing Layers**. Journal of Fluid Mechanics, 64:775–816, 1974.
- BUELL, J. C.; HUERRE, P. **Inflow and outflow boundary conditions and global dynamics of spatial mixing layer**. Center for Turbulence Research.
- CHOI, Y. H.; MERKLE, C. L. **The Application of Preconditioning in Viscous Flows**. Journal of Computational Physics.
- CHOMAZ, J. M. **Global Instabilities in Spatially Developing Flows: Non-Normality and Nonlinearity**. Annual Review of Fluid Mechanics, 37:357–392, 2005.
- COLONIUS, T.; LELE, K. S. M. P. **Boundary Conditions for Direct Computation of Aerodynamic Sound Generation**. AIAA Journal, 31(9), 1993.
- COLONIUS, T. **Modeling Artificial Boundary Conditions for Compressible Flow**. Annual Reviews Fluid Mechanics, 36:315–345, 2004.
- CORCOS, G. M.; LIN, S. J. **The Mixing Layer: Deterministic Models of a Turbulent Flow. Part 2: The Origin of the Three-Dimensional Motion**. Journal of Fluid Mechanics, 139: 67–95, 1984.
- DOUGLAS, J.; GUNN, J. E. **A General formulation of the alternating Directions implicit Method - Part I - Parabolic and Hyperbolic Problems**. Numerische and Mathematik.
- DRIKAKIS, D.; GRINSTEIN, F. Y. D. **On the Computation of Instabilities and Symmetry-breaking in Fluid Mechanics**. Progress in Aerospace Sciences.
- FEDKIW, R. P.; MERRIMAN, B. O. S. **High Accuracy Numerical Methods for Thermally Perfect Gas Flow with Chemistry**. Journal of Computational Physics.
- FREUND, J. B. **Noise sources in a low-Reynolds-number turbulent jet at Mach 0.9**. Journal of Fluid Mechanics, a.
- FREUND, J. B. **Proposed Inflow/Outflow Boundary Condition for Direct Computation of Aerodynamic Sound**. AIAA Journal, 35(4), 1997.

- FREUND, J. B.; MOIN, P. **Jet mixing enhancement by high-amplitude fluidic actuation.** AIAA Journal, b.
- GASTER, M. **Growth of Disturbances in Both Space and Time.** Physics of Fluids, 11: 723–727, 1968.
- GILES, M. B. **Nonreflecting boundary conditions for euler equations calculations.** AIAA Journal, 28(12), 1990.
- GRINSTEIN, F. F.; DEVORE, C. R. **Global Instabilities in Countercurrent Jets.** Physics of Fluids, 14:1905–1100, 2002.
- GRINSTEIN, F. F.; ORAN, E. S. B. J. P. **Reinitiation and Feedback in Global Instabilities of Subsonic Spatially Developing Mixing Layers.** Physical Review Letters, 64:870–873, 1990.
- GRINSTEIN, F. F.; ORAN, E. S. B. J. P. **Pressure Field, Feedback and Global Instabilities of Subsonic Spatially.** Physics of Fluids, 3:2401–2409, 1991.
- GROSCH, C. E.; ORSZAG, S. A. **Numerical Solution of Problems in Unbounded Regions: Coordinate Transforms.** Journal of Computational Physics, 25:273–296, 1977.
- HO, C. M.; HUERRE, P. **Perturbed Free Shear Layers.** Annual Review of Fluid Mechanics, 16:365–424, 1984.
- HUERRE, P. ; MONKEWITZ, P. A. **Absolute and Convective Instabilities in Free Shear Layers.** Journal of Fluid Mechanics, 159:151–168, 1985.
- HUERRE, P. ; MONKEWITZ, P. A. **Local and Global Instabilities in Spatially Developing Flows.** Annual Review of Fluid Mechanics, 22:473–537, 1990.
- KELLY, R. E. **On the Stability of an Inviscid Shear Layer which is Periodic in Space and Time.** Journal of Fluid Mechanics, 27:657 – 689, 1967.
- KLAINERMAN, S.; MAJDA, A. **Compressible and Incompressible Fluids, Communications on Pure and Applied Mathematics.** Proceedings of the 12th ENCIT, 35:629–651, 1982.
- KUNDU, P. K.; COHEN, I. M. **Fluid Mechanics.** New York, 2002.
- LARDJANE, N.; FEDIOUN, I. G. I. **Accurate initial conditions for the direct numerical simulation of temporal compressible binary shear layers with high density ratio.** Computer & Fluids, 33:549–576, 2004.
- LESSHAFFT, L.; HUERRE, P. S. P. T. M. **Nonlinear Global Modes in Hot Jets.** Journal of Fluid Mechanics, 554:393–409, 2006.
- MCMULLAN, W. A.; GAO, S. C. C. M. **A Comparative Study of Inflow Conditions for Two- and Three-Dimensional Spatially Developing Mixing Layers Using Large Eddy Simulation.** International Journal for Numerical Methods in Fluids, 55:589–610, 2007.
- MERKLE, C. L.; SULLIVAN, J. Y. B. P. E. O. V. S. **Computation of Flows with Arbitrary Equations of State.** AIAA Journal, 36(4):515–521, 1998.

- MERKLE, C. L.; CHOI, Y. H. **Computation of Low Speed Compressible Flows with Time-Marching Methods.** International Journal for Numerical Methods in Engineering, 25:293–311, 1988.
- MICHALKE, A. **On the Inviscid Instability of the Hyperbolic-Tangent Velocity Profile.** Journal of Fluid Mechanics, 19:543 – 556, 1964.
- MICHALKE, A. **On Spatially Growing Disturbances in an Inviscid Shear Layer.** Journal of Fluid Mechanics, 23:521–544, 1965.
- MONKEWITZ, P. A.; BECHERT, D. W. B. B. L. B. **Self-Excited Oscillations and Mixing in a Heated Round Jet.** Journal of Fluid Mechanics, 213:611–639, 1990.
- MONKEWITZ, P. A.; SOHN, K. D. **Absolute Instability in Hot Jet.** AIAA Journal, 26: 911–916, 1988.
- MOSER, R. D.; ROGERS, R. D. **The Three-Dimensional Evolution of a Plane Mixing Layer: Pairing and Transition to Turbulence.** Journal of Fluid Mechanics, 247:275–320, 1993.
- PATNAIK, P. C.; SHERMAN, F. S. C. G. M. **A Numerical Simulation of Kelvin-Helmholtz Waves of Finite Amplitude.** Journal of Fluid Mechanics, 73:215–240, 1976.
- PIERREHUMBERT, R. T.; WIDNALL, S. E. **The Two- and Three-Dimensional Instabilities of a Spatially Periodic Shear Layer.** Journal of Fluid Mechanics, 114:59–82, 1982.
- POINSOT, K. J.; LELE, S. K. **Boundary Conditions of Direct Simulations of Compressible Viscous Flows.** Journal of Computational Physics, 101:104–129, 1992.
- SCHLICHTING, H. **Boundary-Layer Theory.** New York, 1986.
- SCHOPPA, W.; HUSSAIN, F. . M. R. W. **A New Mechanism of Small-Scale Transition in a Plane Mixing Layer: Core Dynamics of spanwise Vortices.** Journal of Fluid Mechanics, 298:23–80, 1995.
- SESTERHENN, J.; MULLER, B. T. H. **On the Cancellation Problem in Calculating Compressible Low Mach Number Flows.** Journal of Computational Physics, 151:597–615, 1999a.
- SESTERHENN, J., M. B. T. H. **On the Cancellation Problem in Calculating Compressible Low Mach Number Flows.** Journal of Computational Physics, 151:597–615, 1999b.
- SHUEN, J. S., C. K. H. C. Y. H. **A Coupled implicit Method for Non-Equilibrium Flows at All Speeds.** Journal of Computational Physics, a.
- SHUEN, J. S.; CHEN, K. H. C. Y. H. **A Time-Accurate Algorithm for Chemical Non-Equilibrium Viscous Flows at All Speeds.** Journal of Computational Physics, b.
- STRYKOWSKI, P. J.; NICCUM, D. L. **The Stability of Countercurrent Mixing Layers in Circular Jets.** Journal of Fluid Mechanics, 227:309–343, 1991.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A. P. R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer.** Taylor & Francis.

- TEIXEIRA, R. DE S.; ALVES, L. S. D. B. K. A. R. K. R. E. **On the Solution of the Compressible Flow Equations at Small Mach Numbers.** Proceedings of the 12th ENCIT, 6(4743), 2008.
- THOMPSON, K. W. **Time Dependent Boundary Conditions for Hiperbolic Systems.** Journal of Computational Physics, 68:1–24, 1987a.
- THOMPSON, K. W. **Time Dependent Boundary Conditions for Hiperbolic Systems II.** Journal of Computational Physics, 89:439–461, 1987b.
- TURKEL, E. **Preconditioned Methods for Solving the Incompressible and Low Speed Compressible Equations.** Journal of Computational Physics, 72:277–298, 1987.
- TURKEL, E. **Preconditioning Techniques in Computational Fluid Dynamics.** Annual Review of Fluid Mechanics, 31:385–416, 1999.
- WEI, M. J.; FREUND, J. B. **A noise-controlled free shear flow.** Journal of Fluid Mechanics.
- WINANT, C. D.; BROWAND, F. K. **Vortex Pairing: The Mechanism of Turbulent Mixing-Layer Growth at Moderate Reynolds Number.** Journal of Fluid Mechanics, 63:237–255, 1974.