

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**ANÁLISE NUMÉRICA DA TRANSIÇÃO À TURBULÊNCIA EM
ESCOAMENTOS DE JATOS CIRCULARES LIVRES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Uberlândia por:

ANA MARTA DE SOUZA

como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutora
em Engenharia Mecânica

Aprovada por:

Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto - (UFU) - Orientador
Dr. Francisco José de Souza - (UFU)
Prof. Dr. Edson Luiz Zapparoli - (CTA-ITA)
Prof. Dr. Márcio Teixeira de Mendonça - (CTA-ITA)
Prof. Dr. Carlos Roberto Ribeiro - (UFU)
Dr^a. Ana Lúcia Fernandes de Lima e Silva - (UFU)

Uberlândia, 8 de Abril de 2005

FICHA CATALOGRÁFICA

Elaborada pelo Sistema de Bibliotecas da UFU / Setor de Catalogação e Classificação

S729a Souza, Ana Marta de, 1976-
Análise numérica da transição à turbulência em escoamentos de jatos circulares livres / Ana Marta de Souza. - Uberlândia, 2006.
183f. : il.
Orientador: Aristeu da Silveira Neto.
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.
Inclui bibliografia.
1. Mecânica dos fluidos - Teses. 2. Turbulência - Teses. I. Silveira Neto, Aristeu da. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

CDU: 532

“É o conhecimento, e não outra coisa, o que move o homem a realizar as finalidades superiores de sua vida, e é também ele quem o leva pelos caminhos do mundo, buscando sempre a si mesmo”.

González Pecotche

Dedico esta tese à minha mãe, Maria G.
Oliveira, e aos meus irmãos, Francisco
José de Souza e Paulo José de Souza.

Agradecimentos

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq, agradeço pelo suporte financeiro à realização deste trabalho.

Ao Prof. Aristeu da Silveira Neto, agradeço pela orientação e incentivos apresentados durante a realização do trabalho, bem como pela amizade cultivada.

Ao meu irmão, amigo e co-orientador deste trabalho, Francisco José de Souza, agradeço pela valiosa participação, conhecimentos transmitidos e pelo exemplo de competência e dedicação.

À minha mãe, Maria, e ao meu irmão Paulo, agradeço pelas inúmeras contribuições, incentivos, carinho e apoio, fundamentais ao meu crescimento pessoal e profissional.

Aos colegas do LTCM, agradeço pelos agradáveis momentos de descontração, conhecimentos compartilhados e amizade dedicada.

Sumário

Lista de Símbolos _____	iii
Resumo _____	vii
Abstract _____	viii
Capítulo I: Introdução _____	1
Capítulo II: Revisão Bibliográfica _____	5
Capítulo III: Modelo Matemático e Metodologia Numérica _____	31
3.1 Código <i>LAYER2</i> _____	31
3.1.1 Modelagem matemática _____	31
3.1.2 Procedimento de filtragem em Simulação de Grandes Escalas _____	33
3.1.3 Esquema numérico _____	38
3.2 Código <i>CIL3D</i> _____	40
3.2.1 Solução da equação de Poisson via FFT _____	43
3.2.2 Discretização espacial _____	46
3.2.3 Geração da malha _____	47
3.2.4 Equações governantes em coordenadas cilíndricas _____	48
3.2.5 Implementação do modelo de turbulência sub-malha _____	49
3.3 Método Pseudo-Espectral _____	49
3.3.1 Introdução _____	49
3.3.2 Transformada de Fourier _____	51
3.3.3 Equações de Navier-Stokes no espaço espectral _____	53
3.3.4 Tratamento do termo não-linear _____	59
3.3.5 Algoritmos de evolução temporal _____	61
3.3.6 Algoritmo do código <i>SPECTRAL</i> _____	62
Capítulo IV: Resultados Preliminares _____	65
4.1 Simulações utilizando o código <i>LAYER2</i> _____	65
4.1.1 Condições de contorno _____	66
4.1.2 Simulação <i>1LAYER2</i> _____	68
4.1.3 Simulações <i>2LAYER2</i> , <i>3LAYER2</i> , <i>4LAYER2</i> _____	89
4.2 Simulações utilizando o código <i>CIL3D</i> _____	100
4.2.1 Condições de contorno _____	101
4.2.2 Simulações <i>1CIL3D</i> e <i>2CIL3D</i> _____	102
Capítulo V: Resultados e Discussões _____	113

5.1 Validação do código <i>SPECTRAL</i> _____	113
5.1.1 Equação de Burgers _____	113
5.1.2 Vórtices de Green-Taylor _____	115
5.2 Análise do Jato Circular Tridimensional em decaimento temporal _____	117
5.2.1 Caso 1: Jato Natural _____	123
5.2.2 Caso 2: Jato Forçado 1 _____	133
5.2.3 Caso 3: Jato Forçado 2 _____	143
5.2.4 Caso 4: Jato Forçado 3 _____	148
5.2.5 Caso 5: Jato Bifurcado _____	160
5.2.6 Comparação entre os Jatos Natural e Bifurcado _____	165
5.2.7 Analogias entre as evoluções temporal e espacial _____	166
Capítulo VI: Conclusões _____	170
Capítulo VII: Referências Bibliográficas _____	173

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

$\vec{a}$	vetor qualquer a ser projetado no plano π
$\vec{a}_\pi$	vetor $\vec{a}$ projetado no plano π
$\tilde{b}$	escala de comprimento definida para análise temporal, m
C_s	constante de Smagorinsky
C_v	capacidade térmica a volume constante, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
C_p	capacidade térmica a pressão constante, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
D	diâmetro do jato, m
f	função no espaço físico
$\hat{f}$	transformada da Função f no espaço de Fourier
$\vec{F}$	vetor de fluxo, $\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-3}$
g	derivada da função f no espaço físico
$\hat{g}$	derivada da função f no espaço de Fourier, m^{-1}
H	medida de dimensão do domínio computacional, m
$\hat{H}$	termo não-linear no espaço de Fourier, $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$
$\vec{k}$	vetor número de onda, m^{-1}
k_q	número de onda numa direção específica, m^{-1}
L	medida de dimensão do domínio computacional, m
L_h	operador diferença-finita
p	pressão, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
$\hat{p}$	transformada da pressão no espaço de Fourier, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
Pr	número de Prandtl
P_{ij}	operador de projeção em um plano ortogonal a $\vec{k}$
Q	vetor fluxo de calor sub-malha, $\text{kg} \cdot \text{s}^{-3}$
q_i	fluxo de calor, $\text{kg} \cdot \text{s}^{-3}$
r	coordenada radial, m
R	raio do jato, m
S_{ij}	parte simétrica do tensor taxa de deformação, s^{-1}
t	tempo, s

T	temperatura, K
u	velocidade radial ou transversal, m.s^{-1}
$\bar{u}$	velocidade radial ou transversal média, m.s^{-1}
U_r	perturbação na velocidade radial, m.s^{-1}
v	velocidade tangencial ou transversal, m.s^{-1}
$\bar{v}$	velocidade tangencial ou transversal média, m.s^{-1}
w	velocidade axial, m.s^{-1}
$\bar{w}$	velocidade axial média, m.s^{-1}
w_0	velocidade axial inicial em $t=0,0\text{s}$, m.s^{-1}
$\tilde{w}$	escala de velocidade definida para análise temporal, m.s^{-1}
W	velocidade axial de entrada, m.s^{-1}
$W_{\text{máx}}$	velocidade máxima na linha central, m.s^{-1}
Re	número de Reynolds
z	coordenada axial, m
x	coordenada transversal, m
y	coordenada transversal, m

Letras Gregas

ϕ	variável genérica
η	escala adimensional de comprimento
ε	energia cinética turbulenta, $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$
μ	viscosidade cinemática, $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
λ	coeficiente de transferência de calor, $\text{kg.m}^2.\text{K.s}^{-3}$
ρ	densidade, kg.m^{-3}
Δ	filtro espacial (igual ao tamanho da célula), m
τ	tensor de Reynolds sub-malha generalizado, $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$
τ_{ij}	tensor de Reynolds sub-malha, $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$
θ	coordenada azimutal, rad
ϖ	macro-pressão, $\text{kg.m}^2.\text{s}^{-2}$
ϑ	macro temperatura, K
ζ	coeficiente de Runge Kutta de 3ª ordem
γ	coeficiente de Runge Kutta de 3ª ordem
δ_{ij}	delta de Kronecker

δ	metade da espessura da camada cisalhante, m
σ_{ij}	componentes do tensor cisalhante, $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$
$\ \vec{\omega}\ $	módulo da vorticidade, s^{-1}
Ω_{ij}	parte anti-simétrica do tensor rotação, s^{-1}

Subscritos

π	plano π
ef	efetivo
mol	molecular
t	turbulento
e	face leste
w	face oeste
s	face sul
n	face norte
E	nó leste
W	nó oeste
S	nó sul
N	nó norte
P	nó central
u	velocidade radial ou transversal
v	velocidade tangencial ou transversal
w	velocidade axial

Sobrescritos

n	iteração no tempo atual
$*$	campo estimado
$'$	valor RMS (root mean square)

Souza, A. M., 2005, “Análise Numérica da Transição à Turbulência em Escoamentos de Jatos Circulares Livres”. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.

RESUMO

O interesse em escoamentos do tipo jato é justificável por sua considerável importância tecnológica em aplicações industriais, sistemas de propulsão de aviões e aeronaves e processos de geração de ruídos. Em todas estas aplicações o controle do jato é determinante para a otimização dos processos ou mesmo para solução de problemas específicos.

Diante desta motivação, o objetivo do presente trabalho consiste na análise física de jatos circulares livres através de simulações tridimensionais. A este objetivo somam-se análises da influência de diferentes tipos de perturbação sobre a formação e evolução das estruturas turbilhonares.

Na primeira etapa de desenvolvimento do presente trabalho, as simulações foram realizadas utilizando dois códigos (*LAYER2* e *CIL3D*), os quais empregam Simulação de Grandes Escalas (SGE) e esquemas numéricos de 2ª ordem. Os resultados obtidos não permitiram atingir os objetivos propostos. Entretanto, foi possível concluir que esquemas numéricos de baixa ordem não são adequados para simular com detalhe o escoamento de jatos, o que também pode ser verificado em outros trabalhos.

Resultados bem-sucedidos do ponto de vista da análise física foram obtidos através do código *SPECTRAL*, com o qual se realizou Simulação Numérica Direta empregando um método pseudo-espectral. Os resultados destas simulações permitiram evidenciar estruturas e fenômenos típicos dos escoamentos estudados, bem como compreender melhor os mecanismos de geração dos mesmos. A possibilidade do controle do jato através da imposição de diferentes perturbações às condições iniciais pôde também ser constatada. Os espectros de energia permitiram verificar a proximidade da região inercial do jato à inclinação de $-5/3$ e a região de decaimento do jato.

Palavras-chave: jatos circulares, análise da transição à turbulência, método pseudo-espectral.

Souza, A. M., 2005, "Numerical Simulation of the Transition in Free Round Jet Flows." Doctorate Thesis, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG.

ABSTRACT

The interest in jet flows is justified by their remarkable technological importance in industrial applications, aircraft propulsion systems and noise generation processes. In all these applications, jet control is the key for the optimization of processes or even the solution of specific problems.

With this motivation in mind, the present work consists in the physical analysis of free round jets by means of three-dimensional simulations. Besides this goal, analyses of the influence of different types of perturbations on the formation and evolution of turbulent structures are sought.

In the first stage of this work, simulations were run using two codes (*LAYER2* e *CIL3D*), which employ Large-Eddy Simulation and 2nd order numerical schemes. The results obtained did not allow the aims proposed to be reached. However, it was possible to conclude that low-order numerical schemes are not suitable for detailed simulations of jet flows. This has been verified in other works as well.

From the viewpoint of physical analysis, successful results were obtained by using the code *SPECTRAL*, with which Direct Numerical Simulations were run using a pseudo-spectral method. The results of these simulations allowed to put in evidence structures and phenomena typical of the flows investigated, as well as to better understand the respective generation mechanisms. The possibility of controlling the jet through the imposition of different perturbations to the initial conditions could also be confirmed. The proximity of the inertial region to the inclination of $-5/3$ and the decay region were verified in the energy spectra.

Keywords: round jets, analyze of turbulent transition, pseudo-spectral methods.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Os jatos cisalhantes livres são originados pela expansão em bocais ou em orifícios. Estes escoamentos são caracterizados pela presença das denominadas estruturas coerentes, as quais apresentam um importante grau de organização local, o que promove anisotropia e não-homogeneidade do escoamento.

A transição à turbulência em jatos caracteriza-se pela formação de instabilidades primárias do tipo Kelvin-Helmholtz, as quais induzem a formação de filamentos secundários, que interagem entre si, formando instabilidades transversais que se amplificam e degeneram em turbulência tridimensional. A Figura 1.1 apresenta uma visualização experimental realizada a partir de um plano de iluminação laser, onde se pode observar a instabilidade de Kelvin-Helmholtz (indicada pela seta), o processo de transição e a região de desenvolvimento da turbulência tridimensional de um jato circular.

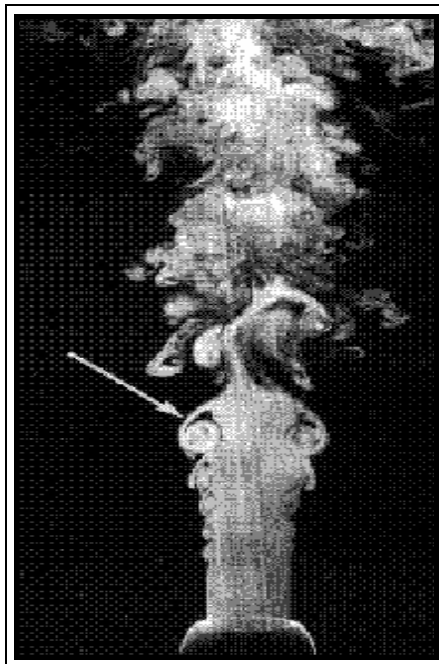


Figura 1.1 - Esquema ilustrativo do processo de transição de um jato redondo (figura de J.L. Balint, de Lesier (1997), cortesia de J.P. Schon e “La Recherche”).

A turbulência em jatos tem sido bastante estudada numérica e experimentalmente por pesquisadores, almejando adquirir maiores conhecimentos sobre os fenômenos físicos envolvidos. A melhor compreensão da formação e evolução das estruturas do escoamento permite um controle mais efetivo sobre jatos para os diferentes interesses industriais, bem como contribui para o refinamento de teorias e modelos existentes para descrição de escoamentos turbulentos.

O interesse dos estudiosos pelos escoamentos do tipo jato é facilmente justificado pela sua considerável importância tecnológica. As aplicações industriais envolvem processos de mistura de componentes, transferência de calor, lubrificação e degelo, injeção de combustível em câmaras de combustão, sistemas de propulsão de aviões e aeronaves. A otimização destes processos pode ser obtida através do controle do jato. Este controle pode ser atingido através da manipulação das já mencionadas “estruturas coerentes”, as quais são responsáveis por influenciar fortemente a dinâmica do jato, especialmente na região de transição próxima ao bocal.

A aplicação do controle do jato na redução de ruídos é particularmente relevante, pois é reconhecido que os pares de vórtices constituem importante fonte de geração de ruídos. A dinâmica do jato pode ser obtida através do controle passivo ou ativo do jato. O controle passivo refere-se ao controle da evolução espacial através do uso de formas particulares (em geral, não circulares) do bocal de entrada (Gutmark e Gristein, 1999). O controle ativo é obtido através de dispositivos consumidores de energia os quais criam uma perturbação determinística na entrada do jato. Em termos práticos, isto pode ser obtido através do uso de autofalantes (Crow and Champagne, 1971; Zaman e Hussein, 1980) ou atuadores flap (Zaman et al, 1994; Suzuki et al., 2000).

Além das aplicações mencionadas, o jato turbulento é um escoamento canônico simples bastante importante do ponto de vista físico. O estudo deste tipo de escoamento serve como modelo simplificado, fornecendo análises importantes para utilização em escoamentos complexos, comumente encontrados na prática.

Assim, a inquestionável importância da compreensão das estruturas coerentes para refinamento de teorias e modelos já existentes, melhoria dos sistemas de engenharia e desenvolvimento de novos métodos e dispositivos para controle da dinâmica do escoamento motivaram a realização do presente estudo. Embora muitos estudos sobre este tema sejam encontrados na literatura, muitos se restringem à comparação de comportamentos médios. Alguns apresentam as estruturas coerentes típicas sob determinadas condições. No entanto, notou-se, dentre os trabalhos encontrados, certa carência no que diz respeito à compreensão das estruturas turbilhonares, da influência das condições iniciais e de diferentes tipos de

perturbação sobre a formação e evolução de jatos. A realização de um estudo mais minucioso neste sentido contribuiria de forma relevante para a otimização do controle de jatos.

Diante do contexto apresentado, o objetivo do presente trabalho foi focado na análise física de jatos, através da realização de simulações numéricas tridimensionais. Incluem neste objetivo, análises da influência de diferentes tipos de perturbação sobre a formação e evolução das estruturas turbilhonares, bem como avaliação da importância da resolução espacial e precisão do esquema numérico utilizado na simulação. Objetivou-se ainda a prática e o uso de procedimentos de experimentação numérica. Nestes procedimentos incluem-se a escolha da metodologia numérica apropriada, a definição dos objetivos almejados, a amostragem das informações e o tratamento estatístico dos dados amostrados.

As primeiras simulações foram realizadas utilizando dois códigos computacionais previamente desenvolvidos (Chernousov, 2001 e Souza, 2003). Tais códigos empregam Simulação de Grandes Escalas, esquema numérico de segunda ordem no espaço e no tempo e modelo de Smagorinsky. Os resultados obtidos não permitiram atingir os objetivos propostos, no entanto, permitiram conclusões relevantes que orientaram a seqüência do trabalho. Um novo código computacional de alta precisão numérica, utilizando um método pseudo-espectral, foi desenvolvido com o intuito de atingir os objetivos almejados.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A turbulência é um regime de operação de qualquer sistema dinâmico que se caracteriza por um número de graus de liberdade suficientemente elevado (Silveira-Neto, 2002). Embora esta afirmação expresse sinteticamente uma idéia geral sobre tal fenômeno, entretanto, o citado autor acredita que no estado atual do conhecimento, qualquer tipo de definição seria incompleto e pouco representativo. Apesar da existência de um importante conhecimento sobre a turbulência, muito ainda resta a ser compreendido, devido ao seu alto grau de complexidade e a sua presença em uma grande variedade de fenômenos naturais.

A turbulência é um fenômeno tridimensional e contínuo, apresentando difícil predição determinística, alta difusibilidade e dissipação. A transição à turbulência, identificada por Reynolds (1883), tem origem no aparecimento de instabilidades num escoamento inicialmente estável (denominado regime laminar). Os efeitos advectivos são responsáveis pela amplificação de perturbações e geração de instabilidades, as quais se amplificam e interagem entre si, atingindo o regime turbulento. A forma física em que o processo de geração de instabilidades ocorre depende do tipo de escoamento em questão, conduzindo a uma possível classificação dos escoamentos transicionais.

Os escoamentos cisalhantes livres destacam-se entre os escoamentos transicionais e caracterizam-se pela ausência de paredes ou obstáculos, embora tenham, freqüentemente, suas origens ligadas à passagem sobre corpos submersos (esteiras), à expansão em bocais ou orifícios (jatos) ou à união de correntes de diferentes velocidades (camadas de mistura temporais e espaciais). A Figura 2.1 ilustra os tipos de escoamentos cisalhantes livres cujo processo de transição é similarmente caracterizado pela presença das denominadas “estruturas coerentes”, as quais apresentam importante grau de organização local, promovendo anisotropia e inhomogeneidade do escoamento. A Figura 2.1 (a) ilustra uma camada de mistura em desenvolvimento espacial; a Fig. 2.1 (b) mostra uma esteira e a Fig. 2.1 (c) mostra um jato circular livre.

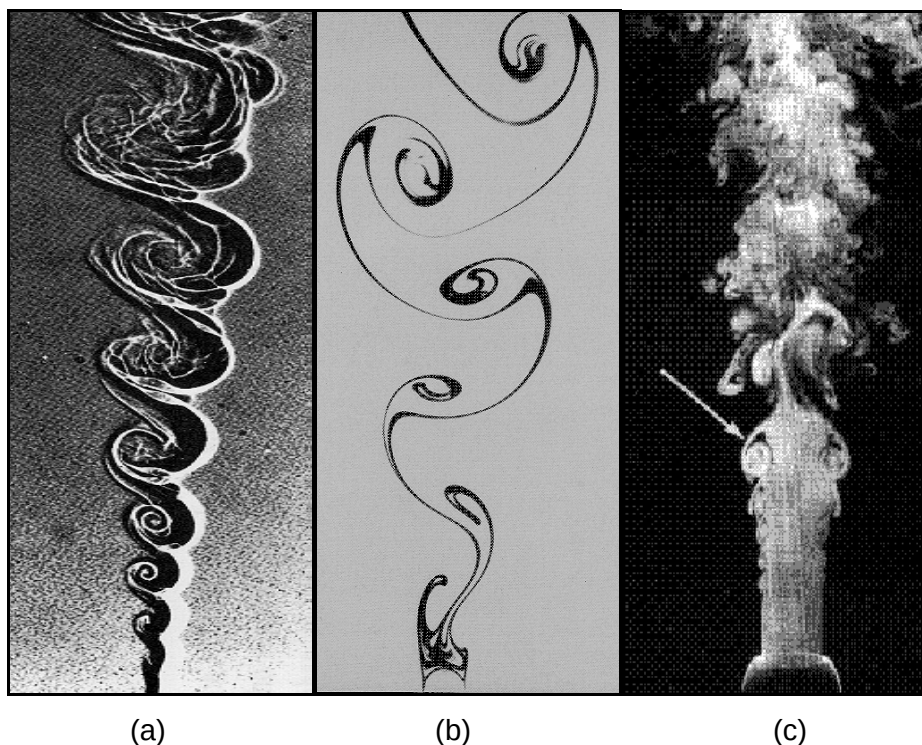
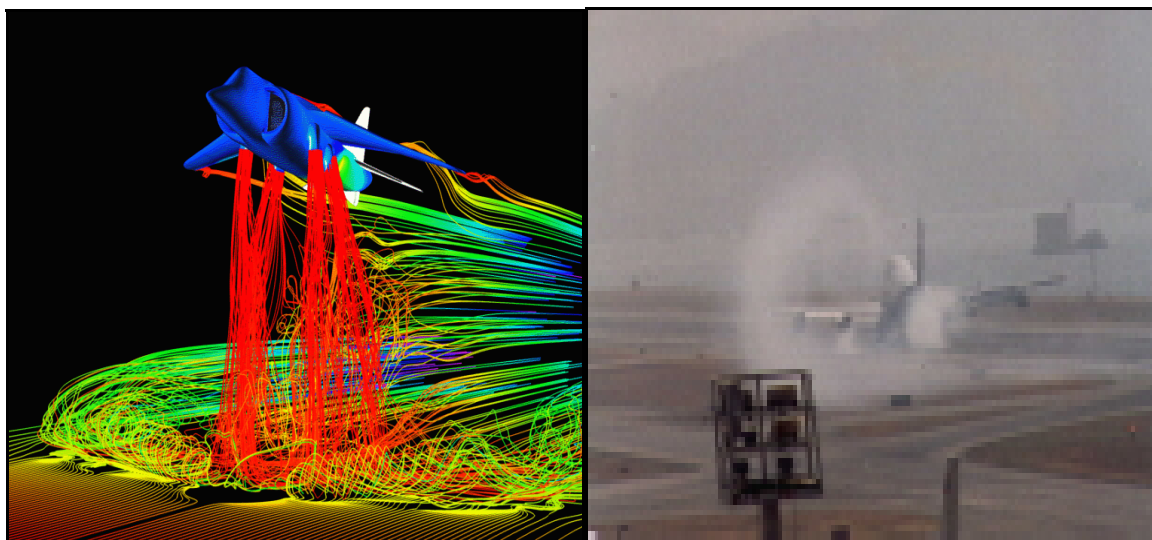


Figura 2.1 - Escoamentos cisalhantes livres: (a) camada de mistura espacial (Brown e Roshko, 1974); (b) esteira de Von Karman (Van Dyke, 1982); (c) jato circular (figura de J.L. Balint, de Lesieur (1997), cortesia de J.P. Schon e “La Recherche”).

As instabilidades que se desenvolvem nos escoamentos descritos anteriormente apresentam natureza cisalhante. Pela teoria da estabilidade linear, elas podem se desenvolver mesmo na situação hipotética de escoamentos invíscidos. O critério da inflexionalidade do campo de velocidade foi estabelecido por Rayleigh como requisito necessário para geração de instabilidades em escoamentos cisalhantes livres. Nos escoamentos cujas instabilidades desenvolvem-se sob a influência de uma parede, a transição ocorre indiferente à presença de inflexionalidade, apresentando instabilidades de outra natureza. Assim, a transição pode ter outras origens, nas quais a formação de instabilidades pode ser ocasionada por efeitos viscosos, sob efeitos de rotação ou de convecção térmica.

Estes escoamentos (cisalhantes, parietais, convecção térmica e sob rotação), quando combinados, geram uma classe especial denominada de escoamentos complexos. Esse tipo de escoamento é muito comum em situações práticas. A Figura 2.2 apresenta alguns exemplos desse tipo de escoamento.



(a)

(b)

Figura 2.2 - Escoamentos complexos: (a) escoamento gerado pelas turbinas de um avião militar; (b) escoamento gerado nas vizinhanças de um avião comercial.

Modelos que tentam prever escoamentos turbulentos complexos precisam ser avaliados usando medidas em escoamentos básicos antes de serem aplicados a escoamentos desconhecidos (Panchapakesan e Lumley, 1993). Portanto, torna-se importante o conhecimento sobre escoamentos mais simples para posterior compreensão de escoamentos complexos.

Existem vários estudos numéricos e experimentais, na literatura, sobre os escoamentos cisalhantes do tipo jato. Além dos jatos serem importantes em muitas aplicações industriais de combustão, propulsão, mistura e aeroacústica, segundo Boersma (1998), eles são também importantes do ponto de vista físico, pois representam um protótipo de escoamento turbulento livre. Segundo Panchapakesan and Lumley (1993) o jato circular turbulento é um escoamento simples não-homogêneo que serve como referência simplificada para escoamentos complexos.

As grandes estruturas do escoamento têm recebido muita atenção dos pesquisadores, uma vez que influenciam fortemente a dinâmica dos jatos turbulentos livres. O melhor entendimento das estruturas que compõem este tipo de escoamento e de como elas afetam seu comportamento torna possível um controle mais efetivo do jato (taxa de espalhamento, nível de turbulência, eficiência de mistura) para diversas aplicações em engenharia, e faz-se necessário para o refinamento de teorias e modelos existentes para descrição de escoamentos turbulentos.

Os jatos podem ser classificados segundo a geometria que os formam, podendo ser um jato plano ou retangular se gerado por uma cavidade retangular ou um jato redondo ou circular

se gerado por um orifício circular. Em ambos a transição à turbulência é caracterizada pela formação de instabilidades primárias do tipo Kelvin-Helmholtz, as quais induzem a formação de filamentos secundários, que interagem entre si, formando oscilações transversais que se amplificam e atingem a turbulência completamente desenvolvida.

A Figura 2.3 ilustra o processo de transição em diferentes fases: (1) bocal convergente; (2) núcleo de escoamento potencial; (3) primeiras instabilidades; (4) toróide de alta concentração de vorticidade e instabilidades de Kelvin-Helmholtz; (5) geração de estruturas turbilhonares toroidais tridimensionais e emparelhamento; (6) oscilações tridimensionais sobre as estruturas toroidais; (7) turbulência tridimensional desenvolvida; (8) reorganização da turbulência em *estruturas coerentes* compostas de múltiplas escalas.

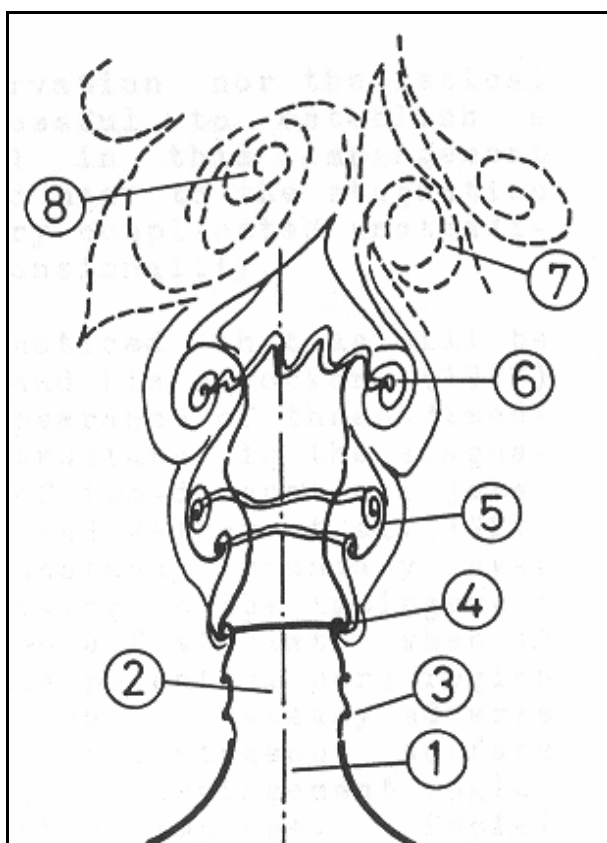


Figura 2.3 - Esquema ilustrativo do processo de transição de um jato redondo.

A Figura 2.4 apresenta uma visualização experimental realizada a partir de um plano de iluminação laser, onde se pode observar o processo de transição e a região de turbulência tridimensional desenvolvida de um jato circular. As primeiras instabilidades de Kelvin-Helmholtz são seguidas por emparelhamentos e uma região fortemente tridimensional e turbulenta. No corte horizontal da Fig 2.4. (b), efetuado transversalmente ao jato vertical da Fig. 2.4 (a), observa-se a presença de estruturas turbilhonares na forma de cogumelos, formadas por

turbilhões longitudinais contrarotativos, os quais se enlaçam sobre os turbilhões primários consecutivos. Através do corte, é possível observar que os toróides visualizados no jato vertical são nitidamente oscilantes e tridimensionais.

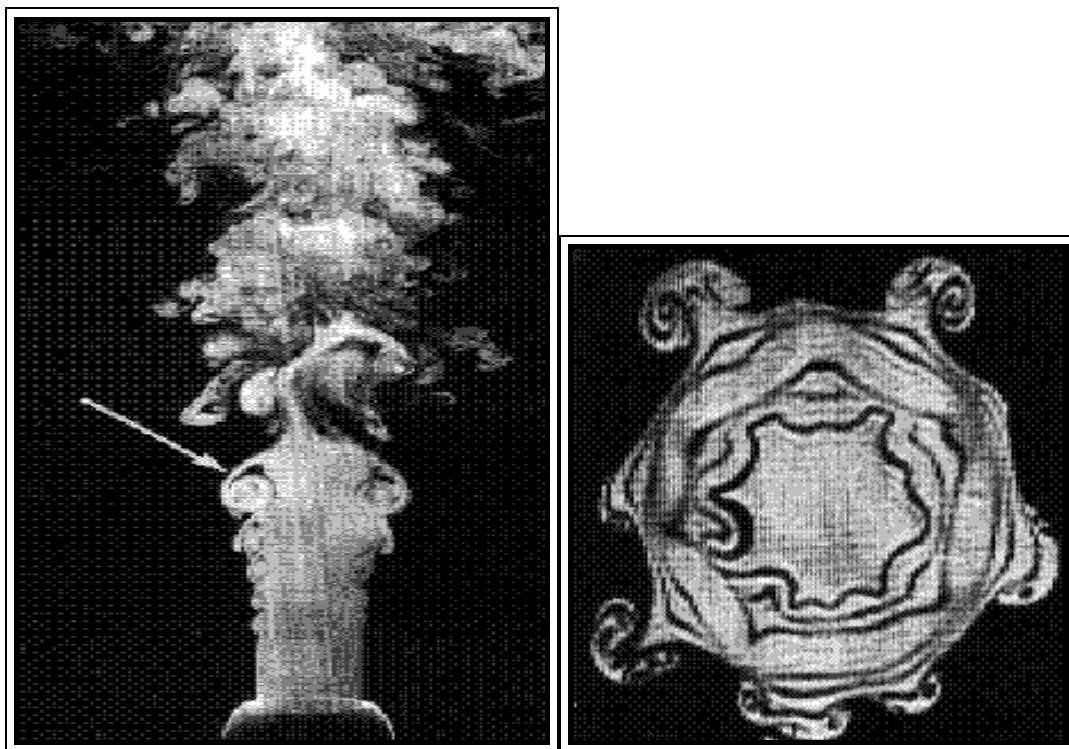


Figura 2.4 - Esquema ilustrativo do processo de transição de um jato redondo (figura de J.L. Balint, de Lesieur (1997), cortesia de J.P. Schon e “La Recherche”).

Um estudo experimental realizado pelo CNES (Centre National d’Études Spatiales-França) como parte do programa ASSM (Aerodynamics of Segmented Solid Motors) apresenta a formação de estruturas a partir da visualização de fumaça e medidas de velocimetria imagem-partícula (PIV), onde é possível observar a formação dos vórtices contra-rotativos. A Fig. 2.5 apresenta a visualização desses vórtices.

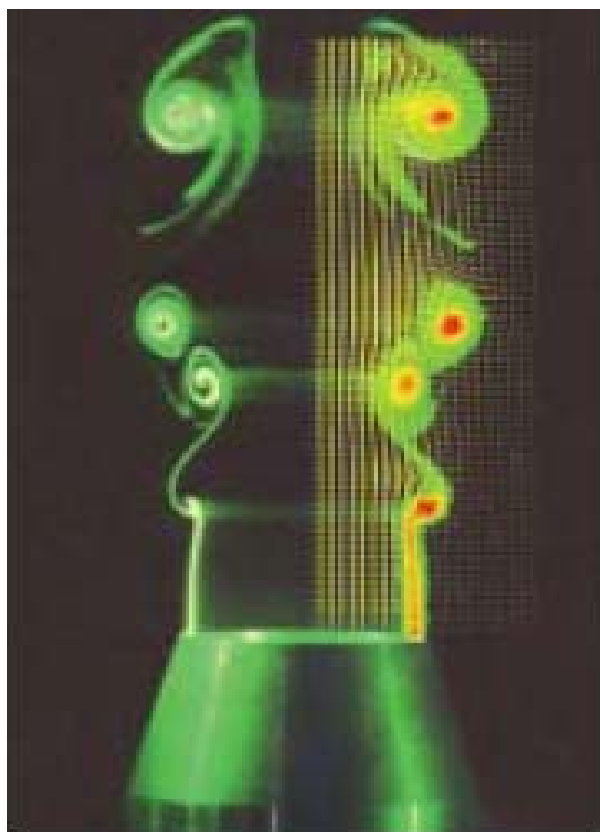


Figura 2.5 - Visualização de fumaça e velocimetria por imagem de partículas de pares de vórtices (Aerodynamics of Segmented Solid Motors - Centre National d'Études Spatiales-França)

É importante ressaltar que a imposição de determinado tipo de perturbações ao escoamento é capaz de originar diferentes estruturas turbilhonares. Os resultados experimentais de Lee e Reynolds (1985) a um número de Reynolds 4300 apresentam o fenômeno de bifurcação e formação de anéis de vórtice, os quais podem ser visualizados na Fig. 2.6.



Figura 2.6 - “Blooming jets”: Resultados experimentais de Lee e Reynolds (1985), Koumoutsakos et al. (1998).

A transição de um jato laminar para um jato turbulento depende tanto de sua geometria quanto das condições do escoamento à jusante e acontece, geralmente, próximo ao bocal que lhe dá origem. Desta forma, os experimentos são dificilmente comparáveis entre si e com simulações, exceto do ponto de vista estatístico e topológico.

Embora os escoamentos turbulentos sejam caracterizados como randômicos por alguns estudiosos, devido a sua difícil predição determinística, a prática tem demonstrado que as já citadas estruturas coerentes podem ser previstas. O uso de ferramentas estatísticas permite analisar os escoamentos e definir um comportamento médio, através de campos característicos. A Figura 2.7 mostra o comportamento temporal médio do escoamento de um jato ar-ar, apresentando as formas características dos perfis de velocidade. Inicialmente o jato se distribui como um perfil aproximadamente chato com velocidade de saída do bocal (U_{exit}). O escoamento potencial desaparece rapidamente, a uma distância de cerca de um diâmetro da saída do bocal, onde o perfil de velocidade perde sua forma plana. Na região da linha central, o escoamento começa a se desenvolver dentro de uma forma gaussiana característica. Finalmente, a cerca de 20 diâmetros da saída do bocal, o perfil de velocidade atinge e mantém a forma auto-similar:

$$\frac{\bar{u}}{U_{\max}} = f\left(\frac{y}{b}\right) \quad \text{ou} \quad f\left(\frac{r}{b}\right) \quad (2.1)$$

dependendo se o jato é plano ou axisimétrico. A região desenvolvida ou auto-similar parece crescer a partir de uma “origem aparente”, como esquematizado na Fig. 2.7. Deve ser notado que o perfil de velocidade tem o mesmo momento mas não tem o mesmo fluxo mássico. O jato é realimentado a partir da região ambiente e o escoamento mássico do jato aumenta no sentido do escoamento.

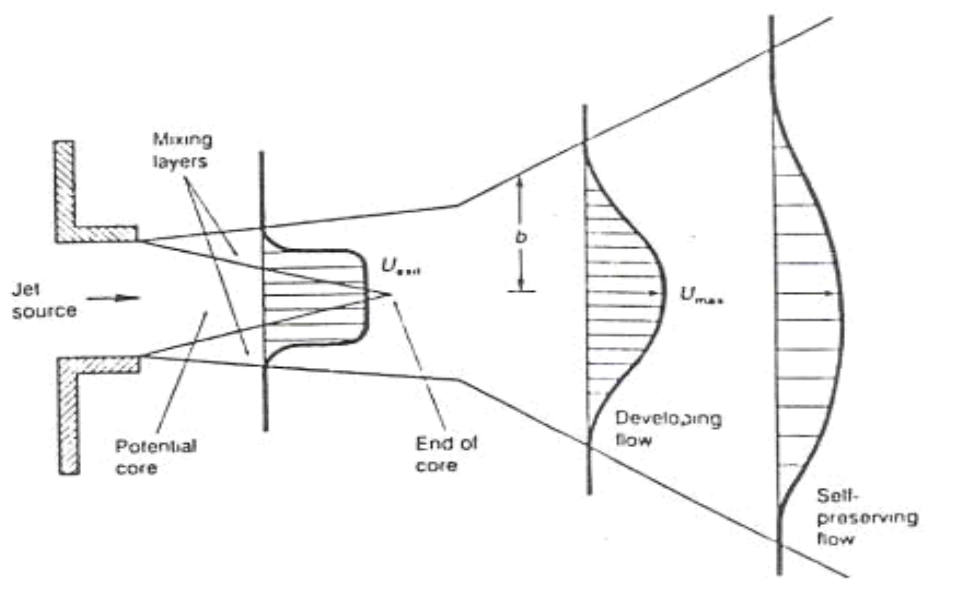


Figura 2.7 - Detalhes do desenvolvimento de um jato espacial circular (White, 1991).

As primeiras investigações sobre o jato incluem o trabalho de Corrsin (1943), Corrsin e Uberoi (1950, 1951), Reichardt (1941), Hinze e Van der Hegge Zijnen (1949) e Corrsin e Kistler (1955). As falhas das intensidades turbulentas em atingir a autopreservação nestes primeiros trabalhos motivaram os esforços de Wygnanski e Fiedler (1969). O trabalho destes autores constituiu um estudo completo da região de auto-similaridade do jato circular e tornou-se a referência para a descrição quantitativa para perfis de velocidade média, tensões turbulentas e coeficientes de correlação tripla.

Embora medidas experimentais de velocidade média e intensidade turbulenta em jatos redondos com perfil plano na saída do bocal tenham sido relatadas por muitos autores, estas apresentam diferenças significativas entre os diferentes estudos. Diante deste contexto, Panchapakesan e Lumley (1993) apresentaram medições feitas em jatos circulares de ar, de diâmetro 0,61cm a um número de Reynolds de 11000 e compararam seus resultados primários aos resultados de Wygnanski e Fiedler (1969), Rodi (1975) e Capp et al. (1990). Os desvios encontrados com relação às medidas de velocidade axial média de Wygnanski e Fiedler (1969) foram explicados pelos efeitos de confinamento do jato, em concordância com as justificativas também apresentadas por Capp et al. (1983). A componente axial atingiu sua auto-similaridade em aproximadamente 70 vezes o diâmetro, enquanto que a componente radial pareceu aumentar muito lentamente. As variações dos perfis de velocidade axial média na direção radial foram próximas entre si apresentando apenas algumas divergências próximas à saída do jato, conforme apresenta a Figura 2.8.

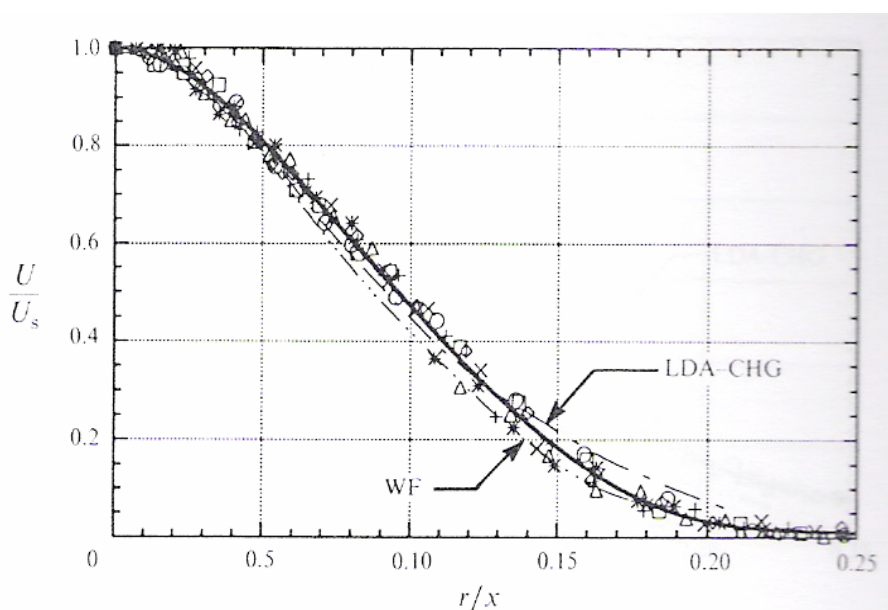


Figura 2.8 - Perfil de velocidade média axial do jato, + , $s/d=60$; *, 70; o, 80; Δ , 90; x, 100; $\square$, 110; $\diamond$, 120; —, ajuste spline mínimos quadrados aos dados de entrada; WF, Wygnanski e Fielder 1969; LDA-CHG, medidas LDA de Capp et al. 1990 (Panchapakesan e Lumley, 1993).

Há uma diferença sistemática entre as medidas de Panchapakesan e Lumley (1993) e as demais medidas de outros autores; e as medidas dos outros autores diferem entre si, mesmo sendo feitas pelas mesmas técnicas. Panchapakesan e Lumley (1993) procuraram explicar a divergência entre suas medidas e medidas LDA (laser-Doppler) com medidas a fio-quente em

regiões próximas ao eixo do jato, onde a reversão de fluxo não é um problema. Recaíram em evidências de que a sonda movia-se rápido o suficiente para causar recirculações. Todos estes jatos tiveram perfis planos na saída do bocal com baixas intensidades turbulentas. O número de Reynolds utilizado foi da ordem de grandeza inferior aos dos demais estudos, o que foi considerada uma possível explicação. Wygnanski (Wygnanski e Fiedler, 1969) sugeriu que um jato axisimétrico está sujeito a uma instabilidade (provavelmente helicoidal) a qual está presente em maior ou menor extensão em várias realizações experimentais.

Hussein et al. (1994) estudaram o escoamento turbulento de um jato redondo com perfil plano em um amplo compartimento a um número de Reynolds 95500. Os momentos de velocidade até terceira ordem foram obtidos via anemometria a laser e a fio quente. As medidas satisfazem as equações de momento diferencial e integral para um jato redondo em um meio infinito. Os resultados diferem substancialmente dos reportados por investigadores em trabalhos anteriores, na forma e nível dos perfis. Estas diferenças são atribuídas aos pequenos compartimentos usados em trabalhos prévios e como decorrentes da recirculação dentro dos mesmos.

Os resultados experimentais de velocidade média, tensores de Reynolds, intensidade turbulenta dos trabalhos experimentais citados são geralmente utilizados para comparação aos resultados de simulações. Os estudos numéricos geralmente englobam, além dessas análises quantitativas, análises qualitativas, envolvendo visualização da formação e evolução das estruturas que compõem o escoamento.

A existência de estruturas coerentes na turbulência começou a ser constatada a partir de 1930. Brown (1935) evidenciou a existência de vórtices ordenados produzidos por jatos sob forças acústicas. Outros trabalhos comprovando a formação destas estruturas em diferentes tipos de escoamentos turbulentos foram surgindo, desde então, modificando de forma importante a compreensão da física da turbulência. Tais estruturas são extremamente importantes para muitas aplicações práticas, exercendo uma influência direta sobre transporte de fluido, misturas, produção de turbulência e geração de ruídos. Em determinados problemas elas são desejáveis, como por exemplo, para promover o aumento da eficiência em processos de mistura e em transferência de calor e massa. Em outras situações elas são indesejáveis, por promover aumentos significativos no coeficiente de arrasto, assim como o aumento da potência de bombeamento em sistemas hidráulicos.

Os sucessivos avanços obtidos através de CFD têm sido possíveis graças ao desenvolvimento de modelos e métodos mais eficientes e máquinas com alto potencial de cálculo e de armazenamento de informações. No entanto, o desenvolvimento de metodologias numéricas e de modelagem da turbulência ainda se faz necessário, visando a melhor compreensão dos fenômenos físicos envolvidos.

Os modelos desenvolvidos e utilizados mais recentemente para simular os efeitos físicos ligados à turbulência são classificados em modelos clássicos (modelos a zero, a uma, a duas e a seis equações de transporte adicionais) e os modelos contemporâneos, nos quais se utilizam modelagens submalha, necessárias para a prática de Simulação de Grandes Escalas (SGE), a qual tem se tornado uma das mais promissoras ferramentas de análise.

A Simulação Numérica Direta (SND) resolve diretamente as equações de Navier-Stokes, possibilitando a resolução de todo o espectro de energia do escoamento, desde que seja utilizada uma malha de discretização suficientemente fina. Esta metodologia tem aplicação limitada a baixos números de Reynolds, por questões de capacidade computacional, já que o grande número de graus de liberdade de um escoamento turbulento implicaria em um elevado número de equações lineares discretizadas a serem resolvidas. Assim, a maioria dos problemas de interesse prático não pode ser solucionada através de SND. Diante desta realidade, o meteorologista Smagorinsky (1963), baseado nas idéias de decomposição de escalas de Reynolds (1894), propôs a separação das altas e baixas frequências dos escoamentos turbulentos, através de um processo de filtragem das equações. As primeiras aplicações da metodologia de Simulação de Grandes Escalas (SGE) se iniciaram com Deardorff (1970). Desde então, esta metodologia tem evoluído constantemente. Os avanços contínuos em hardware computacional tem tornado a Simulação de Grandes Escalas (SGE) muito mais prática como ferramenta de pesquisa para estudos de escoamentos turbulentos a moderados números de Reynolds, assim como para aplicações industriais.

A Simulação de Grandes Escalas (SGE) consiste, basicamente, em simular diretamente as estruturas tridimensionais e dependentes do tempo até determinada escala e modelar as menores escalas (escalas submalha) através de um modelo sub-malha adequado (Jacobsen, 1997). Embora também exija malhas relativamente finas, a SGE possibilita resolver escoamentos a números de Reynolds elevados e a obtenção de informações físicas detalhadas, e não apenas de informações estatísticas como as metodologias clássicas.

Simulação Numérica Direta (SND) e Simulação de Grandes Escalas (SGE) têm sido muito aplicadas na análise numérica dos escoamentos cisalhantes livres, fornecendo informações importantes sobre os mesmos. No entanto, existem algumas dificuldades na simulação deste tipo de escoamento. Há necessidade de um superdimensionamento do domínio, de forma a evitar que as fronteiras laterais afetem os resultados. Recirculações de fluido podem surgir devido à evacuação de vórtices na saída do domínio, resultando na excitação do escoamento.

A presença de amplas estruturas em um jato plano foi observada por Oler e Goldschmidt (1986), Thomas e Goldschmidt (1986), [Mumford \(1982\)](#) e Antonia et al. (1983) e confirmadas por Lo (1994) ao aplicar Simulação de Grandes Escalas para estudo de um jato

plano turbulento. [Sakakibara et al. \(2000\)](#) estudaram um jato incidente e acrescentaram informações importantes sobre o desenvolvimento de instabilidades primárias de Kelvin-Helmholtz e de filamentos longitudinais que os conectam no escoamento de um jato plano.

Lo et al. (2000) realizaram um interessante trabalho de análise numérica de um jato plano incompressível em desenvolvimento espacial utilizando Simulação de Grandes Escalas. As animações computacionais permitiram o acompanhamento da evolução das estruturas vorticais, auxiliando na compreensão da topologia tridimensional complexa deste tipo de escoamento. A simulação evidenciou a formação dos vórtices na direção do escoamento e turbilhões na direção da expansão do jato sob condições não forçadas. No regime de transição, modos “flapping”, sugerindo formação de anéis, foram observados e o escoamento foi dominado por turbilhões, inicialmente bidimensionais, na direção de expansão do jato. A formação de estruturas tridimensionais foi caracterizada pelo desenvolvimento de ondulações dos turbilhões na direção de expansão. Estes turbilhões eram semelhantes às estruturas vorticais vistas em esteiras e camadas de mistura, mas a orientação era contrária devido à tensão oposta. Nesse trabalho, os autores também identificaram e apresentaram os vórtices em forma de ferradura na região de transição à turbulência, enfatizando que as extremidades destas estruturas pareciam ser conectadas por uma fina camada de vorticidade e limitadas por um plano central. Eles ressaltaram ainda, que os turbilhões transversais e vórtices longitudinais pareciam interagir entre si, levando ao aparecimento de arranjos complexos de vórtices e subsequente transição para turbulência. Algumas das visualizações desse trabalho são apresentadas nas Figs. 2.9 e 2.10.

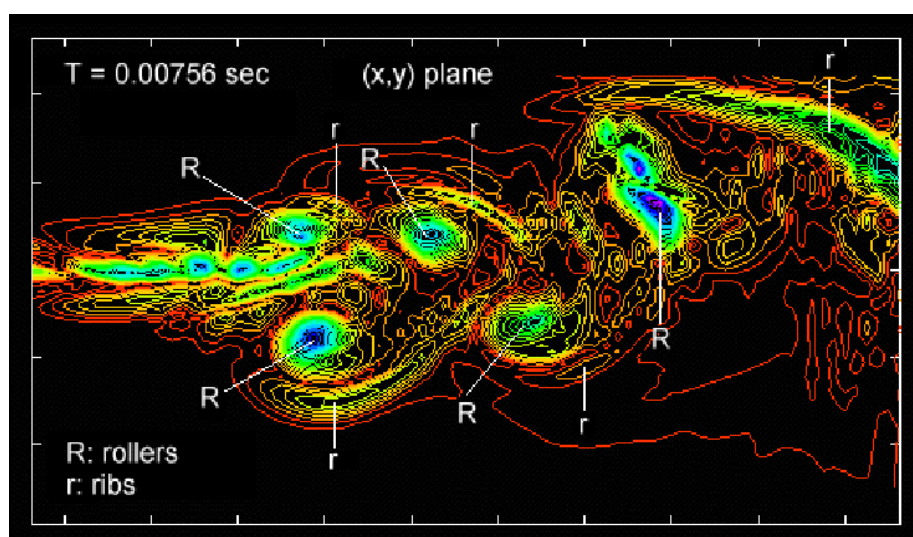


Figura 2.9 – Isovalores da vorticidade no plano (x, y) a $t = 0,00756$ s. Localizações marcadas “R” e “r” são estruturas turbilhonares na direção de expansão e filamentos longitudinais respectivamente. (Lo et al., 2000).

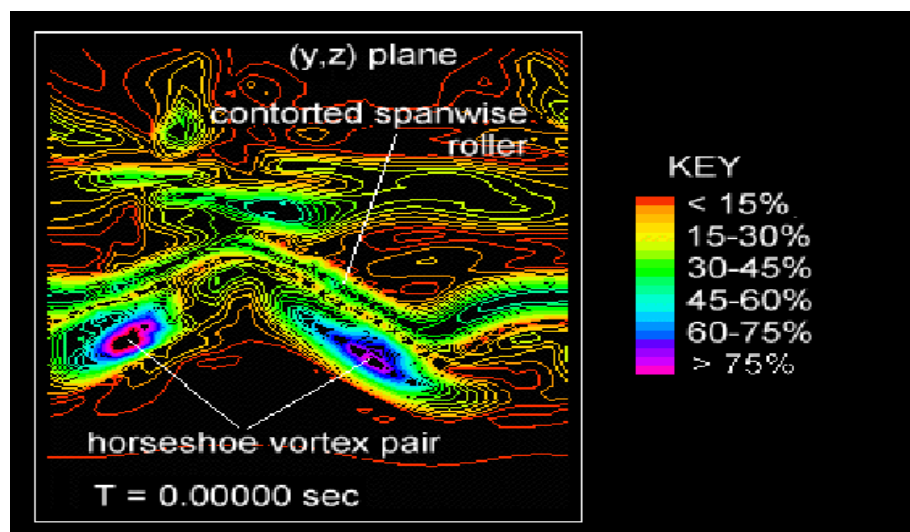


Figura 2.10 - Par de vórtices tipo “ferradura” no plano (y, z) a $x/l = 66,6$ (vista frontal) (Lo et al. (2000)).

Os jatos circulares, assim como os jatos planos, também têm sido objeto de extensas pesquisas em trabalhos experimentais e teóricos por Abramovich (1954). Os jatos circulares apresentam numerosas aplicações em engenharia e a presença de estruturas coerentes complexas neste tipo de escoamentos tem sido evidenciada em recentes trabalhos. O surgimento de vórtices longitudinais e de jatos laterais, os quais disputam um papel proeminente no desenvolvimento do escoamento, tem sido mencionado por Lasheras et al. (1991), Monkewitz e Pfizenmaier (1991), Liepmann e Gharib (1992).

O jato axisimétrico representa um caso-teste na pesquisa sobre a física de escoamentos turbulentos. Embora métodos experimentais sejam complicados devido a altas intensidades turbulentas locais deste escoamento, o estudo teórico é simplificado já que o jato é axisimétrico em média e, ao mesmo tempo, um escoamento cisalhante livre no qual aproximações do tipo camada-limite podem ser aplicadas. A importância do jato axisimétrico para a compreensão da turbulência é evidenciada pelo volume de publicações envolvendo dados experimentais, análise matemática e modelagem computacional, tais como Monin e Yaglom (1971), Hinze (1975), Townsend (1976), Rodi (1975) e List (1979).

Melander et al. (1991) mostraram, através de SND, um desenvolvimento temporal de um jato redondo, cujas condições de periodicidade criaram um desenvolvimento anormal de vórtices longitudinais em um modo azimutal de quarta ordem. Villermaux e Hopfinger (1994), em seu trabalho experimental sobre jatos confinados, sustentaram a idéia de que jatos redondos podem ser considerados livres quando se mantêm os limites laterais do domínio

distantes mais de cinco diâmetros. Estes resultados foram confirmados recentemente por experimentos de Djeridante (1996).

Escoamentos do tipo jato também têm sido amplamente estudados por pesquisadores em modelagem da turbulência. O estudo de Tollmien (1926) baseado no comprimento de mistura de Prandtl foi o primeiro de muitos tratamentos teóricos do jato circular. As dificuldades na predição deste escoamento com constantes determinadas de outros modelos têm se mostrado um dos problemas mais desafiadores enfrentados por especialistas em turbulência nas últimas três décadas. Estes esforços foram revisados em detalhe por Hinze (1975), Rodi (1975) e Taulbee (1988).

Bardina et al. (1997) apresenta resultados de vários modelos de turbulência clássicos para jatos redondos. Conforme mostra a Fig. 2.11, nenhum dos modelos utilizados reproduz bem a taxa de espalhamento deste escoamento. Para o jato plano, entretanto, os resultados dos modelos normalmente são satisfatórios e este efeito é conhecido como “round jet anomaly” (Wilcox, 1998).

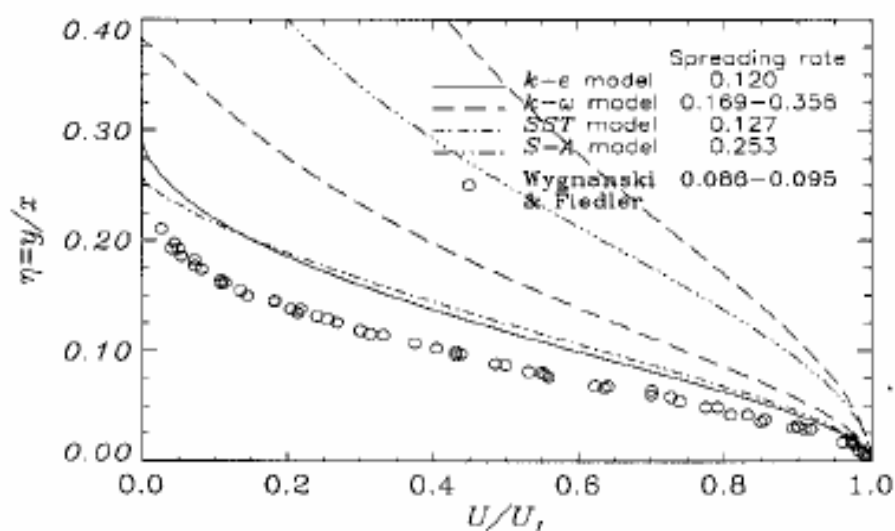


Figura 2.11 - Comparação dos Perfis de Velocidade para escoamento do jato circular. (Bardina et al., 1997).

Questões relacionadas à validade de dados do jato determinadas pelas equações de movimento foram primeiramente levantadas no Laboratório de Pesquisa em Turbulência de SUNY/Buffalo no final da década de 70. Baker (1980), ao investigar a evolução de um jato turbulento axisimétrico quente em pluma turbulenta usando métodos numéricos, descobriu que os dados de Wygnanski e Fiedler (1969) não satisfaziam a restrição da equação de movimento axial integrada. Seif (1981) em um estudo numérico subsequente usando os modelos das

tensões de Reynolds e $k-\varepsilon$, também verificou problemas com aqueles dados. Estas dificuldades motivaram o estudo experimental de Capp (1983), que utilizou anemometria a laser para investigar esta restrição e esclarecer a fonte da discrepância entre as simulações e os dados de Wygnanski e Fiedler. Estas medidas mostraram que o erro estava relacionado ao aparato experimental e que poderia haver diferenças significativas entre um jato em um ambiente confinado ou semiconfinado e um jato em um ambiente infinito, por causa da recirculação provocada pelas paredes. Todos estes resultados foram discutidos em detalhe por Capp e George (1982), George et al. (1982, 1988) e George (1990).

Têm sido também realizadas várias reavaliações da teoria sobre jatos. Schneider (1985) analisou todo o campo com uma abordagem de múltiplas escalas e foi capaz de mostrar que o fluxo integrado de momento em cada seção reta do jato axisimétrico permanecia constante até primeira ordem e igual à taxa do momento adicionado à fonte. Este efeito é bastante diferente do jato plano, no qual as condições de contorno na vizinhança da fonte modificam significativamente o momento integrado de seu valor-fonte. Em um estudo complementar, George et al. (1982) mostraram que a equação integrada de momento é constante até 2ª ordem no valor-fonte. Esta restrição imposta pela integração das equações de momento constitui um critério importante para validação de experimentos.

A possibilidade de soluções auto-preservativas para as equações axisimétricas do jato foi reconhecida por Tollmien (1926) e outros. Em síntese, soluções para as equações médias são da forma:

$$U = U_s(x) f(\eta), \quad (2.2)$$

$$-\overline{uv} = R_g(x) g(\eta) \quad (2.3)$$

onde $\eta = r/\delta(x)$ e o sistema de coordenadas é mostrado na Fig. 2.12. Supondo-se que o escoamento possa ser “escalonado” por um comprimento e velocidade, pode-se mostrar que a auto-preservação é possível somente se $d\delta/dx$ (onde δ é escala de comprimento transversal) é uma constante, supostamente universal. Estas suposições podem ser justificadas com base em argumentos físicos e dimensionais somente ao se supor que a fonte é apenas um ponto de momento (George, 1990, Monin e Yaglom, 1971). Tem sido amplamente aceito que todos os jatos atingem assintoticamente o mesmo estado auto-preservativo, independentemente dos detalhes de sua origem (Towsend, 1976).

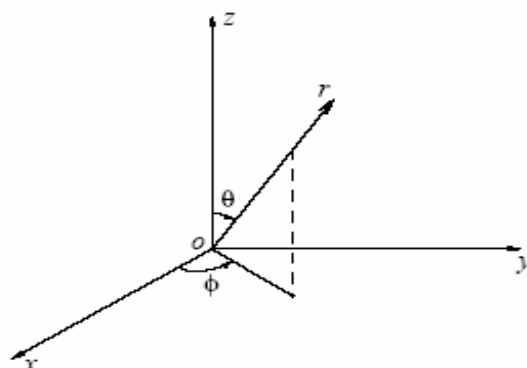


Figura 2.12 - Esquema de Coordenadas para solução autopreservativa de Tollmien (1926).

George (1990) descobriu um inconveniente na teoria original de similaridade que implicitamente supunha que o estado auto-preservativo era independente dos detalhes das condições iniciais.

A análise mais genérica revelou que o estado auto-preservativo atingido poderia, de fato, ser determinado unicamente pelas condições iniciais. Também foi revisto que qualquer variação em x do comprimento transversal δ pode resultar em um jato auto-preservativo. Estes novos resultados esclarecem que jatos de laboratório nunca podem aproximar-se pontualmente a jatos das análises prévias e que cada classe de jato de laboratório é assintoticamente única (jatos com entrada plana, jatos de dutos completamente desenvolvidos) e mantém uma dependência do número de Reynolds da fonte. Tal fato foi comprovado através de simulações realizadas por Glaze e Frankel (2003).

Algumas das simulações de jatos circulares baseadas em hipóteses de axissimetria, encontradas na literatura, consideram o escoamento apenas no plano radial bidimensional, e apresentam seu desenvolvimento espacial (Gamet e Estivelezes, 1995; Reynier et al., 1995; Boersma, 1998). Outras simulações consideram os aspectos tridimensionais, mas restringem-se à evolução temporal de forma a possibilitar a utilização de malha de discretização suficientemente finas (Martin e Meiburg, 1991; Abid e Brachet, 1992; Comte et al., 1992; Verzicco and Orlandi, 1996; Brancher, 1996). Diante deste contexto, Urbin e Métais (1997) propuseram demonstrar a possibilidade de se realizar uma simulação tridimensional e em desenvolvimento espacial com razoável custo computacional para aplicações de engenharia. Estes autores aplicaram Simulações de Grandes Escalas (SGE) baseada no modelo de função estrutura seletivo (Lesieur e Métais, 1996), para avaliar o comportamento estatístico e topológico de jatos circulares em evolução espacial. As equações filtradas de Navier Stokes

foram resolvidas por um software industrial chamado TRIO-VF (Grand et al., 1988), que foi validado em muitas Simulações de Grandes Escalas de vários escoamentos (Silveira-Neto et al., 1993). Neste trabalho, foi observado o crescimento do modo de instabilidade axisimétrico, o qual conduziu a vórtices em forma de anéis. Os vórtices anulares originaram também estruturas de vórtices que consistem em pares alternados localizados entre os anéis (Comte et al., 1992). Vórtices helicoidais também foram visualizados em alternância com os anulares. Os resultados para velocidades axiais médias e suas flutuações apresentaram uma boa concordância com dados experimentais. Os autores mostraram ainda, em concordância com vários resultados experimentais (Crow e Champagne, 1971; Zaman e Hussain, 1980), a alteração do comportamento do jato através de uma excitação específica (axisimétrica, alternada, helicoidal), o que possibilita o controle das estruturas e uma forte modificação da estatística do jato (taxa de espalhamento, nível de turbulência, etc.). Algumas das visualizações das estruturas do escoamento resultantes do trabalho são apresentadas nas Figs. 2.13 e 2.14.

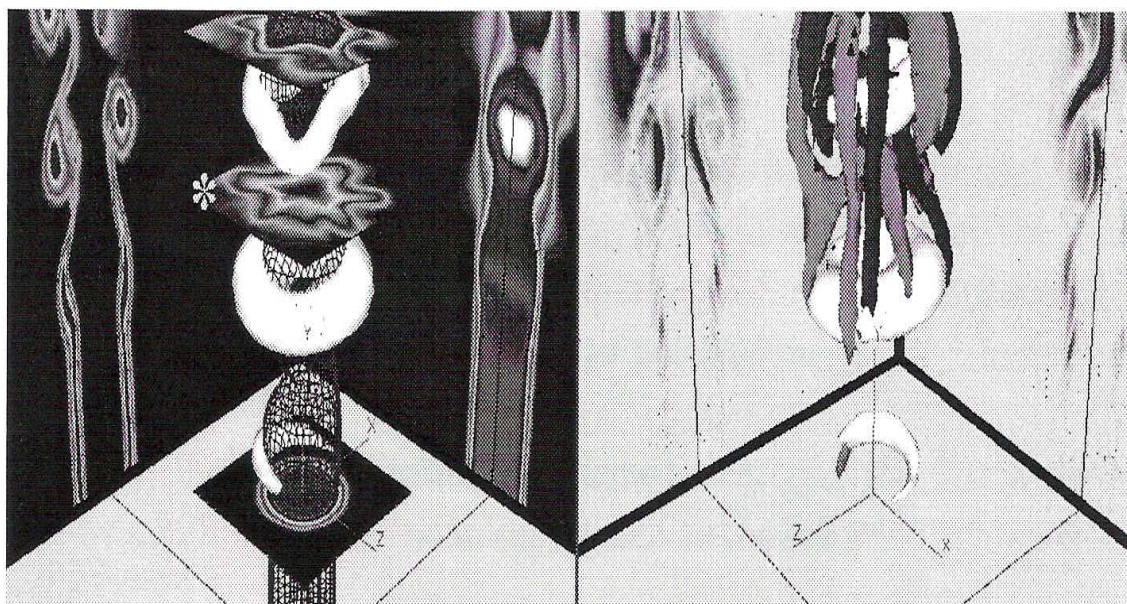


Figura 2.13 - Jato com excitação modo varicoso: isosuperfícies de baixa pressão em branco; secções cruzadas a $X=0$ e a $Y=0$.

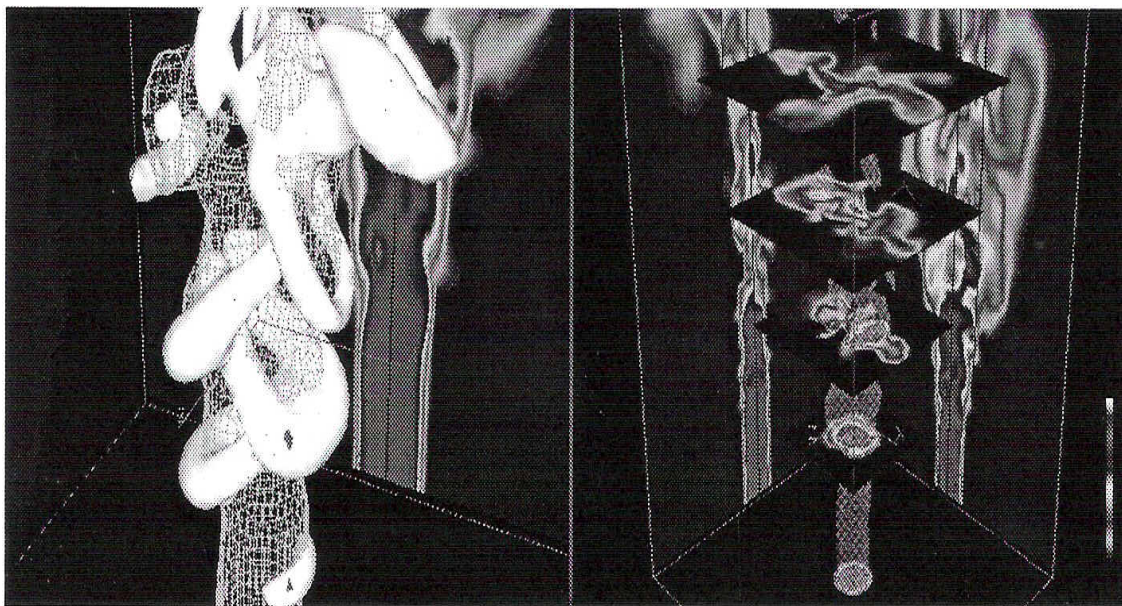


Figura 2.14 - Jato com excitação “alternate pairing”: isosuperfícies de baixa pressão em branco e secções cruzadas vertical e horizontal da velocidade axial.

Urbain e Métails (1997) foram os primeiros a aplicar perturbações específicas na entrada de um jato circular em evolução espacial para controle de sua dinâmica. As estruturas numericamente obtidas com a excitação “pares alternados” (Fig. 2.14) foram muito similares às obtidas experimentalmente por Lee e Reynolds (1985). No entanto, a natureza altamente dissipativa do esquema numérico usado levantou algumas dúvidas com relação à possibilidade do controle do jato utilizando este esquema de forçagem a elevados números de Reynolds. Danaila e Boersma (1998, 2000) revisaram o trabalho de Urbain e Métails (1997) usando simulação numérica direta a baixos números de Reynolds. Eles restabeleceram os resultados de Urbain e Métails (1997) com um método de forçagem similar chamado excitação “flapping”. Danaila e Boersma (2000) também introduziram uma denominada excitação bifurcada resultante da combinação das excitações axi-simétrica e “flapping”. Ambas excitações “flapping” e bifurcada causaram aumento drástico na taxa de espalhamento, mas apresentaram características topológicas e estatísticas muito distintas. A excitação bifurcada induziu a maior taxa de espalhamento. No entanto, vale ressaltar, que Danaila e Boersma (2000) utilizaram maiores amplitudes de perturbação na velocidade de entrada.

A literatura apresenta outros estudos (Hilgers, 1999; Hilgers e Boersma, 2001; Koumoutsakos et al., 1998) os quais tratam da aplicação de procedimentos de otimização estocástica para a determinação das frequências de forçagem mais eficientes para jatos de mistura em escoamentos a baixos e elevados números de Reynolds. No entanto, estes trabalhos não apresentam análises detalhadas sobre a dinâmica dos vórtices resultantes da excitação do escoamento, e utilizam amplitudes de forçagem muito elevadas.

Silva e Métais (2002) realizaram simulações numéricas de jatos circulares em desenvolvimento espacial utilizando SGE, aplicando um esquema de discretização compacto de sexta ordem na direção de escoamento do jato e métodos pseudo-espectrais nas demais direções. Estes autores objetivaram estudar a dinâmica dos vórtices de jatos bifurcados, tendo como foco as análises da influência da frequência de forçamento e do número de Reynolds sobre a eficiência de controle. Foram estudados diferentes métodos de forçamento utilizando excitação “flapping”, excitação “flapping” à frequência subharmônica, e o denominado “variflap”, o qual combina o modo de excitação vorticoso à frequência preferencial do jato e o modo “flapping”. Foi verificado através da análise detalhada da dinâmica dos vórtices coerentes que o método que combina excitação axi-simétrica à frequência preferencial e uma excitação “flapping” à frequência subharmônica é a estratégia de controle mais eficiente para jatos bifurcados mesmo a elevados números de Reynolds. A riqueza de detalhes com relação à dinâmica do escoamento de jatos, apresentada por Silva e Métais (2002), torna este trabalho uma importante referência para realização de demais estudos, sejam estes focados na aplicação direta no controle de jatos, sejam focados apenas na melhor compreensão das estruturas coerentes que compõem o escoamento.

O estudo da dinâmica das estruturas do escoamento para controle de jatos encontra importante aplicação na redução de ruídos. A literatura apresenta muitos trabalhos relacionados ao estudo dos mecanismos geradores de ruídos aplicando metodologias SND e SGE. Os resultados SGE são encorajadores e mostram potencial promissor para compreensão de ruídos em jatos. Embora a compreensão dos ruídos não seja o assunto de interesse do presente trabalho, estudiosos, como Freund (2001) e Uzun (2003), apresentam resultados e conclusões interessantes, as quais merecem ser ressaltadas.

Freund (2001) estudou um jato com interesse nos mecanismos de geração de som a Mach 0,9, número de Reynolds 3600 através de simulação numérica direta (SND). Embora a representação teórica da fonte acústica em escoamento turbulento exista há aproximadamente 50 anos (Lighthill, 1952), medidas precisas de qualquer fonte teórica em jato turbulento real têm sido impossíveis devido às dificuldades experimentais. Este trabalho apresenta tensores de Reynolds comparados aos dados de Panchapakesan e Lumley (1993). Segundo Freund (2001) os tensores de Reynolds são insensíveis ao número de Reynolds, o que possibilitou a comparação e uma boa concordância pode ser observada. A visualização da vorticidade é apresentada na Figura 2.15, e os tensores de Reynolds experimentais e teóricos são apresentados na Fig. 2.16.

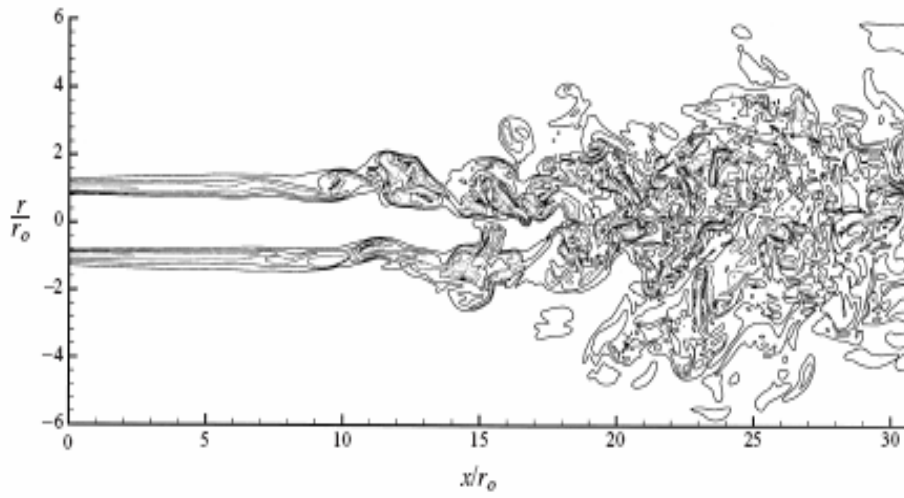


Figura 2.15 - Contorno instantâneo da vorticidade (Freund, 2001).

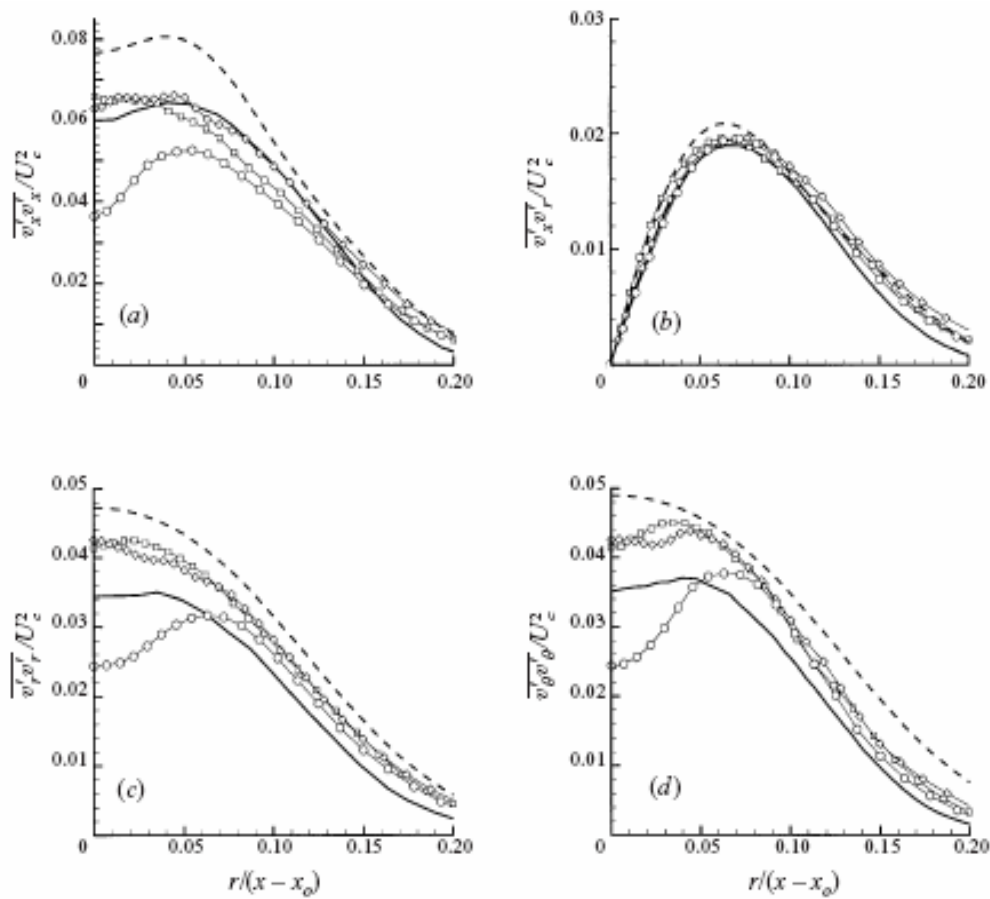


Figura 2.16 - Tensores de Reynolds: $\circ$, $x=20r_0$; $\diamond$, $x=25r_0$; $\square$, $x=30r_0$; —, dados de Panchapakesan e Lumley (1993) a baixo número de Mach; ----, dados experimentais de Hussein et al. (1994) a baixo número de Mach (Freund, 2001).

Uzun (2003) realizou um estudo de jatos compressíveis com interesse em aerodinâmica e acústica. Este autor desenvolveu e testou uma metodologia CAA (Computational Aero Acoustics) para predição de ruído do jato, a qual contém um código 3D SGE com uma diferenciação finita compacta de alta ordem de precisão e o modelo submalha de Smagorinsky dinâmico para modelar o efeito das escalas não resolvidas.

O trabalho de Uzun (2003) apresenta resultados da simulação de jatos a número de Mach 0,9 e número de Reynolds 100.000, utilizando uma malha de discretização de 12 milhões de pontos. A Figura 2.17 mostra o esquema da superfície de controle na vizinhança do escoamento do jato. A taxa de espalhamento do jato encontrada pelo autor mostrou-se dentro da faixa experimental encontrada para jatos incompressíveis (Hussein et al., 1994; Panchapakesan e Lumley, 1993 e Wignansky e Fidler, 1969). Os perfis de velocidade média na direção do escoamento a três localizações longitudinais coincidem muito bem entre si e apresentam auto-similaridade consistente com observações experimentais em jatos incompressíveis de Hussein et al. (1994) e Panchapakesan e Lumley (1993), conforme apresenta a Fig. 2.18. Segundo Uzun, o número de Mach é baixo e assim os efeitos compressíveis são desprezíveis, o que torna segura a comparação com os perfis com dados experimentais de jatos incompressíveis.

Uzun (2003) observou que os perfis a $x = 45 r_0$, $x = 50 r_0$ e $x = 55 r_0$ coincidem entre si, exibem auto-similaridade e apresentam, em geral, boa concordância com os dados experimentais de Hussein et al. (1994) e Panchapakesan e Lumley (1993). Os perfis dos tensores de Reynolds são apresentados na Fig. 2.19. Apesar da boa concordância entre dados experimentais e simulados, Uzun ressalta algumas justificativas para as possíveis diferenças entre os dados. Primeiramente, o autor lembra que os tensores de Reynolds calculados por SGE são baseados em velocidades filtradas. Ele menciona também a diferença entre as condições iniciais impostas na simulação (flutuações aleatórias de velocidade) e as condições iniciais do experimento. Além disso, Uzun argumenta que os tensores de Reynolds experimentais têm sido medidos a distantes regiões longitudinais, usualmente 100 raios do bocal ou mais. Tem sido observado experimentalmente que os tensores atingem auto-similaridade assintótica a diferentes localizações longitudinais, dependendo das condições iniciais e do número de Reynolds. Os experimentos de Wignansky e Fidler (1969) sugerem uma distância de cerca de 100 raios de jato downstream do bocal para iniciar a região de auto-similaridade a elevados números de Reynolds, enquanto a SND de Freund mostra que região de auto-similaridade começa a cerca de $x = 25 r_0$ a baixos números de Reynolds. Desta forma, segundo, Uzun, como o domínio de 60 raios do bocal de saída do jato é ainda relativamente curto comparado com os sugeridos pelos experimentos e o número de Reynolds é relativamente alto, os tensores σ_{xx} podem não ter atingido valores assintóticos verdadeiros.

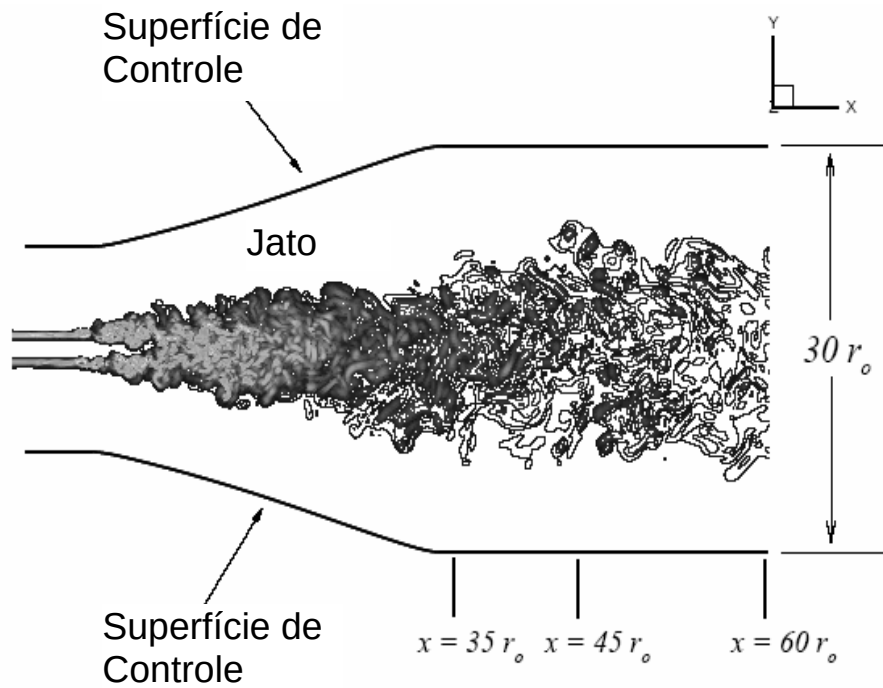


Figura 2.17 - Esquema da superfície de controle na vizinhança do escoamento do jato.
(Uzun, 2003)

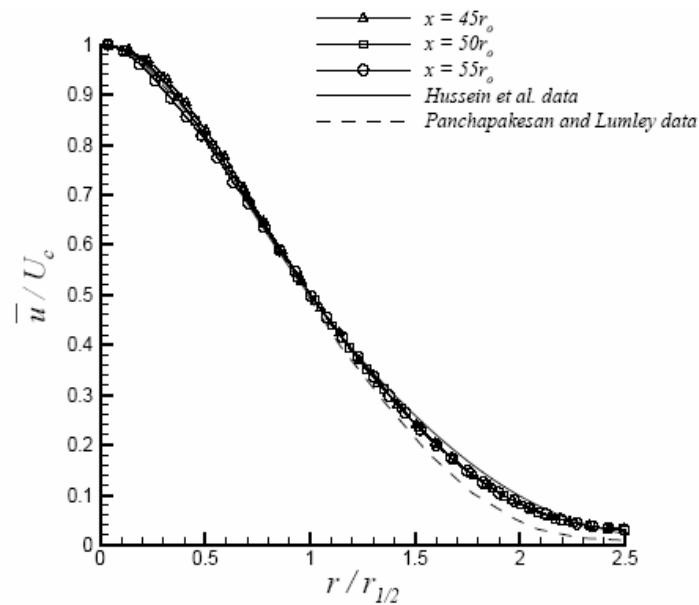


Figura 2.18 - Perfil de velocidade axial média e comparação com dados experimentais.
(Uzun, 2003).

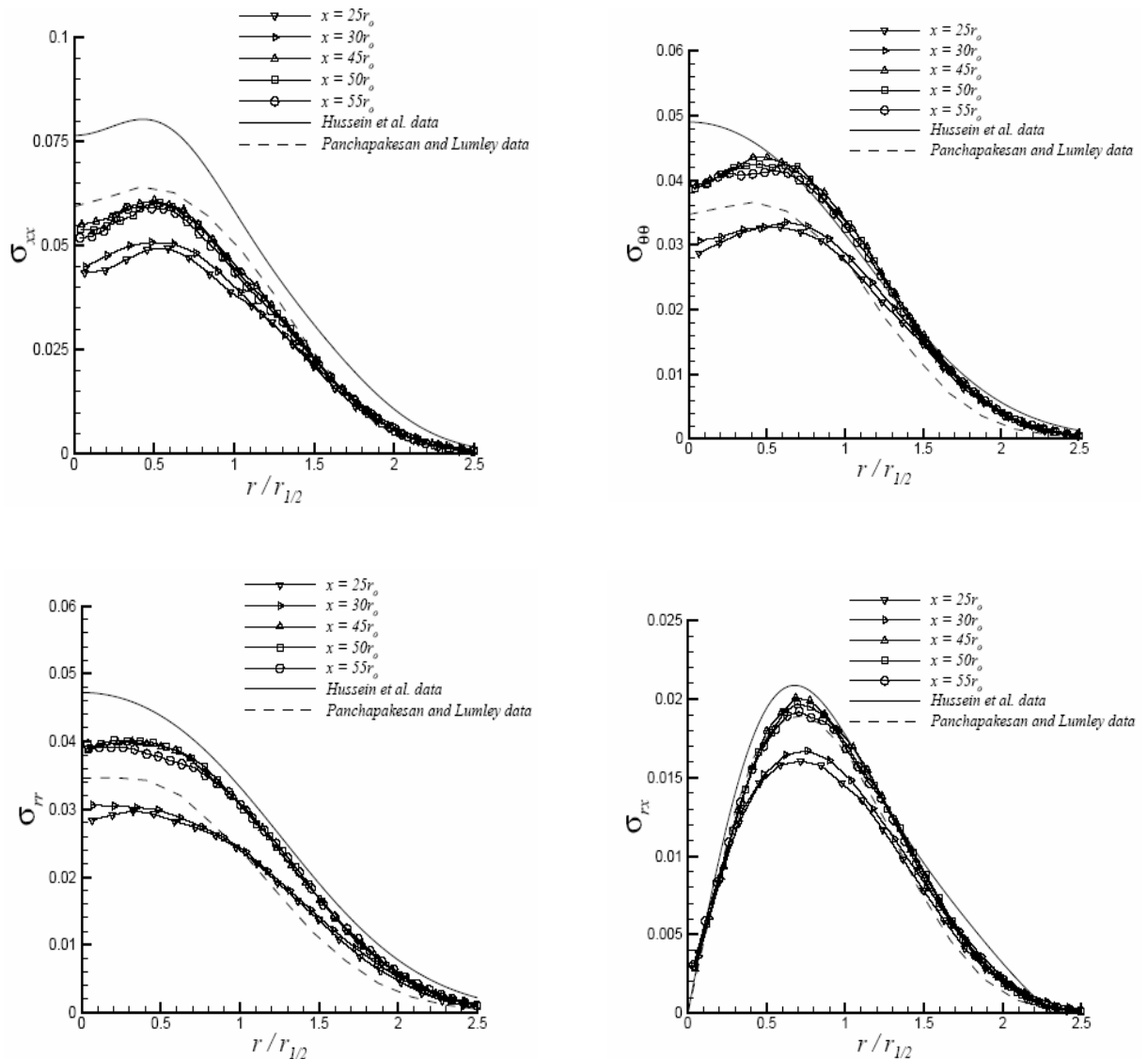


Figura 2.19 - Perfis dos tensores de Reynolds e comparação com experimentais. (Uzun, 2003)

Muitos dos estudos não-periódicos de SND e SGE encontrados na literatura tratam de escoamentos transicionais. Tal fato deve-se provavelmente devido a uma melhor definição e maior facilidade de implementação das condições de entrada para o regime de transição do que para os escoamentos turbulentos completamente desenvolvidos. A esta provável justificativa soma-se a maior facilidade em realizar simulações a números de Reynolds do regime de transição, os quais são inferiores àqueles característicos dos escoamentos completamente desenvolvidos. Forçagens harmônicas com superposição de flutuações aleatórias de velocidade são comumente usadas para suprir as frequências de excitação necessárias para iniciar a instabilidade da camada cisalhante e a transição à turbulência. Entretanto, este tipo de tratamento não é muito adequado para simular um escoamento

completamente turbulento, uma vez que medidas experimentais e resultados numéricos apresentam alta sensibilidade às condições de entrada. Esta é, inclusive, uma das justificativas ressaltadas por Uzun (2003) para as possíveis diferenças entre os resultados de suas simulações e dados experimentais. Glaze e Frankel (2003) objetivaram seu estudo na comparação do comportamento de duas diferentes metodologias de condições de entrada, as quais são destinadas a simular uma entrada turbulenta para um jato circular a Reynolds 21000, utilizando SGE e um esquema de discretização espacial finita compacto de sexta ordem. Esse trabalho apresenta interessantes resultados em termos de visualização de vórtices. Foram obtidas detalhadas estruturas instantâneas, conforme mostra a Fig. 2.20, através da qual é possível observar em detalhes a formação de estruturas toroidais, interação entre filamentos secundários e evolução para turbulência completamente desenvolvida.

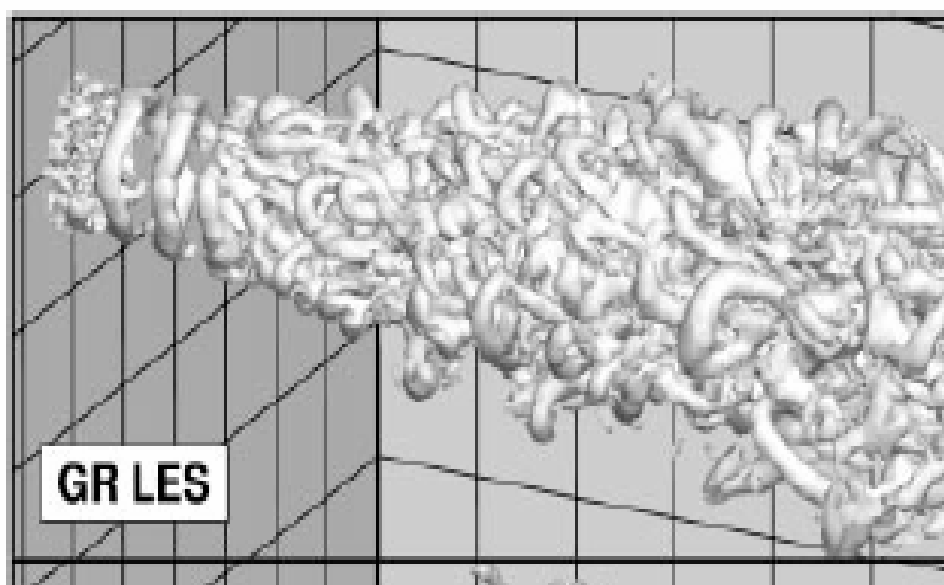


Figura 2.20 - Estruturas de Vórtice instantâneas visualizadas por isosuperfícies negativas λ_2 . (Glaze e Frankel, 2003).

Muitas das análises da dinâmica do escoamento de jatos espaciais encontradas na literatura, especialmente as mais recentes, empregam esquemas de discretização espacial de alta ordem de resolução. Alguns autores, tais como Freund (2001), Silva e Metais (2002), Uzun (2003), Silva, Balarac e Métais (2003), obtiveram resultados bem sucedidos ao associar um esquema de discretização compacto de sexta ordem na direção do escoamento a métodos espectrais nas demais direções. As vantagens da associação destes métodos são justificadas pela alta precisão e relativa rapidez computacional apresentadas pelos métodos espectrais.

Basu e Narasimha (1998) realizaram SND para estudar o aquecimento volumétrico sem fonte em escoamentos incompressíveis. Como a simulação de escoamentos com alta precisão consiste em capturar todas as escalas relevantes de espaço e tempo, há extrema demanda de tempo e memória computacionais. Os autores decidiram então calcular uma analogia temporal do problema, onde a evolução temporal de uma camada de mistura cilíndrica foi analisada em um domínio computacional periódico nas três direções do escoamento. Segundo os autores, a vantagem do uso de um domínio periódico é a facilidade com que os métodos espectrais, os quais se baseiam nas transformadas rápidas de Fourier (FFT), podem ser usados para cálculos razoavelmente rápidos e com elevada precisão. A desvantagem é que comparações quantitativas rigorosas com dados experimentais não podem ser realizadas. Basu e Narasimha (1998) ressaltam, entretanto, que as estruturas tridimensionais identificadas em um jato experimental podem ser identificadas em evolução temporal do escoamento e não em uma região particular do espaço. Assim, os cálculos não são estritamente representativos da evolução de um jato ou esteira axissimétricos, mas o são para uma camada de mistura cilíndrica.

Ling et al. (1998) também verificou que condições de contorno periódicas podem fornecer bons resultados para configurações simples como camadas de mistura em desenvolvimento temporal ou turbulência completamente desenvolvida em escoamentos em tubos ou canais. Mathew e Basu (2001) mostraram que o uso de periodicidade não afetou os resultados obtidos em suas simulações. Estas simulações foram realizadas utilizando um método pseudo-espectral baseado em expansões de séries de Fourier em um sistema de coordenadas cartesianas. Os autores comprovaram que o método é econômico para estudo da simulação de jatos circulares em SND, apresenta facilidade computacional e não requer qualquer tratamento especial próximo ao eixo do jato.

Capítulo III

Modelo Matemático e Metodologia Numérica

No presente trabalho foram empregados três códigos computacionais diferentes para estudos de escoamentos do tipo jatos. O primeiro código utilizado, denominado *LAYER2*, foi desenvolvido por Chernousov (2001). Embora este código seja aplicado na resolução de problemas compressíveis, foram utilizados baixos números de Mach de forma a permitir uma comparação entre os resultados obtidos e aqueles encontrados na literatura para escoamentos incompressíveis (procedimento também empregado por Uzun (2003)). O segundo código, *CIL3D*, é uma versão atualizada do código desenvolvido por Souza (2003). O terceiro e último código, desenvolvido no contexto da presente tese, utiliza o método pseudo-espectral para resolução das equações que compõem o modelo matemático, sendo aqui denominado *SPECTRAL*. Os três códigos aplicados à resolução das equações que compõem o modelo matemático para escoamentos de jatos livres são apresentados a seguir de forma detalhada.

3.1 Código *LAYER2*

O código computacional *LAYER2* (Chernousov, 2001) emprega a metodologia de volumes-finitos em uma malha cartesiana tridimensional para escoamentos não estacionários compressíveis. As equações que compõem o modelo matemático, bem como o esquema numérico aplicado para resolução das mesmas, são descritos a seguir.

3.1.1 Modelagem Matemática

As equações de Navier-Stokes e da energia podem ser apresentadas na seguinte forma pseudoconservativa compacta:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1)$$

onde:

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

sendo ρe a energia total, definida, para um gás ideal, por:

$$\rho e = \rho C_v T + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2). \quad (3.3)$$

Os fluxos F_i , $\forall i \in \{1, 2, 3\}$, são:

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 - \sigma_{i1} \\ \rho u_i u_2 - \sigma_{i2} \\ \rho u_i u_3 - \sigma_{i3} \\ \rho e u_i - u_j \sigma_{ij} - q_i \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

O fluxo de calor q_i é dado, por :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (3.5)$$

Os componentes σ_{ij} do tensor cisalhante são dados pela Lei de Newton:

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + S_{ij}, \quad (3.6)$$

onde:

$$S_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \right] \quad (3.7)$$

denota o tensor taxa de deformação. A viscosidade “bulk” é negligenciada (hipótese de Stokes), como normalmente aceita, exceto em condições termodinâmicas extremas. Assim:

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p \delta_{i1} - \mu S_{i1} \\ \rho u_i u_2 + p \delta_{i2} - \mu S_{i2} \\ \rho u_i u_3 + p \delta_{i3} - \mu S_{i3} \\ (\rho e + p) u_i - u_j S_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Para fechar o sistema, utiliza-se a equação de estado :

$$p = R \rho T. \quad (3.9)$$

3.1.2 Procedimento de filtragem em Simulação de Grandes Escalas

Para escoamentos compressíveis, em simulação de grandes escalas, pode-se aplicar a filtragem ponderada pela densidade, introduzida por Favre (1965):

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}}. \quad (3.10)$$

onde $\bar{\rho}$ é a densidade filtrada.

Aplicando o filtro às equações de Navier-Stokes e da energia, obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.11)$$

com

$$\bar{U} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \overline{\rho u_1} \\ \overline{\rho u_2} \\ \overline{\rho u_3} \\ \overline{\rho e} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

a energia total resolvida $\overline{\rho e} = \overline{\rho \tilde{e}}$ é dada por:

$$\overline{\rho \tilde{e}} = \bar{\rho} C_v \tilde{T} + \frac{1}{2} \overline{\rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)}. \quad (3.13)$$

Os fluxos $\bar{F}_i$ filtrados podem ser reescritos:

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}_i} \\ \overline{\rho u_i u_1 + p \delta_{i1} - \mu S_{i1}} \\ \overline{\rho u_i u_2 + p \delta_{i2} - \mu S_{i2}} \\ \overline{\rho u_i u_3 + p \delta_{i3} - \mu S_{i3}} \\ \overline{(\rho e + p)u_i - \mu u_j S_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x}} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

com a equação de estado filtrada:

$$\bar{p} = R \bar{\rho} \tilde{T}. \quad (3.15)$$

O tensor de Reynolds sub-malha $\overline{\tau}$ generalizado é definido:

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u_i u_j} + \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j}, \quad (3.16)$$

sendo introduzido e separado em partes isotrópicas e deviatóricas:

$$\tau_{ij} = \underbrace{\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}}_{\tau_{ij}} + \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}. \quad (3.17)$$

Assim, a Equação (3.14) pode ser reescrita:

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u}_i \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_1 + (\bar{p} - \frac{1}{3} \tau_{kk}) \delta_{i1} - \tau_{i1} - \bar{\mu} S_{i1} \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_1 + (\bar{p} - \frac{1}{3} \tau_{kk}) \delta_{i2} - \tau_{i2} - \bar{\mu} S_{i2} \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_1 + (\bar{p} - \frac{1}{3} \tau_{kk}) \delta_{i3} - \tau_{i3} - \bar{\mu} S_{i3} \\ (\bar{\rho} e + \bar{p}) \tilde{u}_i - \bar{\mu} u_j S_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

e

$$\bar{\rho} \tilde{e} = \bar{\rho} C_v \tilde{T} + \frac{1}{2} \bar{\rho} (\tilde{u}_1^2 + \tilde{u}_2^2 + \tilde{u}_3^2) - \frac{1}{2} \tau_{kk} \quad (3.19)$$

O termo submalha τ_{kk} foi incorporado à pressão, como em Normand e Lesier (1992), trazendo outro argumento: no formalismo de SGE incompressível (veja Lilly, 1992), é frequente introduzir a macro-pressão:

$$\varpi = \bar{p} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \quad (3.20)$$

A Equação (3.19) pode ser re-escrita:

$$\bar{\rho} \tilde{e} = \bar{\rho} C_v \left(\tilde{T} - \frac{1}{2 C_v \bar{\rho}} \tau_{kk} \right) + \frac{1}{2} \bar{\rho} (\tilde{u}_1^2 + \tilde{u}_2^2 + \tilde{u}_3^2) \quad (3.21)$$

uma macro-temperatura pode ser introduzida:

$$\vartheta = \tilde{T} - \frac{1}{2 C_v \bar{\rho}} \tau_{kk}, \quad (3.22)$$

computável fora de $\bar{U}$ graças à equação (3.21). A equação de estado filtrada (3.15) pode ser reescrita:

$$\varpi = \bar{\rho}R\vartheta + \left(\frac{R}{2C_v} - \frac{1}{3} \right) \tau_{kk} = \bar{\rho}R\vartheta + \left(\frac{3\gamma - 5}{6} \right) \tau_{kk} . \quad (3.23)$$

Assim, para gases como argônio ou hélio (para os quais $\gamma \approx 5/3$ a $T = 298K$), a contribuição de τ_{kk} na equação (3.23) é inteiramente desprezível para qualquer número de Mach, o qual torna ϖ calculável em todos os casos. É extremamente desejável generalizar isto para o ar (para o qual $\gamma \approx 1,4$), considerando:

$$\varpi = \bar{\rho}R\vartheta . \quad (3.24)$$

Considerando a partir de agora um ϖ calculável, este pode ser envolvido na definição de um vetor fluxo de calor, denominado Q :

$$Q_i = -(\overline{\rho e + p})u_i + (\bar{\rho}\tilde{e} + \varpi)\tilde{u}_i . \quad (3.25)$$

Desde que modelos aceitáveis sejam propostos para $\bar{\tau}$ e Q , os fluxos resolvidos já aparecem de forma tratável:

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}_i \\ \overline{\rho\tilde{u}_i\tilde{u}_1} + \varpi\delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho\tilde{u}_i\tilde{u}_1} + \varpi\delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho\tilde{u}_i\tilde{u}_1} + \varpi\delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{\mu S_{i3}} \\ (\bar{\rho}\tilde{e} + \varpi)\tilde{u}_i - Q_i - \overline{\mu S_{ij}u_j} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Os termos não calculáveis são os termos viscosos, os quais podem ser considerados menos importantes. Entretanto, simplesmente repassando a Equação (3.26) tem-se:

$$\overline{F}_i = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}_i} \\ \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_1} + \varpi \delta_{i1} - \tau_{i1} - \mu_{ef} \tilde{S}_{i1} \\ \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_1} + \varpi \delta_{i2} - \tau_{i2} - \mu_{ef} \tilde{S}_{i2} \\ \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_1} + \varpi \delta_{i3} - \tau_{i3} - \mu_{ef} \tilde{S}_{i3} \\ (\overline{\rho e} + \varpi) \tilde{u}_i - Q_i - \mu_{ef} \tilde{S}_{ij} \tilde{u}_j - \lambda_{ef} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

As equações acima descrevem o transporte de quantidade de movimento e energia filtradas, correspondentes às escalas resolvidas, e contém a contribuição do tensor sub-malha (τ_{ij}), o qual modela as interações entre as escalas da turbulência resolvidas e as não-resolvidas. Pela hipótese de Bousinesq, a parte anisotrópica deste tensor pode ser relacionada com a taxa de deformação pela seguinte equação.

$$\tau_{ij} \approx \overline{\rho} \mu_t \tilde{S}_{ij}, \quad (3.28)$$

onde

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) \delta_{ij} \right). \quad (3.29)$$

O modelo sub-malha de difusividade pode ser escrito:

$$Q_i \approx \overline{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial x_i}. \quad (3.30)$$

Os coeficientes de transporte escalar são representados simplesmente por:

$$\mu_{ef} = \mu_{mol} + \mu_t, \quad (3.31)$$

$$\lambda_{ef} = \lambda_{mol} + \lambda_t = \frac{\mu_{mol} C_p}{Pr_{mol}} + \frac{\mu_t C_p}{Pr_t}. \quad (3.32)$$

onde Pr_t é considerado ser constante igual a 0,8 (Chernousov, 2001).

O tensor submalha foi modelado usando o modelo de Smagorinsky (1963). O termo μ_t , que representa a viscosidade turbulenta, é então formulado como se segue:

$$\mu_t = 2C_s^2 \rho \Delta^2 \sqrt{2\overline{S_{ij}}\overline{S_{ij}}} . \quad (3.33)$$

onde, C_s é uma constante e pode variar entre 0,1 e 1/3, relacionada à transferência de energia das grandes escalas para as menores escalas e Δ representa o comprimento característico das escalas sub-málas, normalmente dado por:

$$\Delta = (\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3)^{1/3} . \quad (3.34)$$

3.1.3 Esquema Numérico

Retornando ao sistema de equações em notação vetorial e três dimensões:

$$\frac{\partial \overline{U}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{F_1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \overline{F_2}}{\partial x_2} + \frac{\partial \overline{F_3}}{\partial x_3} = 0 . \quad (3.35)$$

Os cálculos avançam no tempo através de um esquema de Runge-Kutta de 2ª ordem:

$$\overline{U}_{i,j,k}^{(1)} = \overline{U}_{i,j,k}^n + \Delta t L_h \left(\overline{U}_{i,j,k}^n \right) . \quad (3.36)$$

$$\overline{U}_{i,j,k}^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left[\overline{U}_{i,j,k}^n + \overline{U}_{i,j,k}^{(1)} + \Delta t L_h \left(\overline{U}_{i,j,k}^{(1)} \right) \right] . \quad (3.37)$$

onde, L_h é operador diferença-finita espacial que retém a propriedade de conservação:

$$L_h \left(\overline{U}_{i,j,k}^n \right) = \frac{\overline{F}_{1i-1/2,j,k}^n - \overline{F}_{1i+1/2,j,k}^n}{\Delta x_1} + \frac{\overline{F}_{2i,j-1/2,k}^n - \overline{F}_{2i,j+1/2,k}^n}{\Delta x_2} + \frac{\overline{F}_{3i,j,k-1/2}^n - \overline{F}_{3i,j,k+1/2}^n}{\Delta x_3} \quad (3.38)$$

Os fluxos viscosos são calculados a partir de diferenças finitas, utilizando um esquema centrado de 2ª ordem no espaço. A Figura 3.1 mostra a discretização espacial da equação de transporte unidimensional estacionária. O procedimento para as equações bi e tridimensionais é uma extensão natural do esquema aqui mostrado.

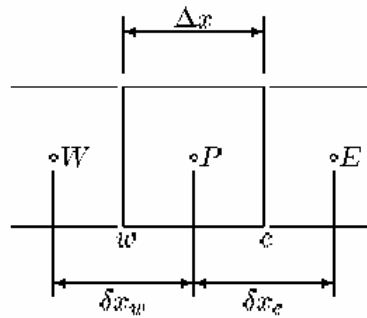


Figura 3.1 - Volume de controle unidimensional.

A parte difusiva do fluxo é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + S. \quad (3.39)$$

onde S representa todos os termos-fonte e ϕ a propriedade transportada. A discretização desta equação por diferenças finitas no volume de controle mostrado na Figura 3.1 fica:

$$\frac{\nu_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} - \nu_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w}}{\Delta x} + S_P. \quad (3.40)$$

Os fluxos advectivos são calculados usando uma aproximação parabólica “piecewise” uniforme e o solucionador de Riemann baseado em características linearizadas.

O solucionador de Riemann consiste em um procedimento especial de resolução, usado para calcular o vetor fluxo na interface da célula de acordo com os dados iniciais descontínuos e a natureza hiperbólica das equações governantes. Este procedimento é usualmente interpretado como uma técnica para obtenção da solução do problema de valor inicial (em evolução temporal), o qual pode ser dado na forma de uma equação de fluxo conservativo:

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial x} = 0 \quad (3.41)$$

Chernousov desenvolveu este procedimento de solução aproximada inspirando-se em trabalhos da literatura, os quais propunham combinar relações características para os parâmetros e o solucionador de Riemann exato de Guderberg (Toro, 1991). O solucionador proposto tem se mostrado muito rápido e o esquema resultante pode produzir soluções numéricas satisfatórias para problemas sub e supersônicos governados pelas leis de conservação hiperbólicas da dinâmica de fluidos, de acordo com problemas teste realizados pelo próprio autor. Além disto, este solver é essencialmente não-iterativo e não requer multiplicação de vetor/matriz. Segundo Chernousov (2001), o procedimento não apresenta dificuldades para problemas de diferentes dimensões e para cálculos de grandes escalas este solucionador pode ajudar a economizar tempo considerável.

3.2 Código CIL3D

O código *CIL3D* (Souza, 2003) resolve as equações de Navier-Stokes na forma incompressível e isotérmica, utilizando um algoritmo do tipo passo fracionário (Kim e Moin, 1985). Há muitas variantes deste método, mas a característica principal da metodologia é um algoritmo não-iterativo para o acoplamento pressão-velocidade, sendo o problema da incompressibilidade desvinculado do avanço no tempo. A maior parte dos algoritmos de passo fracionário trata as equações governantes de forma explícita ou semi-implícita (apenas os termos viscosos são implicitados) e a cada passo de tempo, a restrição da incompressibilidade deve ser satisfeita. Quando se realiza uma Simulação de Grandes Escalas ou uma Simulação Numérica Direta, o comportamento dinâmico do escoamento é obtido, diferentemente do que se obtém ao realizar-se uma média de Reynolds sobre as equações governantes. Neste último caso, o resultado é o comportamento médio do escoamento, sendo as instabilidades amortecidas pelo modelo de turbulência ou esquema advectivo. Consequentemente, os algoritmos de passo fracionário apresentam-se naturalmente mais apropriados para metodologias do tipo SGE e SND.

Para SGE e SND, recomenda-se que a discretização temporal seja pelo menos de 2ª a 4ª ordem, para que as estruturas do escoamento sejam capturadas. Neste código, optou-se pelo esquema de Adams-Bashforth de 2ª ordem para ambos os termos advectivo e difusivo das equações de momento por ser um método explícito e de baixo custo computacional.

As equações governantes na forma tensorial, para um escoamento incompressível, isotérmico são dadas pelas Equações (3.42) e (3.43):

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + H_i = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right], \quad (3.43)$$

onde H_i representa o termo advectivo.

Estas equações são resolvidas em dois passos: preditor e corretor.

Passo preditor:

$$\frac{u_i^* - u_i^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} \left[-H_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]^n - \frac{1}{2} \left[-H_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]^{n-1} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^n}{\partial x_i}. \quad (3.44)$$

No passo preditor, as velocidades são estimadas com base no campo de pressão do instante anterior (n denota o instante de tempo). Os coeficientes $3/2$ e $-1/2$ são devidos ao esquema de Adams-Bashforth, que é totalmente explícito e requer a avaliação dos termos advectivo e difusivo nos dois instantes de tempo precedentes.

Passo corretor:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i}. \quad (3.45)$$

A variável auxiliar p' mantém a seguinte relação com as pressões no instante atual e no instante anterior:

$$p^{n+1} = p^n + p'. \quad (3.46)$$

Assim, se as equações de predição e correção forem somadas, obter-se-á a equação original de momento com 2ª ordem no tempo para os termos advectivo e difusivo. Como pode se observar, fraciona-se a solução da equação original de momento em dois estágios temporais, daí o nome do algoritmo.

É possível demonstrar analiticamente que a função da pressão no cálculo de escoamentos incompressíveis é satisfazer a conservação da massa (Ferziger e Peric, 1999). Para obter um campo de pressão que satisfaça a continuidade, aplica-se a seguinte operação à Equação (3.45):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^*}{\Delta t} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right]^{n+1}. \quad (3.47)$$

Deseja-se que o campo final de velocidade u_i^{n+1} satisfaça a continuidade:

$$\frac{\partial u_i^{n+1}}{\partial x_i} = 0. \quad (3.48)$$

Assim, a Equação (3.47) fica:

$$\frac{1}{\Delta t} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p'^{n+1}}{\partial x_i \partial x_i}. \quad (3.49)$$

Resolvendo a equação de Poisson acima, obtém-se a variável p' que, por sua vez, produzirá um campo de velocidades cujo divergente é nulo. As velocidades estimadas são então corrigidas pelo gradiente da variável p' , de forma que o campo no instante atual satisfaz a restrição de continuidade.

Para uma malha deslocada, as etapas do algoritmo de resolução podem então ser sintetizadas:

1. estimar velocidades com a Equação 3.44;
2. com as velocidades estimadas, calcular o termo-fonte da Equação 3.49 e resolver o sistema linear para a variável auxiliar p' ;
3. corrigir as velocidades estimadas com a Equação 3.45 e a pressão com a Equação 3.46;
4. verificar se a continuidade é satisfeita em todo o domínio com a Equação 3.48;
5. avançar para o próximo passo de tempo.

Assim, há apenas um sistema linear a ser resolvido, e esta etapa do cálculo demanda o maior esforço computacional. Para o caso de escoamentos complexos e turbulentos, a

experiência dos autores indica que aproximadamente 80 % do tempo de CPU é devido à resolução da equação de Poisson para a variável auxiliar p' . É fundamental, portanto, o emprego de solucionadores que resolvam a equação de Poisson para p' de forma eficaz. Neste trabalho, inovou-se em relação ao trabalho de Souza (2003), que utilizou o método MSI (Modified Strongly Implicit Procedure), através da aplicação da transformada rápida de Fourier (FFT) na direção azimutal de um jato redondo, que é periódica em coordenadas cilíndricas. Este procedimento transforma o sistema de equações algébricas lineares heptadiagonal para p' em sistemas de equações algébricas lineares pentadiagonais, reduzindo significativamente o custo da solução por passo de tempo. A seguir, esta metodologia é detalhada.

3.2.1 Solução da equação de Poisson via FFT

O desenvolvimento mostrado a seguir é derivado de Numerical Recipes in Fortran 77 (Press et al., 1992).

A equação de Poisson tridimensional para uma variável f discretizada por diferenças finitas de segunda ordem pode ser escrita na seguinte forma:

$$a_w \cdot f_{i-1,j,k} + a_e \cdot f_{i+1,j,k} + a_s \cdot f_{i,j-1,k} + a_n \cdot f_{i,j+1,k} + a_b \cdot f_{i,j,k-1} + a_t \cdot f_{i,j,k+1} + a_p \cdot f_{i,j,k} = b_{i,j,k}, \quad (3.50)$$

onde a_w , a_e , a_s , a_n , a_b , a_t e a_p representam os coeficientes do sistema linear e b o termo-fonte. Neste exemplo, supõe-se que as condições de contorno para f sejam periódicas na direção y e que seus coeficientes sejam constantes nesta direção:

$$f_{iN_y,k} = f_{i1,k}, \quad (3.51)$$

$$f_{i0,k} = f_{iN_y-1,k}, \quad (3.52)$$

$$a_s = a_n = \text{constante}. \quad (3.53)$$

As equações (3.51) e (3.52) representam a condição de periodicidade.

A transformada rápida de Fourier (FFT) da função f na direção y é dada por (Numerical Recipes):

$$\hat{f}_{imk} = \frac{1}{N_y} \sum_{j=0}^{Ny-1} f_{ijk} e^{-2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} \quad (3.54)$$

e sua inversa por:

$$f_{ijk} = \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} \quad (3.55)$$

Substituindo a última equação na equação de Poisson e fazendo a FFT inversa do termo-fonte, tem-se:

$$\begin{aligned} & a_w \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{i-1mk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_e \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{i+1mk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_s \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}m(j-1)/Ny} + \\ & a_n \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}m(j+1)/Ny} + a_b \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk-1} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_t \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk+1} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + \\ & a_p \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} = \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{b}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny}, \end{aligned} \quad (3.56)$$

que pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & a_w \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{i-1mk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_e \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{i+1mk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_b \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk-1} e^{-2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + \\ & a_t \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk+1} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_p \sum_{j=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + a_s \cdot e^{-2\pi\sqrt{-1}m/Ny} \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} \cdot e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} + \\ & a_n e^{-2\pi\sqrt{-1}m/Ny} \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{f}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny} = \sum_{m=0}^{Ny-1} \hat{b}_{imk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/Ny}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Pelas propriedades de séries, tem-se que:

$$\begin{aligned} & a_w \cdot \hat{f}_{i-1mk} + a_e \cdot \hat{f}_{i+1mk} + a_b \cdot \hat{f}_{imk-1} + a_t \cdot \hat{f}_{imk+1} + \\ & \left(a_p + a_s \cdot e^{-2\pi\sqrt{-1}m/Ny} + a_n e^{2\pi\sqrt{-1}m/Ny} \right) \cdot \hat{f}_{imk} = \hat{b}_{imk}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Lembrando que $a_s = a_n$ e utilizando a seguinte identidade:

$$\frac{e^{\sqrt{-1}\alpha} + e^{-\sqrt{-1}\alpha}}{2} = \cos(\alpha), \quad (3.59)$$

chega-se à seguinte equação:

$$a_w \cdot \hat{f}_{i-1mk} + a_e \cdot \hat{f}_{i+1mk} + a_b \cdot \hat{f}_{imk-1} + a_t \cdot \hat{f}_{imk+1} + \left[a_p + 2a_n \cos\left(\frac{2\pi m}{N_y}\right) \right] \cdot \hat{f}_{imk} = \hat{b}_{imk}, \quad (3.60)$$

com m variando de $0, N_y-1$.

Como mostrado, através da aplicação da FFT na direção periódica do sistema de equações lineares original, tem-se agora um sistema linear de dimensões $N_x \times N_z$ para cada modo m de Fourier. É importante ressaltar que como os coeficientes de Fourier $\hat{f}_{imk}$ são variáveis complexas, é necessário resolver a parte real e a parte imaginária de cada sistema.

A estratégia de resolução da equação de Poisson 3D via FFT pode então ser sintetizada:

- calcular a FFT do termo-fonte: $\hat{b}_{imk} = \frac{1}{N_y} \sum_{j=0}^{N_y-1} b_{ijk} e^{2\pi\sqrt{-1}mj/N_y}$,
- resolver os N_y sistemas lineares dados pela Equação (3.60) utilizando *solvers* como SIP para obter $\hat{f}_{imk}$,
- fazer a FFT inversa de $\hat{f}_{imk}$, $f_{ijk} = \sum_{m=0}^{N_y-1} \hat{f}_{imk} e^{-2\pi\sqrt{-1}mj/N_y}$ para obter a solução no espaço físico.

Para o cálculo das FFT direta e inversa, podem ser utilizadas as rotinas disponíveis no Numerical Recipes (Press et al., 1992). Entretanto, estas operam apenas com N_y igual a uma potência de 2 (2^n). Há várias rotinas gratuitas disponíveis na Internet, dentre as quais o pacote FFTPACK (<http://www.netlib.org/fftpack/>, 2004), que calculam as FFT sem esta restrição para N_y de forma bastante eficiente. As subrotinas de FFTPACK foram utilizadas neste trabalho.

3.2.2 Discretização espacial

Concentra-se agora a atenção sobre a discretização espacial das equações filtradas de Navier-Stokes. De acordo com o que foi exposto no item 3.2.1, os termos advectivos e difusivos foram discretizados via diferenças finitas centradas de 2ª ordem sobre os volumes de controle mostrados na Fig. 3.2. Os termos advectivos foram discretizados na forma divergente. Optou-se pelo arranjo deslocado para as variáveis pelo fato de este esquema ser conservativo quando os termos advectivos são tratados na forma divergente, conforme discutido no item 3.2.

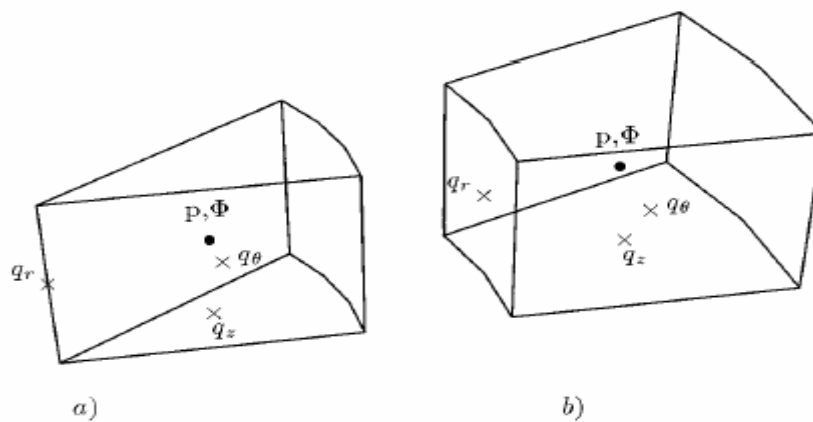


Figura 3.2 – Volumes de controle em coordenadas cilíndricas: a) no eixo b) no resto do domínio (Verzicco e Orlandi, 1996) – q_r , q_z e q_θ representam as componentes radial, axial e tangencial da velocidade, respectivamente.

Por questões de clareza e simplicidade, apenas a discretização espacial da equação de transporte unidimensional estacionária será mostrada. O procedimento para as equações bi e tridimensionais é uma extensão natural daquele aqui mostrado. Para o caso particular de coordenadas cilíndricas, os termos na direção radial são ponderados pelo raio e há termos-fonte adicionais nas equações para velocidades radial e tangencial (força centrífuga e força de Coriolis).

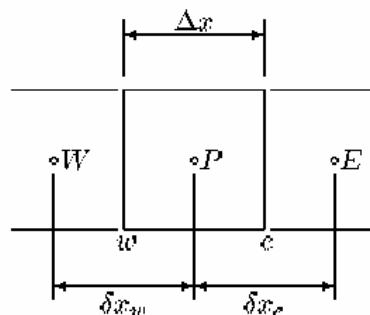


Figura 3.3 – Volume de controle unidimensional.

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(v \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + S, \quad (3.61)$$

onde S representa todos os termos-fonte e ϕ a propriedade transportada. A discretização desta equação por diferenças finitas no volume de controle mostrado na Fig. 3.3 fica:

$$\frac{(\rho u)_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - (\rho u)_w \frac{\phi_P + \phi_W}{2}}{\Delta x} = - \frac{v_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} - v_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w}}{\Delta x} + S_P. \quad (3.62)$$

Na discretização do termo advectivo pode-se verificar que a propriedade ϕ foi avaliada nas interfaces leste e oeste por meio da média aritmética dos pontos nodais vizinhos. Este é o esquema centrado de 2ª ordem. Os fluxos ρu em cada interface podem ser calculados de forma análoga:

$$(\rho u)_e = \frac{(\rho u)_E + (\rho u)_P}{2} \quad \text{e} \quad (\rho u)_w = \frac{(\rho u)_P + (\rho u)_W}{2} \quad (3.63)$$

Uma questão relevante quando coordenadas cilíndricas são empregadas é o tratamento da singularidade em $r=0$. O uso de malhas deslocadas oferece uma solução simples e eficaz para este inconveniente. Como mostra a Fig. 3.2, apenas a componente radial da velocidade é avaliada em $r=0$, e como os fluxos são ponderados pelo raio, as contribuições desta face degenerada são nulas, por definição. Para as demais variáveis, o processo é similar: as contribuições para os transportes advectivo e difusivo da face $r=0$ são nulas nesta célula, pois são multiplicadas pela coordenada radial. Na verdade, não se conhecem os valores das variáveis ao longo do eixo $r=0$, mas evita-se a necessidade de avaliá-las para o cálculo das demais variáveis.

3.2.3 Geração da malha

O emprego de um sistema ortogonal para a resolução das equações de conservação oferece vantagens interessantes, tais como não exigir a adaptação do código computacional a um sistema de coordenadas generalizadas e nem o cálculo de termos adicionais nas equações

governantes. Optou-se neste trabalho pelo sistema de coordenadas cilíndricas, no qual é possível representar genericamente a geometria de um jato circular.

3.2.4 Equações governantes em coordenadas cilíndricas

As equações da continuidade e de Navier-Stokes para escoamento incompressível em coordenadas cilíndricas podem ser escritas como segue (Bird et al., 1962):

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (3.64)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(vu)}{\partial \theta} + \frac{\partial(wu)}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{2}{r} \frac{\partial(rvS_{rr})}{\partial r} + \frac{2}{r} \frac{\partial(vS_{r\theta})}{\partial \theta} + \\ & 2 \frac{\partial(vS_{rz})}{\partial z} - \frac{2vS_{\theta\theta}}{r} + \frac{v^2}{r}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(vv)}{\partial \theta} + \frac{\partial(wv)}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial(r^2 v S_{r\theta})}{\partial r} + \\ & \frac{2}{r} \frac{\partial(vS_{\theta\theta})}{\partial \theta} + 2 \frac{\partial(vS_{\theta z})}{\partial z} - \frac{uv}{r}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(uw)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(vw)}{\partial \theta} + \frac{\partial(ww)}{\partial z} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{2}{r} \frac{\partial(rvS_{rz})}{\partial r} + \\ & \frac{2}{r} \frac{\partial(vS_{\theta z})}{\partial \theta} + 2 \frac{\partial(vS_{zz})}{\partial z}, \end{aligned} \quad (3.67)$$

onde S_{ij} representa as taxas de deformação, dadas em coordenadas cilíndricas por Bird et al (1962):

$$S_{rr} = \frac{\partial u}{\partial r}, \quad (3.68)$$

$$S_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{u}{r}, \quad (3.69)$$

$$S_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}, \quad (3.70)$$

$$S_{r\theta} = S_{\theta r} = \frac{1}{2} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right], \quad (3.71)$$

$$S_{z\theta} = S_{\theta z} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right], \quad (3.72)$$

$$S_{zr} = S_{rz} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right]. \quad (3.73)$$

3.2.5 Implementação do modelo de turbulência submalha

O modelo de turbulência submalha utilizado neste trabalho foi o de Smagorinsky (1963), dado pela Equação (3.74). Este modelo é baseado na hipótese de equilíbrio, em que a produção de energia submalha está em equilíbrio instantâneo com a dissipação viscosa desta energia. As taxas de deformação foram calculadas através de diferenças finitas de 2ª ordem no volume de controle representado na Figura 3.2. As velocidades utilizadas no cálculo destas taxas de deformação são as do campo filtrado.

$$\nu_t = C_s^2 \Delta^2 \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad (3.74)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.75)$$

3.3 Método Pseudo-Espectral

3.3.1 Introdução

Em métodos espectrais, as derivadas espaciais são avaliadas com a adição de séries de Fourier ou alguma de suas generalizações. Um método espectral simples trata de funções periódicas especificadas pelos seus valores a um conjunto de pontos uniformemente espaçados:

$$f(x_j) = \sum_{q=-N/2}^{N/2-1} \hat{f}(k_q) e^{\sqrt{-1}k_q x_j}, \quad (3.76)$$

onde $x_j = j\Delta x$, $j = 1, 2, \dots, N$, sendo N o número de pontos de colocação e $k_q = 2\pi q / \Delta x N$ os números de ondas para $q = -N/2, -N/2+1, \dots$ até $N/2-2, N/2-1$.

A inversa da equação acima é dada por:

$$\hat{f}(k_q) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j) e^{-\sqrt{-1}k_q x_j}. \quad (3.77)$$

Assim, a derivada da função f na direção x é dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_j) = \sum_{q=-N/2}^{N/2-1} \sqrt{-1}k_q \hat{f}(k_q) e^{\sqrt{-1}k_q x_j}, \quad (3.78)$$

a qual mostra que o coeficiente de Fourier de $\partial f / \partial x$ é $\sqrt{-1}k_q \hat{f}(k_q)$. Esta propriedade oferece um método eficiente e preciso de avaliação da derivada:

- Dada $f(x_j)$, use a Equação (3.77) para calcular seus coeficientes de Fourier $\hat{f}(k_q)$;
- Calcule os coeficientes de Fourier de $g = \partial f / \partial x$: $\hat{g}(k_q) = ik_q \hat{f}(k_q)$;
- Avalie as séries (3.78) para obter $g = \partial f / \partial x$ em todos os modos de Fourier.

Aspectos importantes:

- O método é facilmente generalizado para altas derivadas, por exemplo:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_j) = \sum_{q=-N/2}^{N/2-1} -k_q^2 \hat{f}(k_q) e^{\sqrt{-1}k_q x_j}; \quad (3.79)$$

- O erro no cálculo da derivada diminui exponencialmente com N , quando o número de pontos de colocação N é suficientemente grande e se $f(x)$ é periódico em x . Isto faz o método espectral muito mais preciso que o método de diferenças finitas para grandes

valores de N . Para pequenos valores de N , este pode não ser o caso. A definição de “grande” depende da função.

- O custo computacional dos coeficientes de Fourier usando a Equação (3.76) e/ou a inversa usando a Equação (3.77), se feita da maneira mais óbvia, é da ordem de N^2 . Isto seria extremamente caro; o método prático consiste em um método mais rápido de cálculo da transformada rápida de Fourier (FFT) para a qual o custo é proporcional a $N \log_2 N$.
- O método pode ser facilmente estendido a funções bi e tridimensionais. No caso tridimensional a função $f(\vec{x})$ e sua inversa $\hat{f}(\vec{k})$ podem ser escritas de acordo com as Eq. (3.80) e (3.81), respectivamente:

$$f(\vec{x}) = f(x_i, y_j, z_k) = \sum_{q_x=-N_x/2}^{N_x/2-1} \sum_{q_y=-N_y/2}^{N_y/2-1} \sum_{q_z=-N_z/2}^{N_z/2-1} \hat{f}(k_x, k_y, k_z) e^{\sqrt{-1}k_x x_i} e^{\sqrt{-1}k_y y_j} e^{\sqrt{-1}k_z z_k}, \quad (3.80)$$

$$\hat{f}(\vec{k}) = \hat{f}(k_x, k_y, k_z) = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} f(x_i, y_j, z_k) e^{-\sqrt{-1}k_x x_i} e^{-\sqrt{-1}k_y y_j} e^{-\sqrt{-1}k_z z_k}, \quad (3.81)$$

sendo $x_i = i\Delta x$, $i = 1, 2, \dots, N_x$ e $k_x = 2\pi q_x / \Delta x N_x$,

$y_j = j\Delta y$, $j = 1, 2, \dots, N_y$ e $k_y = 2\pi q_y / \Delta y N_y$,

$z_k = k\Delta z$, $k = 1, 2, \dots, N_z$ e $k_z = 2\pi q_z / \Delta z N_z$.

É importante ressaltar que para obter as vantagens deste método espectral, em particular, a função deve ser periódica em todas as direções e os modos de Fourier uniformemente espaçados. Mudanças na geometria ou condições de contorno requerem considerável mudança do método, tornando-o relativamente inflexível.

3.3.2 Transformada de Fourier

Sendo $f(\vec{x}, t)$ uma função periódica qualquer, define-se a sua transformada de Fourier como segue:

$$\hat{f}(\vec{k}, t) \equiv \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int_V e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}, t) d\vec{x}, \quad (3.82)$$

onde $\vec{k} = 2\pi\vec{\ell} / \ell$, é o número de onda, ou freqüência espacial e $\vec{\ell}$ é o vetor comprimento de onda ou período espacial, conforme ilustrado na Figura 3.4. O vetor número de onda tem três componentes correspondentes às três direções coordenadas: $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$.

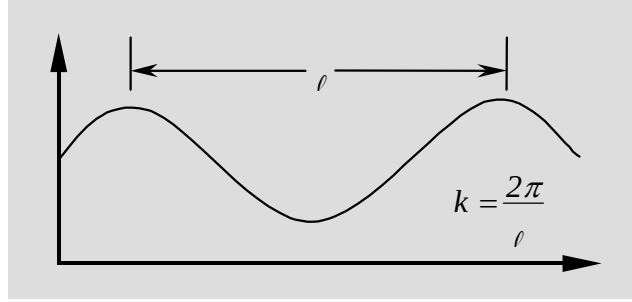


Figura 3.4 - Sinal periódico, comprimento de onda ℓ e número de onda k_i .

A transformada inversa é definida como:

$$f(\vec{x}, t) \equiv \int_{\vec{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{f}(\vec{k}, t) d\vec{k}. \quad (3.83)$$

a) Operadores de interesse para transformação das equações de Navier-Stokes

Para obter as equações de Navier-Stokes no espaço de Fourier, necessita-se conhecer os operadores fundamentais transformados.

- Transformada da derivada de uma função

Seja

$$g(\vec{x}, t) = \frac{\partial f(\vec{x}, t)}{\partial x_\ell} = \frac{\partial}{\partial x_\ell} \left(\int_{\vec{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{f}(\vec{k}, t) d\vec{k} \right) = \int_{\vec{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} i k_\ell \hat{f}(\vec{k}, t) d\vec{k} = i k_\ell f(\vec{x}, t). \quad (3.84)$$

Logo,

$$\hat{g}(\vec{k}, t) = TF \left[\frac{\partial f}{\partial x_\ell} \right] = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \int_{\vec{V}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \frac{\partial f}{\partial x_\ell} d\vec{x} = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 i k_\ell \int_{\vec{V}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}, t) d\vec{x} = i k_\ell \hat{f}(\vec{k}, t) \quad (3.85)$$

- Transformada do gradiente de f

$$TF[\vec{\nabla}f] = TF\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right)\right] = i(k_x, k_y, k_z)\hat{f}(\vec{k}, t) = i\vec{k}\hat{f}(\vec{k}, t). \quad (3.86)$$

- Transformada do divergente de um vetor

$$TF[\vec{\nabla} \cdot \vec{V}] = i\vec{k} \cdot \hat{\vec{V}}. \quad (3.87)$$

- Transformada do laplaciano de um vetor

$$TF[\nabla^2 \vec{V}] = -k^2 \hat{\vec{V}}. \quad (3.88)$$

- A transformada do produto de duas funções

$$TF[f(\vec{x}, t)g(\vec{x}, t)] = [\hat{f} * \hat{g}](\vec{k}, t) = \int_{\vec{p}} \hat{f}(\vec{p}, t)\hat{g}(\vec{k} - \vec{p}, t)d\vec{p}, \quad (3.89)$$

onde $[\hat{f} * \hat{g}]$ denota o produto de convolução das duas funções transformadas. Os parâmetros de transformação de f e g são $\vec{p}$ e $\vec{q}$, onde $\vec{k} = \vec{p} + \vec{q}$. Esta integral de convolução representa as interações triádicas entre os três números de onda relativos às transformadas das duas funções separadamente e à transformada do produto das duas funções.

3.3.3 Equações de Navier-Stokes no espaço espectral

Considerem-se as equações que modelam os escoamentos incompressíveis no espaço físico, com propriedades físicas unitárias:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \end{cases} \quad (3.90)$$

- a) Transformada da equação da continuidade

$$TF \left[\frac{\partial u_\ell}{\partial x_\ell} \right] = ik_\ell \hat{u}_\ell \Rightarrow TF \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] = i\vec{k} \cdot \hat{\vec{u}} = 0. \quad (3.91)$$

Define-se, no espaço de Fourier, um plano π , perpendicular ao vetor número de onda $\vec{k}$, como esquematizado na Fig. 3.5:

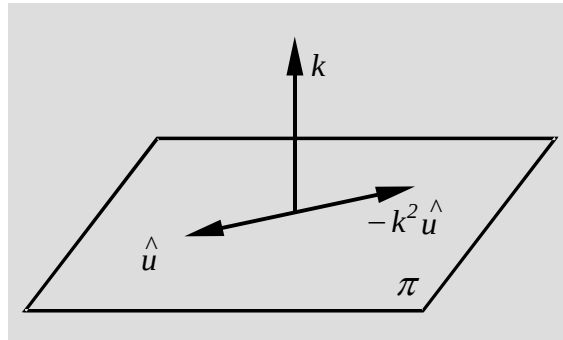


Figura 3.5 - Plano de ortogonalidade no espaço de Fourier.

Logo, pela Eq. (3.91) o vetor número de onda é ortogonal ao vetor velocidade transformado. A Figura 3.5 ilustra este fato.

b) Transformada de Fourier das Equações de Navier-Stokes

Tomam-se as equações de Navier-Stokes e busca-se transformar cada termo individualmente.

- Termo da taxa de variação da quantidade de movimento

$$TF \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \right] = \frac{\partial \hat{\vec{u}}}{\partial t}. \quad (3.92)$$

Observa-se que, sendo

$$\vec{k} \cdot \hat{\vec{u}} = 0, \quad (3.93)$$

então,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{k} \cdot \vec{u} \right) = \vec{k} \cdot \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} \in \text{ao plano } \pi. \quad (3.94)$$

- Termo da difusão da quantidade de movimento

$$TF \left[\nabla^2 \vec{u} \right] = -k^2 \vec{u}. \quad (3.95)$$

Este termo transformado também pertence ao plano π .

- Gradiente da pressão

$$TF \left[\vec{\nabla} p \right] = i k \hat{p}. \quad (3.96)$$

Nota-se, então, que a transformada da pressão é colinear com o vetor número de onda, sendo portanto, perpendicular ao plano π .

- Termo não linear

Com os resultados acima, tem-se que:

$$\underbrace{TF \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \nabla^2 \vec{u} \right]}_{\in \pi} \overset{+}{\Rightarrow} \underbrace{TF \left[\vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \vec{u}) + \nabla p \right]}_{\in \pi} = 0. \quad (3.97)$$

O primeiro colchete desta soma pertence ao plano π , pelos resultados já apresentados. O segundo colchete deve também pertencer, uma vez que a soma dos dois é nula. Para se transformar o termo não linear em conjunto com o gradiente da pressão será definido um operado de projeção P_{ij} como segue:

$$P_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}, \quad (3.98)$$

onde

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}, \quad (3.99)$$

é o delta de Kronecker.

Para verificar a função deste operador P_{ij} , toma-se um vetor $\vec{a}$ qualquer, e faz-se a projeção de $\vec{a}$ através de P_{ij} , obtendo-se o seguinte:

$$P_{ij} \cdot \vec{a} = P_{ij} a_j = a_j \delta_{ij} - a_j \frac{k_i k_j}{k^2} = a_i - a_j k_j \frac{k_i}{k^2} = a_\pi. \quad (3.100)$$

Fazendo o produto escalar da projeção a_π pelo vetor número de onda $\vec{k}$, tem-se que:

$$a_\pi k_i = a_i k_i - a_j k_j \frac{k_i k_j}{k^2} = 0. \quad (3.101)$$

Assim, verifica-se que o operador P_{ij} projeta um vetor $\vec{a}$ qualquer no plano π .

Retornando à transformada do termo não linear, tem-se que

$$TF \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (u_\ell u_j) \right] = ik_j \int_{\vec{p} + \vec{q} = \vec{k}} \hat{u}_\ell \hat{u}_j d\vec{p}. \quad (3.102)$$

Como já tinha sido visto,

$$\hat{\vec{R}} = \left[ik_\ell \hat{p} + ik_j \int_{\vec{p} + \vec{q} = \vec{k}} \hat{u}_\ell \hat{u}_j d\vec{p} \right] \in \pi. \quad (3.103)$$

Esquematizando esta soma sobre o plano π , tem-se a Fig. 3.6, da qual conclui-se que a soma dos vetores transformadas do gradiente da pressão e do termo não linear, ou seja o vetor $\hat{\vec{R}}$, é igual à projeção da transformada do termo não linear sobre o plano π . Assim, a transformada de Navier-Stokes é:

$$\frac{\partial \hat{u}_\ell}{\partial t} + \nu k^2 \hat{u}_\ell = -ik_m P_{jm}(\vec{k}) \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}} \hat{u}_\ell(\vec{p}) \hat{u}_j(\vec{q}) d\vec{p}. \quad (3.104)$$

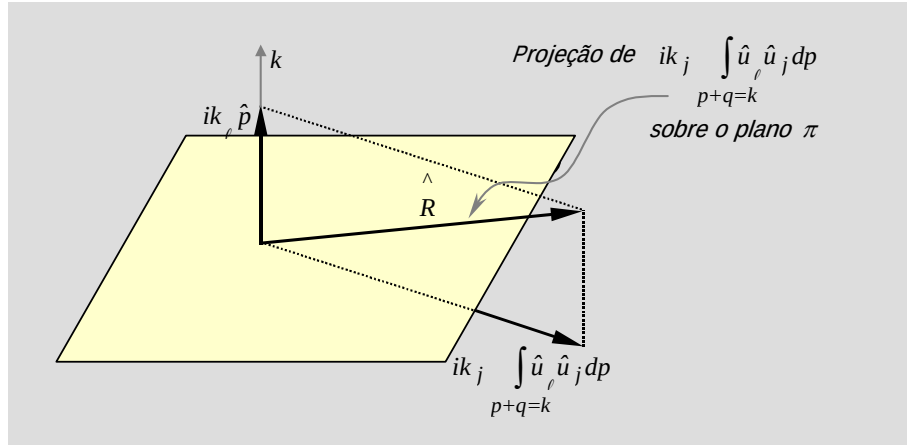


Figura 3.6 - Esquema de projeções das transformadas no espaço de Fourier.

Desta forma, observa-se que Navier-Stokes no espaço de Fourier não depende do conceito de pressão, como acontece no espaço físico.

A resolução da integral de convolução não-linear, a qual faz parte da Eq. (3.104) é inviável devido seu elevado custo computacional. Por isso os métodos denominados pseudo-espectrais têm sido muito utilizados. Estes métodos consistem em resolver o produto das velocidades no espaço físico, transformando-os em seguida para o espaço de Fourier, onde se efetua o cálculo das derivadas. Assim, o campo de velocidade transformado é calculado, com o qual efetua-se a transformada inversa e determina-se o campo de velocidade no espaço físico.

Conforme demonstrado acima, no método pseudo-espectral utilizado neste trabalho, a função da pressão, que era simplesmente assegurar que $\hat{u} \perp \vec{k}$, é substituída pela operação de projeção. Não é necessário, portanto, calculá-la, mas se seu valor é de interesse, basta somar a componente do termo não-linear perpendicular ao plano π , que é igual ao termo não-linear original ($\hat{H}_\ell$) a menos de sua projeção no plano π ($\hat{H}_{\ell\pi}$):

$$\hat{H}_\ell - \hat{H}_{\ell\pi} = \hat{H}_\ell - \left(\hat{H}_\ell - \hat{H}_j k_j \frac{k_\ell}{k^2} \right) = \hat{H}_j k_j \frac{k_\ell}{k^2}, \quad (3.105)$$

à transformada da pressão, dada pela Eq.(3.96) e igualar esta soma a zero, já que ambos os termos são colineares com o vetor número de onda. Assim, a pressão pode ser obtida de:

$$ik_\ell \hat{p} + \hat{H}_j k_j \frac{k_\ell}{k^2} = 0, \quad (3.106)$$

que em coordenadas cartesianas, pode ser reescrita como:

$$\hat{p} = \frac{\hat{H}_u k_x + \hat{H}_v k_y + \hat{H}_w k_z}{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} i \quad (3.107)$$

Assim, a equação de Navier-Stokes no espaço espectral pode ser escrita da seguinte forma para as componentes de velocidade:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = -\hat{H}_{u_\pi} + \nu(-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \hat{u}, \quad (3.108)$$

$$\frac{\partial \hat{v}}{\partial t} = -\hat{H}_{v_\pi} + \nu(-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \hat{v}, \quad (3.109)$$

$$\frac{\partial \hat{w}}{\partial t} = -\hat{H}_{w_\pi} + \nu(-k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \hat{w}, \quad (3.110)$$

onde $\hat{u}$, $\hat{v}$ e $\hat{w}$ são os coeficientes de Fourier para u , v e w , respectivamente e $\hat{H}_{u_\pi}$, $\hat{H}_{v_\pi}$ e $\hat{H}_{w_\pi}$ representam os termos advectivos de cada equação projetados no plano π .

Os termos não-lineares $\hat{H}_u$, $\hat{H}_v$ e $\hat{H}_w$ merecem atenção especial, pois podem receber diferentes formas de tratamento nos métodos pseudo-espectrais, conforme será discutido no item a seguir.

3.3.4 Tratamento do termo não-linear

As diferentes formas de se tratar o termo não linear nas equações de Navier-Stokes são matematicamente idênticas, mas apresentam diferentes propriedades quando discretizadas. Estas são:

$$\text{Forma advectiva: } \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \quad (3.111)$$

$$\text{Forma divergente: } \nabla \cdot (\vec{u} \vec{u}) \quad (3.112)$$

$$\text{Forma "skew"-simétrica: } \frac{1}{2}(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \frac{1}{2}\nabla(\vec{u} \cdot \vec{u}) \quad (3.113)$$

$$\text{Forma rotacional: } \frac{1}{2}\vec{\nabla}(\vec{u} \cdot \vec{u}) + \vec{\omega} \times \vec{u} \quad (3.114)$$

onde $\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{u}$.

Estas expressões são algebricamente iguais, assumindo $\nabla \cdot \vec{u} = 0$. Quando discretizada, a forma rotacional é a menos cara para se calcular, mas introduz erros nas altas freqüências espaciais, a menos que o processo de "dealias" (Canuto et al., 1988) seja usado. No entanto, este processo aumenta o custo do cálculo dos coeficientes de Fourier consideravelmente. A forma skew-simétrica é a mais estável e apresenta os melhores resultados, mas é cerca duas vezes mais cara computacionalmente que a rotacional. No entanto, este inconveniente pode ser resolvido. Observando as expressões acima, conclui-se que a forma "skew"-simétrica é a média entre as formas advectiva e divergente. Portanto, a forma "skew"-simétrica pode ser simulada pela alternância entre as formas advectiva e divergente em sucessivos passos de tempo. Na prática a alternância entre as formas divergente e "skew"-simétrica é tão bem comportada quanto a forma "skew"-simétrica e quase tão rápida quanto a rotacional. Zang (Canuto et al, 1988) recomenda usar as formas "skew"-simétrica ou alternada sem "dealiasing" ou a forma rotacional com o processo de "dealiasing".

Para a escolha da melhor forma a ser utilizada neste trabalho, investigaram-se trabalhos da literatura. Krist e Zang (1987) estudaram os efeitos de "aliasing" sobre simulações da transição do escoamento em um canal. Os resultados obtidos pelos autores demonstraram que cálculos "dealiased" são mais estáveis que para cálculos "aliased" em uma resolução espacial correspondente. No entanto, ambos sofrem de problemas de estabilidade se a resolução não é suficiente para garantir precisão. Portanto, é fundamental que uma resolução espacial adequada ao problema, mesmo que a operação de "dealiasing" seja feita. Os espectros de energia mostrados na Fig. 3.7, extraídos de Canuto et al. (1988), indicam que a diferença entre os resultados com a operação de 'dealiasing' diferem daqueles com erros de 'alias' apenas nas altas freqüências e tendem a desaparecer com aumento dos modos de Fourier.

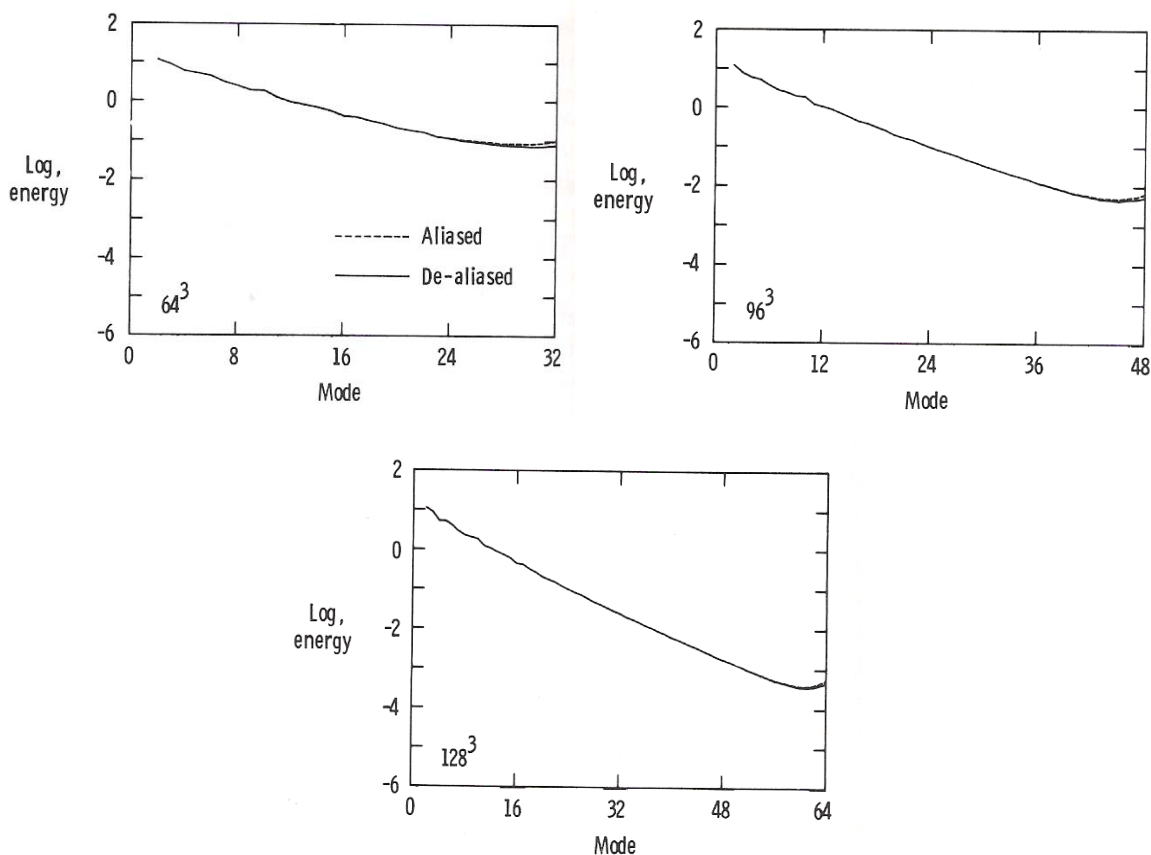


Figura 3.7. Espectro de Energia para simulações “aliased” e “dealisead” de turbulência isotrópica incompressível com 64^3 , 96^3 e 128^3 modos de Fourier. O logaritmo da energia é plotado como função do número de onda k . (Canuto et al., 1988).

Diante dos resultados apresentados por Krist e Zang (1987), o processo de “dealising” parece ser mais importante para promover mais estabilidade do que precisão, além de apresentar-se cerca de 50% mais caro em relação aos cálculos “aliased”. Portanto, optou-se por utilizar no presente código a forma alternada entre convergente e divergente sem “dealising”.

3.3.5 Algoritmos de evolução temporal

Para o avanço temporal das equações no código SPECTRAL foram utilizados os esquemas de Adams-Bashforth e Runge Kutta, ambos de 3ª ordem. O esquema de Runge

Kutta envolve três sub-passos para cada passo de tempo Δt , com diferentes coeficientes γ_i e ζ_i :

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t [\gamma_i f(t_n, \phi^n) + \zeta_i f(t_{n-1}, \phi_{n-1})] \quad (3.115)$$

onde os coeficientes γ_i e ζ_i são definidos conforme apresentado na Tabela 3.1 para cada sub-passo de tempo i .

Tabela 3.1 - Coeficientes do método de Runge-Kutta de 3ª ordem

i	γ_i	ζ_i
0	8,0/15,0	0,0
1	5,0/12,0	-17,0/60,0
2	3,0/4,0	-5,0/12,0

O método de Runge Kutta de 3ª ordem é um esquema de avanço temporal particularmente conveniente porque $\zeta_0 = 0$ elimina o passo de tempo anterior. Consequentemente o passo de tempo pode ser iniciado a partir de um campo de velocidade instantâneo simples.

Após os dois passos de tempo iniciais utilizando o esquema de Runge Kutta de 3ª ordem (RK3), o avanço temporal segue o esquema de Adams Bashforth de 3ª ordem (AB3):

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\Delta t}{12} [23 f(t_n, \phi^n) - 16 f(t_{n-1}, \phi^{n-1}) + 5 f(t_{n-2}, \phi^{n-2})] \quad (3.116)$$

A cada passo ou subpasso de tempo a equação de Navier Stokes transformada é resolvida.

O método de Adams-Bashforth é bem mais barato computacionalmente que o método de Runge-Kutta, mas requer o conhecimento dos três passos de tempo precedentes. Portanto, o cálculo para os dois primeiros passos de tempo é sempre feito via o método de Runge-Kutta, e conhecidos os campos para estes dois passos de tempo, o cálculo procede com o método de Adams-Bashforth. Assim dispondo apenas do último passo de tempo, pode-se reiniciar o cálculo a qualquer momento.

3.3.6 Algoritmo do código SPECTRAL

O algoritmo do código *SPECTRAL* para condições de contorno periódicas é relativamente simples, sendo seus passos básicos apresentados a seguir:

- 1- Fornece-se o campo inicial de velocidades no domínio físico;
- 2- Calcula-se a FFT direta das condições iniciais através do pacote FFTPACK (<http://www.netlib.org/fftpack/>, 2004) para converter estas condições para o espaço espectral;
- 3- Para que este campo inicial no domínio espectral tenha divergência nula, ele é projetado no plano ortogonal ao vetor número de onda. Para isto, utiliza-se a Equação (3.100);
- 4- Calcula-se o lado direito das equações de Navier-Stokes no domínio espectral para o campo inicial, expresso pelas Equações (3.108) a (3.110);
- 5- Avançam-se os coeficientes de Fourier no tempo através do RK3 nos dois primeiros passos de tempo, Equação (3.115);
- 6- O avanço no tempo prossegue via o método de AB3, Eq. (3.116). A cada passo de tempo, os coeficientes de Fourier são atualizados e o campo de velocidades no domínio físico é obtido via aplicação das FFT inversas a $\hat{u}$, $\hat{v}$ e $\hat{w}$. O campo físico é necessário para o cômputo dos termos advectivos;
- 7- Calcula-se o lado direito das equações de Navier-Stokes no domínio espectral, Eqs. (3.108) a (3.110), e retorna-se ao passo 6;
- 8- O avanço temporal procede, intercalando entre os passos 6 e 7.

Para os passos 4 e 7, é necessário avaliar os termos não-lineares $\hat{H}_i$. Conforme explicado anteriormente, este termo é calculado alternando-se entre as formas advectiva e divergente. Abaixo, o algoritmo para cada uma destas formas é detalhado.

Para a forma advectiva, o cálculo de $\hat{H}_u$, por exemplo, é feito da seguinte forma:

- Conhecidos $\hat{u}$, $\hat{v}$ e $\hat{w}$ no instante de tempo anterior, calculam-se as derivadas de $\hat{u}$ no espaço espectral:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial x} = ik_x \hat{u}, \quad (3.117)$$

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial y} = ik_y \hat{u}, \quad (3.118)$$

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial z} = ik_z \hat{u}; \quad (3.119)$$

- Calculam-se as derivadas de u no espaço físico via aplicação da FFT inversa às Eqs. (3.117), (3.118) e (3.119);
- Calculam-se os produtos $u \frac{\partial u}{\partial x}$, $v \frac{\partial u}{\partial y}$ e $w \frac{\partial u}{\partial z}$ no espaço físico. Os campos de velocidade u , v e w no espaço físico foram obtidos no passo 6 via FFT inversa de $\hat{u}$, $\hat{v}$ e $\hat{w}$;
- Somam-se os três produtos $u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z}$ e converte-se o resultado para o domínio espectral via FFT direta;
- Aplica-se então a projeção definida na Eq.(3.100) para calcular a componente deste termo no plano π , obtendo-se então $\hat{H}_{u\pi}$:

$$\hat{H}_{u\pi} = \hat{H}_u - \frac{(\hat{H}_u k_x + \hat{H}_v k_y + \hat{H}_w k_z)}{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} k_x. \quad (3.120)$$

Analogamente, tem-se que:

$$\hat{H}_{v\pi} = \hat{H}_v - \frac{(\hat{H}_u k_x + \hat{H}_v k_y + \hat{H}_w k_z)}{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} k_y, \quad (3.121)$$

$$\hat{H}_{w\pi} = \hat{H}_w - \frac{(\hat{H}_u k_x + \hat{H}_v k_y + \hat{H}_w k_z)}{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} k_z. \quad (3.122)$$

Para a forma convectiva, o procedimento para cálculo de $\hat{H}_u$ é o seguinte:

- Conhecidas as velocidades u , v e w no plano físico, calculam-se os produtos $u.u$, $u.v$ e $u.w$ no plano físico;
- Via FFT direta, obtêm-se os produtos acima no domínio espectral;
- As derivadas dos produtos podem então ser calculadas no domínio espectral:

$$\frac{\partial(\widehat{uu})}{\partial x} = ik_x \widehat{uu}, \quad (3.120)$$

$$\frac{\partial(\widehat{uv})}{\partial y} = ik_y \widehat{uv}, \quad (3.121)$$

$$\frac{\partial(\widehat{uw})}{\partial z} = ik_z \widehat{uw}; \quad (3.122)$$

- Os produtos acima são somados para gerar $\hat{H}_u$;
- Novamente, é necessário aplicar o operador projeção a $\hat{H}_u$, Eq.(3.100), para obter o termo $\hat{H}_{u\pi}$. O procedimento é similar para os outros termos advectivos.