

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE PESQUISAS HIDRÁULICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM RECURSOS HÍDRICOS E SANEAMENTO
AMBIENTAL

LEONARDO ROMERO MONTEIRO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DE ALTA ORDEM PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS
ÁGUA-AIR

PORTO ALEGRE

2018

LEONARDO ROMERO MONTEIRO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DE ALTA ORDEM PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS
ÁGUA-AIR

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial à obtenção do grau de doutor.

Orientadora: Edith Beatriz Camaño Schettini

Coorientador: Jorge Hugo Silvestrini

PORTO ALEGRE

2018

CIP - Catalogação na Publicação

Monteiro, Leonardo Romero

Simulação Numérica Direta de Alta Ordem para
Escoamentos Bifásicos Água-Ar / Leonardo Romero
Monteiro. -- 2018.

153 f.

Orientadora: Edith Beatriz Camaño Schettini.

Coorientador: Jorge Hugo Silvestrini.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal do Rio
Grande do Sul, Instituto de Pesquisas Hidráulicas,
Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos e
Saneamento Ambiental, Porto Alegre, BR-RS, 2018.

1. Simulação Numérica Direta. 2. Escoamentos
bifásicos. 3. Método Level Set. I. Schettini, Edith
Beatriz Camaño, orient. II. Silvestrini, Jorge
Hugo, coorient. III. Título.

LEONARDO ROMERO MONTEIRO
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DE ALTA ORDEM PARA ESCOAMENTOS BIFÁSICOS
ÁGUA-AR

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial à obtenção do grau de doutor.

Aprovado em: Porto Alegre, 12 de março de 2018.

Profa. Dra. Edith Beatriz Camaño Schettini - UFRGS

Orientadora

Prof. Dr. Jorge Hugo Silvestrini - PUCRS

Coorientador

Prof. Dr. Eric Lamballais - Université de Poitiers

Examinador

Prof. Dr. Leandro Conceição Pinto - UFSM

Examinador

Prof. Dr. Rodrigo Cauduro Dias de Paiva - UFRGS

Examinador

Dedico este trabalho aos pesquisadores sinceros.

Aqueles que respeitam o trabalho alheio ao aceitar a limitação do próprio,

Aqueles que entendem a importância do tempo de amadurecimento das ideias e do ser,

Aqueles que, mesmo com uma pesquisa própria, amparam o grupo em que trabalham,

e, por fim,

Aqueles que mesmo enfrentando o desconhecido, erguem a cabeça.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha família, pelo o apoio incondicional que sempre me manteve tranquilo, independente dos problemas por vir.

Aos novos e velhos amigos, pela a compreensão e, muitas vezes, importantes discussões sobre a pesquisa ou, "simplesmente", sobre a vida.

Ao Instituto de Pesquisas Hidráulicas e à UFRGS, por oferecerem a possibilidade de realizar a minha pesquisa, fornecendo todos os meios para o seu bom desenvolvimento.

Ao Núcleo de Estudos em Transição e Turbulência, onde passei a maior parte do tempo dos meus últimos 6 anos em Porto Alegre. Aos amigos (disfarçados de colegas) que sempre estiveram dispostos a desenvolver as tantas e tão importantes discussões sobre o amplo tema de Mecânica dos Fluidos Computacional.

Ao apoio do Núcleo Avançado de Computação de Alto Desempenho (NACAD) do Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia (COPPE) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), que possibilitaram o desenvolvimento desta pesquisa ao fornecer o suporte do supercomputador Lobo Carneiro.

Ao CNPq, por fornecer o auxílio financeiro pessoal e para a pesquisa, ambos essenciais, e, assim como a CAPES, fornece apoio a todos os estudantes de Pós-Graduação, mesmo os que não recebem o auxílio financeiro direto.

À Professora Edith Beatriz Camaño Schettini que abriu as portas para este tema tão fascinante que é o da mecânica dos fluidos, possibilitando o meu desenvolvimento científico para além do que eu imaginava ser capaz.

Ao Professor Eric Lamballais, por toda ajuda em me estabelecer na cidade Poitiers e as inúmeras discussões extremamente relevantes.

RESUMO

A simulação numérica de escoamento tem se desenvolvido em diferentes aspectos para melhorar sua exatidão e se aproximar cada vez mais da representação de fenômenos reais. O desenvolvimento científico sobre escoamentos turbulentos multifásicos dependem da simulação numérica, onde o custo computacional destas ainda é um fator determinante, principalmente quando se visa resultados mais precisos. Uma das grandes dificuldades é que códigos numéricos de alta ordem, utilizados para simular escoamentos bifásicos, produzem erros de dispersão numérica presentes principalmente na interface, já que nesta posição se apresenta uma descontinuidade nas propriedades físicas dos fluidos envolvidos. O presente trabalho tem o objetivo de propor uma formulação de alta precisão para escoamentos bifásicos. Para isso, realiza-se modificações em um código já existente, denominado *Incompact3d* que possui a possibilidade de paralelização para até 100.000 núcleos computacionais, utilizando uma decomposição 2D. Entre estas modificações destacam-se a implementação de uma nova formulação do método Level Set, além de pequenas modificações nas equações de Navier-Stokes, como a adição do termo de gravidade, a segregação do termo de difusividade e a adição de um termo referente a força de tensão superficial. Ainda propõem-se uma nova consideração do termo de pressão, que é separado em pressão não hidrostática e pressão hidrostática. Diversos testes de verificação e validação foram realizados, apresentando a capacidade de se realizar simulações numéricas de alta ordem para escoamentos bifásicos. Com esta metodologia, foi identificar características de fenômenos turbulentos bifásicos.

Palavras-chave: Simulação Numérica Direta, Escoamentos bifásicos, Método Level Set.

ABSTRACT

Flow numerical simulation has been developed in different ways to improve its results accuracy and have a better approximation to real phenomenon. To scientific development turbulent two-phase flow depends of numerical simulation, where computational cost is an important factor, mainly when accurate results are required. High order two-phase flow codes issue is that they produce numerical dispersion errors that are amplified with the presence of interface, since in its position exist physical proprieties discontinuity. This research main objective is to propose a high precision formulation to two-phase flow. For that, we modified *Incompact3d* code that has a 2D decomposition making parallelized calculation up to 100.000 computational cores. Some modifications are the implementation of a new Level Set Method formulation; some minor Navier-Stokes equation modifications as the addition of gravity term; the segregation of diffusive term; and the addition of surface tension forces. We also proposed a new pressure term consideration where we separate it in hydrostatic and non-hydrostatic pressure. Many verification and validation tests where developed presenting the ability to perform high order numerical simulations for two-phase flows. Also it was possible to identify multiphase turbulent structures in the phenomena simulated.

Keywords: Direct Numerical Simulation, Two-phase flow, Level Set Method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

1.1	Esquerda: Obra de Leonardo da Vinci, O Dilúvio, Direita: Obra de Vincent van Gogh, A Noite Estrelada. Fonte: pt.wahooart.com (2018)[10]	2
2.1	Representação de escoamento com: a) duas interfaces e três fases, b) duas interfaces e duas fases.	6
2.2	Interface líquido-gás. A velocidade tangencial é contínua, porém a velocidade normal pode ser descontínua.	6
2.3	Seção transversal do escoamento com superfície livre para o método de rastreamento de interface.	11
2.4	Interface de dois fluidos a) interface verdadeira, b) definição arbitrária da posição da fração de volume após o cálculo de C pela equação 2.11.	15
2.5	Reconstrução da interface em duas dimensões para o método <i>VOF</i> : a) Interface verdadeira, b) Método <i>SLIC</i> c) Método Hirt and Nichols d) Método <i>PLIC</i> (TRYGGVASON et al., 2011[93]).	15
2.6	Interface de dois fluidos a) interface original, b) isolinhas de ϕ do método <i>Level Set</i>	16
2.7	Interface de dois fluidos: a) interface original, b) interface representada por meio de pontos interconectado no método <i>Front Tracking</i>	19
2.8	Domínio computacional é discretizado por uma malha regular, cartesiana e estacionária. A representação da interface é representada por uma outra malha não estruturada e triangular (Unverdi e Tryggvason, 1992 [94]).	20
2.9	Advecção de uma variável qualquer f com um esquema <i>upwind</i> de primeira ordem, caracterizando o erro de dissipação.	24
2.10	Advecção de uma variável qualquer f com um esquema centrado de segunda ordem, caracterizando o erro de dispersão.	24
2.11	Número de onda modificado em função do número de onda para esquemas centrados, com coeficientes seguindo: EC2: $a = 1$; EC4: $a = 4/3$ e $b = -1/3$; IC4: $\alpha = 1/4$ e $a = 3/2$; EC6: $a = 3/2$, $b = -3/5$ e $c = 1/10$; IC6: $\alpha = 1/3$, $a = 14/9$ e $b = 1/9$. As constantes não apresentadas para cada esquema são nulas.	27
2.12	Número de onda modificado segundo função do número de onda para esquemas centrados. Os coeficientes são os mesmos do que para a primeira derivada, sem ser os dos esquemas implícitos em que: IC4, $\alpha = 1/10$ e $a = 6/5$; IC6, $\alpha = 2/11$, $a = 12/11$ e $b = 3/11$	28
2.13	Espectro do número de onda modificado para diversos operadores de derivada primeira (adaptado de Nagarajan et al., 2013[60]).	28

2.14	Erro de dispersão em função do número de onda para esquemas centrados, com coeficientes seguindo: EC2: $a = 1$; EC4: $a = 4/3$ e $b = -1/3$; IC4: $\alpha = 1/4$ e $a = 3/2$; EC6: $a = 3/2$, $b = -3/5$ e $c = 1/10$; IC6: $\alpha = 1/3$, $a = 14/9$ e $b = 1/9$.	31
2.15	Erro de dissipação em função do número de onda segundo para esquemas centrados. Para os esquemas EC2, EC4 e EC6, os coeficientes utilizados são os mesmo do que os da primeira derivada e para: IC4: $\alpha = 1/10$ e $a = 6/5$; IC6: $\alpha = 2/11$, $a = 12/11$ e $b = 3/11$.	31
2.16	Diagramas de estabilidade para os esquemas Euler explícito e Adams-Bashforth segunda ordem; “○” representa o valor máximo de velocidade e viscosidade de um fenômeno hipotético e “⊗” representa a correção da posição deste mesmo fenômeno no diagrama causada pelo uso de um esquema numérico que provoca erros de dispersão e dissipação. A simulação passou a ser estável tanto para o esquema de Euler explícito quanto para o de Adams-Bashforth	34
2.17	Esquema do número de onda representando as escalas de turbulência.	39
2.18	Diagrama do processo de cascada de energia em uma turbulência totalmente desenvolvida. Adaptado de Puhales et al. (2015)[71].	39
2.19	Estimativa de comportamento da profundidade (Y), velocidade (U), declividade (S_0), Número de Reynolds (Re) e resistência (Ω) em função da escala espacial (largura) para canais e rios. Adaptado de Dingman (2009)[14].	40
3.1	Representação da variação das pressões (p e Π) com a profundidade z ; a) interface com espessura nula, b) interface com espessura significativa.	47
3.2	Interface de dois fluidos a) interface original, b) isolinhas de ϕ do método <i>Level Set</i> .	50
3.3	Exemplo de Função Heaviside e delta de Dirac com $\delta = 3$ e $\Delta_c = 0,01$.	51
3.4	Representação dos esqueletos pertencentes a uma interface.	52
4.1	Fluxograma do código <i>Incompact3d-LS</i> .	57
4.2	Localização em que as variáveis são calculadas na malha.	58
4.3	Exemplo de aplicação da hiperviscosidade para o <i>Incompact3d</i> . 6CCSD2 significa: esquema compacto centrado subdissipativo de sexta ordem, 6CCVD2 significa: esquema compacto centrado com dissipação variada de sexta ordem (representando o uso da hiperviscosidade) e <i>Exact</i> é a solução exata da equação de convecção difusão 2.32 [43].	61
4.4	Condições de contorno para o caso de deslizamento livre; à esquerda, uma função par e, à direita, uma função ímpar.	66
4.5	Condição inicial do teste de estabilidade da pressão. A linha branca representa a interface entre os fluidos.	71
4.6	Campo de pressões em a) $t = 0.004s$; b) $t = 0.005s$	72
5.1	Campo de velocidade iniciais. A interface é representada pela circunferência em vermelho.	82

5.2	Campo de $ \nabla\phi $ para: a) malha de 64 em $t \approx 0,5s$; b) malha de 128 em $t \approx 0,8s$; e c) malha de 256 em $t = 1,0s$. A linha branca representa a solução numérica e a linha preta representa a solução analítica da interface.	84
5.3	Localização da interface (linha vermelha) e campo de velocidade inicial.	85
5.4	Caso do Vórtice Único: Campo de $ \nabla\phi $ da simulação com Malha 3 para a) <i>Standard</i> com $\Delta t \approx 0,45$, b) <i>CompactLSM</i> com $\Delta t \approx 0,45$, c) <i>Standard</i> com $\Delta t \approx 0,8$ e d) <i>CompactLSM</i> com $\Delta t \approx 0,8$. A linha preta representa a $\phi = 0$	87
5.5	Relação entre a discretização espacial e curvatura máxima da superfície $\phi = 0$. Regressão potencial com $R^2 = 0.99$	88
5.6	Campo de magnitude de velocidade e superfície livre para o caso MMS.	90
5.7	Teste de convergência de malha utilizando o MMS, considerando as velocidades u, v e w	92
5.8	Corte no domínio representando a magnitude do erro das velocidades.	92
5.9	Teste de convergência de malha utilizando o MMS, desconsiderando-se as células dos contornos que possuem menor ordem.	93
5.10	Domínio de simulação; a) visualização tridimensional do domínio e da condição inicial da interface, b) visualização bidimensional do domínio no plano $y = 10m$, enfatizando a variação da interface no instante inicial de tempo.	94
5.11	Média temporal dos erros de velocidades e de desnível para diferentes espessuras da interface para o tempo de 5 segundos.	96
5.12	Comparação entre as magnitudes das velocidades para o tempo de 5s, para valores de a) $\delta = 6$, b) $\delta = 15$ e c) $\delta = 18$	97
5.13	Comparação entre os desníveis das simulações com o resultado teórico para o caso de seiche em uma bacia fechada.	98
5.14	Domínio de simulação para o caso: ondas de Stokes, em que ondas de Stokes de diferentes ordens são produzidas no lado esquerdo do domínio	99
5.15	Hodógrafas da simulação e analítica para Stokes I (esquerda) e Stokes II (direita) a profundidade de a) $z = 0,10m$, b) $z = 0,50m$ e c) $z = 0,90m$	100
5.16	Isosuperfície de $Q = 100s^{-1}$ para caso de Stokes II em $t = 7s$, com detalhes da interface.	102
5.17	Isosuperfície de $Q = 100s^{-1}$ para caso de Stokes II em $t = 7s$, com detalhes de velocidade.	103
5.18	Domínio de simulação e condição inicial para o caso: queda de gota	104
5.19	Caso da queda de gota com $h_l = 7mm$. Comparação entre a estrutura formada no tempo $t = 55$ ms; a) caso experimental [52]; b) $\sigma = 0,032N/m$; c) $\sigma = 0,052N/m$; d) $\sigma = 0,072N/m$ e e) $\sigma = 0,082N/m$	105
5.20	Resultados experimentais [52] e numéricos para a lâmina de 2mm (esquerda) e 7mm (direita).	106

5.21	Isosuperfície de $Q = 1.000s^{-1}$ para o caso de queda de gota no recipiente de $7mm$ de espessura de lâmina em $t = 25ms$. Representação: a) unicamente a superfície livre; b) do corte em $x = 25mm$ da superfície livre e da isosuperfície de Q ; c) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente no ar e d) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente na água.	107
5.22	Isosuperfície de $Q = 1.000s^{-1}$ para o caso de queda de gota no recipiente de $7mm$ de espessura de lâmina em $t = 55ms$. Representação: a) unicamente a superfície livre; b) do corte em $x = 25mm$ da superfície livre e da isosuperfície de Q ; c) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente no ar e d) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente na água.	108
5.23	Domínio de simulação para o caso: quebra de barragem	109
5.24	Comparação entre a posição da frente ao longo do tempo do experimento [53] com os casos numéricos para diferentes discretizações: $n_a = 50$, $n_a = 96$, $n_a = 168$ e $n_a = 192$	110
5.25	Comparação entre a altura da coluna de água no eixo $(x, y) = (0, a/2)$ ao longo do tempo do experimento [53] com os casos numéricos para diferentes discretizações: $n_a = 50$, $n_a = 96$, $n_a = 168$ e $n_a = 192$	111
5.26	Representação da variação da superfície livre (esquerda) e representação da superfície livre com isosuperfícies de critério $Q = 5.000s^{-1}$, para os tempos: a) $0,20s$, b) $0,30s$, c) $0,50s$, d) $0,75s$ e e) $1,00s$	112
5.27	Aproximação visual do domínio na região próxima ao contorno $x = L_x$. Representação da superfície livre com isosuperfícies de critério $Q = 1.000s^{-1}$ para os tempos: a) $0,40s$, b) $0,45s$, c) $0,50s$, d) $0,55s$, e) $0,60s$, f) $0,65s$, g) $0,70s$ e h) $0,75s$	113

LISTA DE TABELAS

2.1	Comparação entre os principais métodos de representação de interface.	21
2.2	Características qualitativas em corpos hídricos naturais produzidas por diversas causas (adaptado de Dingman,2009 [14]).	41
5.1	Casos aplicados e motivações.	81
5.2	Características do cálculo do caso Tensão de Cisalhamento Constante.	83
5.3	Curvatura máxima sem distorção da interface para diferentes tamanhos de malha.	83
5.4	Resultados para $n_x = n_y = 256$	83
5.5	Características computacionais do Vórtice Único.	86
5.6	Resultados de curvatura máxima para o caso Vórtice Único.	86
5.7	Características computacionais do MMS.	91
5.8	Valores médios temporais dos erros para diferentes quantidades de termos de pressão sobreimplícita.	96
5.9	Valores médios temporais dos erros para diferentes discretizações.	98
5.10	Erros das hódogrfas simuladas em comparação com as analíticas.	101
5.11	Características computacionais do MMS.	104
5.12	Características computacionais do caso Quebra de Barragem.	109

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Amplitude da onda	(m)
a	Coefficiente dos esquemas compactos centrados	($-$)
b	Coefficiente dos esquemas compactos centrados	($-$)
Be	Largura da banda de frequencias	($-$)
c	Velocidade ou celeridade / Coeficiente dos esquemas compactos centrados	($m^1 s^{-1} / -$)
C	Função cor	($-$)
D	Domínio	($-$)
E_{disp}	Erro de dispersão numérica	($-$)
E_{diss}	Erro de dissipação numérica	($-$)
f	Função genérica	($-$)
fr	Frequência de oscilação	(s^{-1})
\hat{f}	Função genérica convertida para o campo espectral	($-$)
g	Aceleração da gravidade	($m^1 s^{-2}$)
h	Altura do escoamento	(m)
I	Função Heaviside suave	($-$)
k	Número de onda	(m^{-1})
k'	Número de onda modificado	(m^{-1})
k''	Número de onda modificado quadrado	(m^{-2})
ℓ_k	Escala de comprimento de Kolmogorov	(s)
\mathbf{n}	Vetor normal	($-$)
$O(\Delta x^n)$	Erro da aproximação de primeira ordem da Série de Taylor de ordem n	($-$)
p	Pressão total	(Pa)
p_n	Pressão hidrostática	(Pa)
p_{nh}	Pressão não hidrostática	(Pa)
Q	Critério Q	(s^{-1})
Re	Número de Reynolds	($-$)
sgn	Função sinal	($-$)
To	Tempo de observação	(s)
t	Tempo	(s)
t_k	Escala de tempo de Kolmogorov	(s)
u	Velocidade referente ao eixo x	($m^1 s^{-1}$)
u_i ou u_j	Velocidade em notação tensorial	($m^1 s^{-1}$)
\hat{u}	Velocidade convertida para o campo espectral	($m^1 s^{-1}$)

\tilde{u} ou u^*	Velocidade não corrigida	$(m^1 s^{-1})$
V	Volume de um dos fluidos calculado	(m^3)
V_0	Volume inicial de um dos fluidos calculado	(m^3)
v	Velocidade referente ao eixo y	$(m^1 s^{-1})$
\mathbf{v}	Vetor velocidade	$(m^1 s^{-1})$
w	Velocidade referente ao eixo z	$(m^1 s^{-1})$
x	Coordenada horizontal longitudinal	(m)
x_i ou x_j	Coordenada em notação tensorial	(m)
\vec{x}	Vetor posição a ser analisado	(m)
\vec{x}_I	Vetor posição da interface	(m)
y	Coordenada horizontal transversal	(m)
z	Coordenada vertical do plano cartesiano	(m)
α	Coeficiente dos esquemas compactos centrados	$(-)$
β	Coeficiente dos esquemas compactos centrados	$(-)$
δ	Metade do número de células para representar a interface	$(-)$
δ_S	Delta de Dirac	$(-)$
Δ_c	Discretização espacial característica	(m)
ε	Dissipação turbulenta	$(-)$
κ	Curvatura	(m^{-1})
λ	Comprimento de onda	(m)
μ	Viscosidade dinâmica	$(N^1 s^1 m^{-2})$
μ_1	Viscosidade dinâmica de um dos fluidos a ser considerado	$(N^1 s^1 m^{-2})$
μ_2	Viscosidade dinâmica de outro fluido a ser considerado	$(N^1 s^1 m^{-2})$
μ_Γ	Relação entre viscosidades dinâmicas dos dois fluidos	$(-)$
η	Desnível da superfície livre / Variável física genérica	$(m) / (---)$
ϕ	Função distância com sinal	(m)
ϕ_0	Função distância com sinal não reinicializada	(m)
ρ	Massa específica	$(kg^1 m^{-3})$
ρ_1	Massa específica de um dos fluidos a ser considerado	$(kg^1 m^{-3})$
ρ_2	Massa específica de outro fluido a ser considerado	$(kg^1 m^{-3})$
ρ_Γ	Relação entre massas específicas dos dois fluidos	$(-)$
ν	Viscosidade cinemática	$(m^2 s^{-1})$
Π	Pressão total normalizada	$(m^2 s^{-2})$
Π_n	Pressão hidrostática normalizada	$(m^2 s^{-2})$
Π_{nh}	Pressão não hidrostática normalizada	$(m^2 s^{-2})$
$\hat{\Pi}$	Pressão não hidrostática normalizada convertida para o campo espectral	$(m^2 s^{-2})$
σ	Coeficiente de tensão superficial	(Nm^{-1})
τ	Passo de tempo de reinicialização	(s)
ι	Unidade imaginária	$(-)$

Θ_{xx}	Função de densidade autoespectral	(-)
---------------	-----------------------------------	-----

Índices

i	Referente ao eixo x ou notação indicial
j	Referente ao eixo y ou notação indicial
k	Referente ao eixo z
m	Referente ao número de termos do método de sobre pressão
n	Referente ao tempo
Γ	Referente à condição de salto através da interface

Siglas

AB	Adams-Bashforth
DNS	Direct Numerical Simulation / Simulação Numérica Direta
EC	Explícito Centrado
ENO	Essentially Non-Oscillatory
IC	Implícito Centrado
ILES	Implicit Large Eddy Simulation / Simulação de Grande Escala Implícita
LES	Large Eddy Simulation / Simulação de Grande Escala
MAC	Marker and Cell / Marcador e célula
MMS	Method of Manufactured Solution / Método da Solução Manufacturada
PLIC	Piecewise Linear Interpolation Calculation
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes / Navier-Stokes média de Reynolds
RK	Runge-Kutta
SLIC	Simple Linear Interpolation Calculation
SVV	Spectral Vanishing Viscosity
TVD	Time Variation Diminishing
VOF	Volume of Fluid / Volume de Fluido
WENO	Weighted Essentially Non-Oscillatory

SUMÁRIO

Lista de Ilustrações	iv
Lista de Tabelas	viii
Lista de Símbolos	ix
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	3
1.2 Estrutura do Texto	3
2 Revisão Bibliográfica	5
2.1 escoamentos Bifásicos	5
2.1.1 Noções gerais de simulação de escoamentos com interfaces	7
2.1.2 Métodos Numéricos para Escoamentos com Superfície Livre	8
2.1.3 Métodos de rastreamento de interface	9
2.1.4 Métodos de captura de interface	12
2.1.5 Métodos híbridos - Front Tracking	18
2.1.6 Resumo sobre os Métodos de Representação de Interface	20
2.1.7 Tensão Superficial	21
2.2 Erros numéricos: dispersão e dissipação numérica	23
2.2.1 Análise de Fourier dos esquemas em diferenças finitas	24
2.2.2 Erros de dispersão e dissipação	27
2.2.3 Hiperviscosidade	32
2.2.4 Erros de métodos de alta ordem em escoamentos bifásicos	33
2.2.5 Instabilidade Numérica	33
2.3 Turbulência	34
2.3.1 Espectro e escalas da Turbulência	36
2.3.2 Turbulência em escoamentos com superfície livre	38
3 Metodologia Matemática	43
3.1 Equação da quantidade de movimento e da continuidade	43
3.1.1 Equação de Poisson e termo de pressão	44
3.1.2 Termos Advectivos	46
3.1.3 Termos Difusivos	46
3.1.4 Pressão Hidrostática	47

3.1.5	Tensão Superficial	48
3.2	Interface - Método <i>Level Set</i>	48
3.2.1	Função da Distância	49
3.2.2	Advecção da interface e propriedades físicas	50
3.2.3	Reinicialização da função distância	51
3.2.4	Condições de contorno para ϕ	53
3.2.5	Esquemas compactos para o método <i>Level Set</i> (<i>CompactLSM</i>)	54
3.3	Resumo da Metodologia Matemática	54
4	Resolução Numérica	56
4.1	<i>Incompact3d-LS</i>	56
4.2	Equações de momentum	57
4.2.1	Discretização espacial	58
4.2.2	Integração no tempo	68
4.2.3	Método de Projeção, pressão sobre-implícita e correção de velocidades	69
4.2.4	Pressão Hidrostática	72
4.3	Interface - Método <i>Level Set</i>	74
4.3.1	Discretização espacial - <i>CompactLSM</i>	75
4.3.2	Avanço no tempo	76
4.3.3	Propriedades físicas e geométricas	77
5	Aplicações e Resultados	80
5.1	Verificação - <i>Compact Level Set Method</i>	81
5.1.1	Tensão de Cisalhamento Constante	82
5.1.2	Vórtice Único	85
5.2	Verificação - <i>Incompact3d-LS</i>	88
5.2.1	Soluções Manufaturadas	89
5.3	Validação - <i>Incompact3d-LS</i>	93
5.3.1	Efeito de seiche 3D	93
5.3.2	Ondas de Stokes	98
5.3.3	Queda de Gota	102
5.3.4	Quebra de Barragem	108
6	Conclusões e Recomendações	114
A	Discretização espacial - WENO	118
A.1	Convecção Pura	119
A.2	Reinicialização e Correção de Volume	120
B	Ondas de Stokes e Camada Esponja	121
B.1	Ondas de Stokes I e Stokes II	121
B.2	Camada Esponja	122

Referências Bibliográficas

123

1 INTRODUÇÃO

A simulação numérica de escoamentos de fluidos tem se desenvolvido em diferentes aspectos com a intenção de melhorar sua exatidão e se aproximar cada vez mais dos fenômenos reais. O desenvolvimento científico e a aplicação técnica da modelagem de escoamentos multifásicos tem se ampliado e estão em evidência. Isto ocorre porque diversos fenômenos de interesse estão intimamente envolvidos com o tema de escoamentos multifásicos. Desde desastres naturais, onde se tem fluxos de detritos e inundações bruscas, até procedimentos industriais de resfriamento por jatos ou aeração de algum líquido, entre outros diversos fenômenos e procedimentos, são exemplos envolvendo fluidos multifásicos.

Pesquisas importantes para a ciência e para a indústria estão sendo desenvolvidas no âmbito da simulação numérica de fluidos multifásicos, como na representação numérica utilizando a Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation* - DNS) do ressalto hidráulico ([58]), na interação fluido-estrutura ([99], [25], [54]), na simulação de bolhas ([97], [85]), entre outros. Esta importância se dá porque o estudo sobre escoamentos multifásicos são essenciais para o entendimento da natureza, *i.e.* desenvolvimento científico. Já, na indústria, a simulação numérica auxilia no aperfeiçoamento dos processos produtivos, eficiência do produto em questão, além de contribuir na criação de novos produtos. Uma nova tendência é o desenvolvido na área do entretenimento, ao criar efeitos especiais para a indústria cinematográfica e jogos.

Além disso, a turbulência no escoamento de fluidos fascina a humanidade a séculos, mesmo sendo um fenômeno rotineiro desde os primórdios da humanidade. Diversos estudiosos e artistas expressaram o seu modo de ver e compreender a turbulência, muitas vezes apreciada a partir da superfície livre de um corpo hídrico. O renascentista Leonardo da Vinci (1452-1519) e o pós-impressionista Van Gogh acrescentaram em diversas de suas obras aspectos da turbulência como turbilhões (figura 1.1). A importância dos escoamentos multifásico, assim como da turbulência, vai muito além da arte, pois o desenvolvimento de toda a humanidade sempre

dependeu destes fenômenos que são partes indispensáveis da natureza. Não é muita ousadia afirmar que muitos organismos vivos são complexos sistemas multifásicos.



Figura 1.1: Esquerda: Obra de Leonardo da Vinci, O Dilúvio, Direita: Obra de Vincent van Gogh, A Noite Estrelada. Fonte: pt.wahooart.com (2018)[10]

O desenvolvimento científico dos conhecimentos sobre escoamentos turbulentos multifásicos dependem amplamente da simulação numérica aliada aos experimentos físicos. Os experimentos físicos fornecem o comportamento real do fenômeno para condições específicas, já os experimentos numéricos nos permitem modelar fenômenos difíceis de serem simulados fisicamente, além de que os dados resultantes são de fácil aquisição. De qualquer forma, os experimentos numéricos necessitam serem verificados e validados, processos nos quais é importante que se utilize resultados provenientes de experimentos físicos.

Na mecânica dos fluidos computacional, os escoamentos com superfície livre são muitas vezes considerados como um caso específico de fluidos multifásicos imiscíveis. Nos anos 60, o primeiro código computacional que representava a superfície livre resolvendo as equações de Navier-Stokes foi o Modelo Maker-and-Cell (MAC), de Harlow e Welch, apresentado em 1965 [26], com a aplicação em propagação de ondas provenientes de ruptura de barragem. Este foi o primeiro grande passo para o aperfeiçoamento dos métodos matemáticos relacionados à escoamentos multifásicos, abrindo caminho para o desenvolvimento desta área de pesquisa.

Nos dias de hoje, depois de cinco décadas, os modelos numéricos passaram a descrever fenômenos com os mais diversos tipos e escalas espaciais, desde a dinâmica de gotas [81] [84], pequenas ondas [40], fluxos de maré [21], até tsunamis [19]. Nos últimos anos, escoamentos turbulentos com superfície livre também estão sendo desenvolvidos numericamente e simulados

como no caso de escoamento de fluidos com objetos móveis [56], sobre obstáculos e em rios naturais com sinuosidade [38].

Ainda que estudos com DNS estejam sendo produzidos no âmbito bifásico, não foram encontrados, na literatura pesquisada, códigos multifásicos de alta ordem (acima de segunda ordem). Isto ocorre porque normalmente códigos de alta ordem produzem erros de dispersão presentes principalmente na interface, já que nesta posição existe uma descontinuidade nas propriedades físicas dos fluidos envolvidos, como a massa específica e a viscosidade. Códigos de alta ordem são utilizados na simulação da turbulência para que se tenha uma maior precisão das menores escalas.

Para representar a complexidade da turbulência em escoamentos com superfície livre, torna-se necessário o desenvolvimento de novos códigos e métodos numéricos que permitam realizar uma DNS com menor custo, ainda prezando pela exatidão dos cálculos.

1.1 OBJETIVOS

Esta pesquisa tem como objetivo principal propor uma formulação de alta precisão para escoamentos bifásicos.

Para atingir este objetivo, será necessário:

- Desenvolver e avaliar o método numérico de alta ordem que modele a interface entre dois fluidos imiscíveis;
- Adaptar o código de escoamentos com esquemas de alta ordem para que seja possível de representar uma brusca variação nas propriedades físicas;
- Verificar e validar o código com as modificações que possibilitem a simulação de escoamentos com a condição bifásica.

1.2 ESTRUTURA DO TEXTO

Este trabalho possui seis capítulos. O segundo capítulo se refere à revisão bibliográfica, que fornece os subsídios para o entendimento da problemática da simulação de escoamentos bifásicos. Também, são apresentados tópicos sobre erros numéricos e escoamentos turbulentos.

No terceiro capítulo, denominado Metodologia Matemática, são demonstrados os procedimentos matemáticos adotados e propostos para representar escoamentos bifásicos e é explicitado o método de representação da interface entre fluidos imiscíveis.

O capítulo quatro consiste em representar a resolução numérica dos modelos matemáticos adotados no capítulo anterior. Ainda neste capítulo, são apresentadas as condições iniciais e de contorno que podem ser utilizadas na formulação.

No quinto capítulo, "Aplicações e Resultados", são apresentados casos de verificações do método que modela a superfície livre. Ainda, também são expostas verificações e validações do código desenvolvido por este trabalho, a fim de demonstrar sua confiabilidade.

No sexto e último capítulo é exposta uma breve compilação dos resultados, finalizando o trabalho com as conclusões, assim como recomendações para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta uma revisão conceitual e numérica de escoamentos bifásicos, em que são apresentados os diferentes métodos utilizados para a representação da interface. Também são apresentados itens sobre erros de dispersão e dissipação de esquemas numéricos, essenciais para a compreensão da problemática referente ao truncamento da série de Taylor. Por fim, conceitos básicos de turbulência são apresentados com enfoque em escoamentos com superfície livre.

2.1 ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

Os escoamentos bifásicos são um caso particular dos escoamentos multifásicos, quando apenas duas fases estão envolvidas, ou seja, dois diferentes estados físicos da matéria. As diferentes fases podem ser facilmente identificadas, pois os fluidos são imiscíveis. A mudança abrupta da massa específica entre diferentes fluidos cria uma descontinuidade, e a posição desta descontinuidade é referida como interface ou superfície. Sendo assim, cada mudança de fase requer pelo menos uma interface. De qualquer maneira, um escoamento bifásico também pode possuir mais de uma interface, como no caso da formação de gotas em um escoamento (figura 2.1). A mesma metodologia utilizada para calcular escoamentos multifásicos, pode ser utilizada para calcular escoamentos monofásicos com dois ou mais fluidos imiscíveis.

Panton (2013)[67] discute sobre as propriedades da interface: "Nós assumimos que uma interface é uma superfície com espessura nula, que não possui massa, momentum ou energia. Através da interface, se assume que a massa específica “salte” proporcionando a descontinuidade. Por outro lado, a temperatura e a velocidade tangencial são assumidas como sendo contínuas. Isto se justifica porque moléculas dos dois lados da interface estão constantemente se colidindo e mantendo o equilíbrio com a camada da superfície (figura 2.2). A velocidade perpendicular à interface é descontínua somente se existir transferência de massa através da

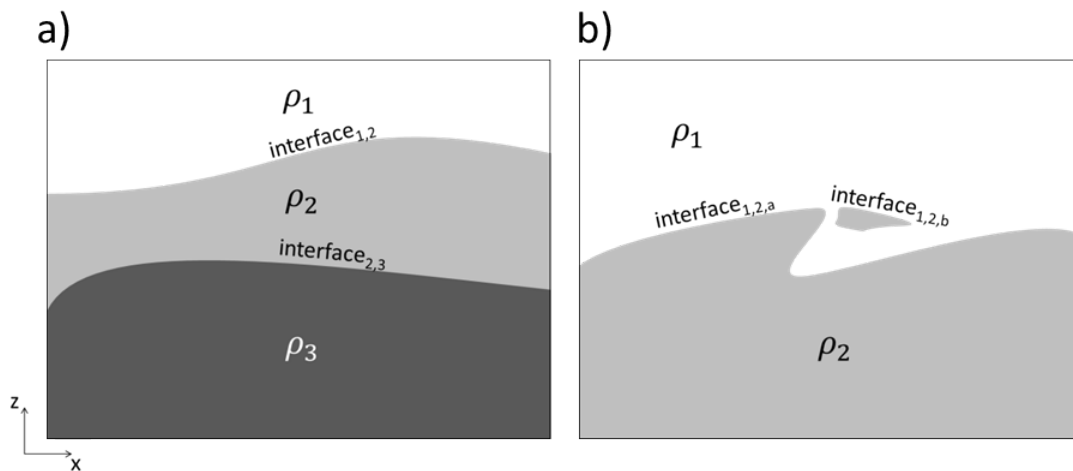


Figura 2.1: Representação de escoamento com: a) duas interfaces e três fases, b) duas interfaces e duas fases.

superfície. Esta situação é ilustrada pela consideração da evaporação do líquido".

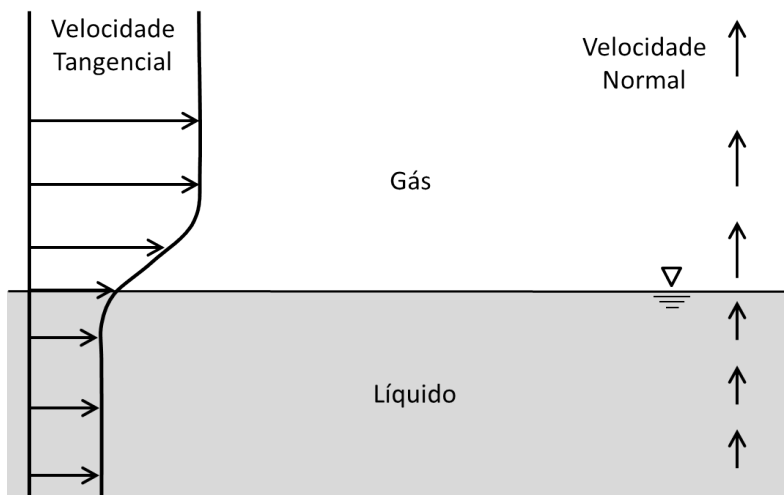


Figura 2.2: Interface líquido-gás. A velocidade tangencial é contínua, porém a velocidade normal pode ser descontínua.

De acordo com Tryggvason et al. (2011)[93], quando esta interface é denominada superfície livre, supõe-se que os cálculos referentes a um dos fluidos é simplificado e a condição de salto, quando no domínio se passa de uma fase para outra, torna-se a própria condição de contorno do domínio. Sendo assim, escoamentos com superfície livre são casos específicos de escoamentos bifásicos. A equação da continuidade geral é dada por

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

Admitindo a hipótese de que o fluido é incompressível, temos que a equação da Continuidade (2.1) é simplificada para

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.2)$$

Esta simplificação da equação da Continuidade pode ser considerada, assumindo-se que não existe variação de volume no volume de controle. Corroborando com a mesma ideia, Tryggvason et al. (2011) [93] mencionam que não existe a necessidade da massa específica ser constante no espaço para que um fluido seja incompressível. A densidade da partícula material pode variar de uma partícula para a outra, mas a massa específica de cada partícula deve ser constante, permitindo assim a realização desta simplificação da equação da Continuidade.

2.1.1 NOÇÕES GERAIS DE SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS COM INTERFACES

A variação temporal da interface (e consequentemente espacial), normalmente é considerada a partir de uma equação de advecção pura. Em geral, essa equação de advecção não é aplicada diretamente às propriedades físicas dos fluidos e, sim, indiretamente. Assim é possível de representar fluidos imiscíveis, mesmo existindo erro de dissipação numérica referente a esta equação.

Hirt e Nichols (1981)[31] indicam três considerações que deve se atentar no tratamento da interface entre dois fluidos: (1) sua representação discreta, (2) sua evolução no tempo, e (3) a maneira com que as condições de contorno são impostas nela.

Ao incorporar a interface em células computacionais é necessário desenvolver uma maneira de descrever numericamente a localização e o formato do seu contorno. Ainda, o algoritmo deve calcular a evolução desta interface no tempo. Estas etapas são aplicadas exclusivamente pelos métodos do cálculo da advecção da função marcadora (ou dos marcadores) que representa ou define a posição da interface.

Finalmente, na interface se deve impor as condições de salto desejadas nas células computacionais próximas desta interface. Estas condições de saltos são diferentes para cada tipo de problema e muitas vezes independem do método de advecção da interface adotado.

2.1.2 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA ESCOAMENTOS COM SUPERFÍCIE LIVRE

Diversos métodos são desenvolvidos e utilizados para calcular a posição e o formato da interface em função do modo com que a interface é representada no domínio. Ferziger e Peric (2002)[15] classificam os métodos para superfície livre nos seguintes grandes grupos:

- **Métodos de rastreamento de interface** (*interface-tracking method*): Tratam a interface como superfície livre, sendo uma condição do contorno do próprio domínio. Neste tipo de método, são utilizadas grades encaixadas no contorno e seus tamanhos recalculados a cada passo de tempo para seguir (ou rastrear) o movimento da interface. Assim, estes são métodos lagrangianos para representar a interface. Estes métodos são utilizados para cálculos de escoamentos monofásicos, como no equacionamento de águas rasas.
- **Métodos de captura da interface** (*interface-capturing method*): A interface está definida dentro do próprio domínio, e não como o limite do domínio. Estes métodos utilizam uma função marcadora para representar a interface que se move por advecção. Neste grupo, a interface geralmente é representada por métodos eulerianos. Estes métodos podem representar escoamentos com diversas fases em um mesmo domínio.
- **Métodos híbridos ou de rastreamento de frente** (*hybrid or front-tracking method*): Utilizam marcadores, com uma malha própria, para representar a localização da interface dentro do domínio computacional dos fluidos. Para isso, a transição de informação de uma malha para outra é feita através de uma função marcadora. Também são denominados de métodos híbridos por possuírem características dos grupos anteriores. Este grupo é formado, predominantemente, por métodos lagrangianos e são utilizados para se representar mais de uma fase no domínio computacional.

Ainda, pode-se acrescentar a esta classificação dois novos grupos:

- **Métodos sem malha** (*meshless methods*) [49]: Consideram volumes de água como partículas (*Smoothed-Particle Hydrodynamics*). Estes métodos não utilizam as equações clássicas de mecânica dos fluidos e se baseiam em conceitos de movimento de partículas sólidas levando em consideração choques elásticos e inelásticos. Por serem códigos

considerados livres de malhas, possuem uma grande versatilidade na representação da superfície livre. Uma grande desvantagem destes métodos é a dificuldade de calcular fluidos multifásicos, pois mais partículas que representariam outro fluido teriam de ser adicionadas, sendo, assim, este método é mais apropriados para o cálculo de escoamentos com superfície livre, calculando-se apenas uma das fases. Outra desvantagem deste método é o alto custo computacional referente à localização das partículas ao longo do tempo.

- **Métodos de lattice-Boltzmann** [55], [24], [29]: Este tipo de método se baseia nos processos em escalas microscópicas e mesoscópicas para que as propriedades médias macroscópicas obedeçam às premissas desejadas. Por ser um grupo novo, ainda se necessita de mais pesquisas para descrever melhor suas propriedades. Tryggvason et al. (2011)[93] mencionam que já se sabe que estes métodos fornecem resultados com a precisão comparável com os métodos convencionais, mas ainda não se sabe se são mais simples ou mais rápidos do que os outros.

Os dois últimos grupos não se baseiam nas equações de Navier Stokes ou similares, e, mesmo sendo atuais e inovadores, não cabe a este trabalho a discussão destes. A seguir, os três primeiros grupos serão apresentados e seus conceitos desenvolvidos.

2.1.3 MÉTODOS DE RASTREAMENTO DE INTERFACE

Para este grupo, a interface entre os fluidos geralmente é uma superfície livre. Talvez, a equação de Saint-Venant, proposta em 1871 [77], tenha sido o primeiro conjunto de equações para o cálculo de escoamentos com superfície livre, tornando-se hoje em dia amplamente utilizada como um método de rastreamento de interface. Este conjunto de equações são normalmente utilizadas para escoamentos unidimensionais e possuem um termo que representa a profundidade do escoamento, no caso a superfície livre.

Outra categoria são os códigos bidimensionais horizontais, como no caso dos códigos de águas rasas (também denominado de Saint-Venant bidimensional), que representam a superfície livre por meio de uma variável relativa à profundidade do escoamento e, conseqüentemente, a direção vertical não é considerada como uma das dimensões do domínio.

Para casos bidimensionais verticais ou tridimensionais, a profundidade faz parte da discretização do domínio e o contorno superior do domínio representa a superfície livre. A malha que define a face superior do domínio varia com o tempo e com as coordenadas horizontais.

A vantagem deste tipo de método é o baixo custo computacional, já que não existe a necessidade de representar dentro do domínio uma segunda fase, ou seja, todos os pontos de cálculo da simulação representam apenas a fase de interesse e os efeitos de uma outra fase devem ser modelados. Logo, os escoamentos com superfície livre, simulados com estes métodos, são calculados como escoamentos monofásicos levando a desvantagem da dificuldade em representar interfaces complexas com mudanças expressivas de topologia.

Estes métodos são amplamente utilizados para simulações geofísicas com malha suficientemente refinada para representar os movimentos de larga escala. Diversas são as aplicações da modelagem numérica de escoamentos com superfícies livres utilizando o método de rastreamento de interface. Como exemplos, tem-se a dinâmica de lagos [6], correntes produzidas por vento [61], estratificação de corpos hídricos [36], propagação de ondas [40], escoamentos em canais, tsunamis [19] e inundações [75].

EQUACIONAMENTO

Uma das maneiras de se obter uma equação que expresse a variação da superfície livre no tempo é utilizar a equação da Continuidade (3.2) e integrá-la da superfície livre até o fundo, da forma:

$$\int_{-h}^{\eta} \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right] dz = \int_{-h}^{\eta} \frac{\partial u}{\partial x} dz + \int_{-h}^{\eta} \frac{\partial v}{\partial y} dz + \int_{-h}^{\eta} \frac{\partial w}{\partial z} dz = 0, \quad (2.3)$$

em que η é o desnível da superfície livre e h é a altura de lâmina de água desde o fundo até o plano $z = 0$ (figura 2.3). Utilizando a regra de integração de Leibniz, temos, para u e v , que

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{-h}^{\eta} u dz = \int_{-h}^{\eta} \frac{\partial u}{\partial x} dz + u_{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + u_{-h} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (2.4)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial y} \int_{-h}^{\eta} v dz = \int_{-h}^{\eta} \frac{\partial v}{\partial y} dz + v_{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + v_{-h} \frac{\partial h}{\partial y}. \quad (2.5)$$

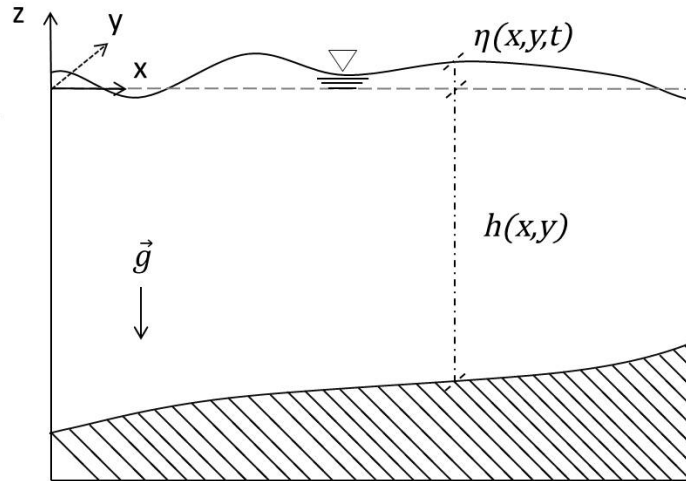


Figura 2.3: Seção transversal do escoamento com superfície livre para o método de rastreamento de interface.

Para w , utilizando uma integração simples, temos que

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_{-h}^{\eta} w dz = \int_{-h}^{\eta} \frac{\partial w}{\partial z} dz = w_{\eta} - w_{-h}. \quad (2.6)$$

Logo, substituindo as Equações 2.4, 2.5 e 2.6 na Equação 2.3, encontramos

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{-h}^{\eta} u dz - u_{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} - u_{-h} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-h}^{\eta} v dz - v_{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} - v_{-h} \frac{\partial h}{\partial y} + w_{\eta} - w_{-h} = 0. \quad (2.7)$$

De acordo com Ferziger e Peric (2002)[15], a condição cinemática deve ser usada quando a diferença de massa específica entre os dois fluidos é grande, como no caso da superfície livre entre água e ar, fazendo com que não ocorra fluxo na direção normal da superfície livre (caso não haja mudança de fase). Assim, a condição cinemática pode ser representada por

$$w_{\eta} = \frac{D\eta}{Dt} = \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \eta}{\partial x} u_{\eta} + \frac{\partial \eta}{\partial y} v_{\eta} \quad e \quad w_{-h} = -\frac{Dh}{Dt} = -\frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial h}{\partial x} u_{-h} - \frac{\partial h}{\partial y} v_{-h}. \quad (2.8)$$

Observa-se que para fundos fixos $\frac{Dh}{Dt} = 0$. Levando em consideração a condição cinemática (eq. 2.8) na equação da Continuidade integrada na profundidade (eq. 2.7), temos finalmente que

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-h}^{\eta} u dz + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-h}^{\eta} v dz = 0. \quad (2.9)$$

A equação 2.9, também denominada de *função altura*, representa a advecção da superfície livre.

O desnível η é função da velocidade vertical (w), pois a taxa de variação do desnível representa a própria velocidade vertical ($\frac{\partial \eta}{\partial t} = w$). Sendo assim, esta equação é do tipo euleriana nas direções horizontais (x,y) e do tipo lagrangiana para a direção vertical (z).

2.1.4 MÉTODOS DE CAPTURA DE INTERFACE

Neste grupo, o domínio de cálculo do escoamento envolve todas as fases interligadas pela(s) interface(s). A interface não é explicitamente rastreada, mas sim é reconstruída a partir dos campos das variáveis. Este procedimento mantém a malha fixa e, assim, a interface sempre estará confinada dentro do próprio domínio.

A vantagem destes métodos é a versatilidade, pois eles são capazes de representar interfaces mais complexas do que o método de rastreamento de interface, como bolhas, gotas [81] [84] e fenômenos como quebra de ondas [9].

A desvantagem destes métodos é o incremento do custo computacional ao se simular uma fase na qual não se tem o principal interesse. Como exemplo, tem-se a simulação de ondas superficiais, nas quais, em muitos casos, o líquido é a única fase de interesse. Entretanto, quando ocorre a quebra da onda, o ar pode se tornar importante na representação do fenômeno.

A posição e o formato da interface são determinados por *marcadores* ou por *funções marcadoras*. Os marcadores são como partículas virtuais, sem massa, que indicam uma posição no domínio em que determinada fase é predominante. As funções marcadoras indicam a posição da interface, e sua evolução no tempo e espaço é determinada aplicando um operador de advecção.

O primeiro método de captura de interface surgiu nos anos sessenta, denominado de *Marker-and-Cell (MAC)*, e foi proposto por Harlow e Welch (1965)[26]. Este esquema introduz partículas sem massa em todo o domínio discreto que definem onde está localizada determinada fase. Os métodos para escoamentos multifásicos foram aperfeiçoados ao longo dos anos e o esquema *MAC* deixou de ser utilizado com expressiva frequência, sendo a precisão do cálculo um dos principais motivos [95]. Assim, o *MAC* deu lugar a métodos como o *Volume of Fluid (VOF)*, o *Level Set*, a método híbrido *Front Tracking* e a outros diversos métodos.

FORMULAÇÃO *ONE-FLUID*

Na implementação de códigos para fluidos bifásicos, existem geralmente duas diferentes aproximações; uma é chamada de *Two-Fluid method* e a outra de *One-Fluid method* ou *Whole-Domain Formulation*. De acordo com Saurel e Abgral (2001) [78], a primeira aproximação assume que cada fase é governada por sua própria combinação de equações diferenciais, dobrando o número de equações a serem resolvidas, se comparadas aos escoamentos sem interface. Levando em consideração o método *One-Fluid*, Lui et al. (2004) [50] afirmam que este tipo de método utiliza apenas um conjunto de equações diferenciais para o movimento do fluido em todo domínio, similar à abordagem sem interface.

Em outras palavras, pode-se resolver as equações nos subdomínios de cada fase separadamente, implementando a condição de salto na interface de forma explícita (Método *Two-Fluid*), ou pode-se calcular as duas fases conjuntamente, como se fossem uma só, e a condição de salto pode ser resolvida implicitamente ou explicitamente (Método *One-Fluid*). A atração por métodos baseados na formulação *One-Fluid* é explicada pelo uso da malha estacionária e por sua simplicidade e eficiência.

Na resolução numérica de escoamento multifásicos, três tipos de problemas ocorrem no tratamento do contorno da interface (HIRT; NICHOLS, 1981) [31]:

- a representação discreta da interface,
- a evolução com o tempo da interface,
- a maneira com que as condições de salto são impostas na interface.

Para a representação discreta, evolução com o tempo da interface e representação da condição de salto, podem ser utilizados métodos como o *VOF*, *Level Set* e *Front tracking*. A seguir é discutido brevemente cada um destes três métodos.

MÉTODO VOF

O método *Volume of Fluid* foi proposto por Hirt e Nichols (1981) [31] e hoje é amplamente aperfeiçoado e utilizado, inclusive para *DNS*. Códigos como o OpenFOAM [3], o ANSYS

FLUENT ([2]) e o FLOW3D ([32]) utilizam o método *VOF* para representar a interface entre fluidos.

Neste método a interface é definida por uma função marcadora com aproximação euleriana, que realiza a transição de um fluido para outro de forma descontínua. A variável C , denominada de função cor, representa a parcela de preenchimento por uma fase em determinada célula. Assim, a variação de C é representada por uma função Heaviside, que está atrelada à condição de salto, como:

$$\left\{ \begin{array}{ll} C = 0 & \text{fluido secundário,} \\ 0 < C < 1 & \text{interface,} \\ C = 1 & \text{fluido de referência.} \end{array} \right. \quad (2.10)$$

Para calcular o movimento da interface, utiliza-se uma equação de advecção da forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = 0. \quad (2.11)$$

A vantagem do *VOF* em relação ao *MAC* é a utilização de uma função marcadora, ao invés de marcadores. No uso da função marcadora, adiciona-se somente uma variável que representa o volume de preenchimento de determinado fluido (C) que varia de acordo com a equação 2.11. Assim, é possível simular o movimento da interface entre dois fluidos e determinar sua posição aproximada. Como a interface é considerada de forma não suave, não existe uma faixa de transição entre as propriedades físicas, como nos métodos que consideram a interface de forma suave.

Um problema relacionado ao *VOF* está na dificuldade de encontrar a posição exata da interface e seu formato, necessitando de procedimentos adicionais para se definir estas características. Inicialmente, ao se calcular a evolução temporal da variável C utilizando a equação de advecção 2.11, não é possível definir imediatamente em qual posição o volume fracionado se encontra dentro da célula (figura 2.4).

Métodos como o *Simple Line Interface Calculation (SLIC)*[63] [31] e o *Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC)* [1] [101] são utilizados para identificar qual é a posição mais adequada das frações de volume (figura 2.5). No método *PLIC*, criam-se segmentos de linha orientados pela direção normal à interface, a qual é encontrada considerando o valor de C da

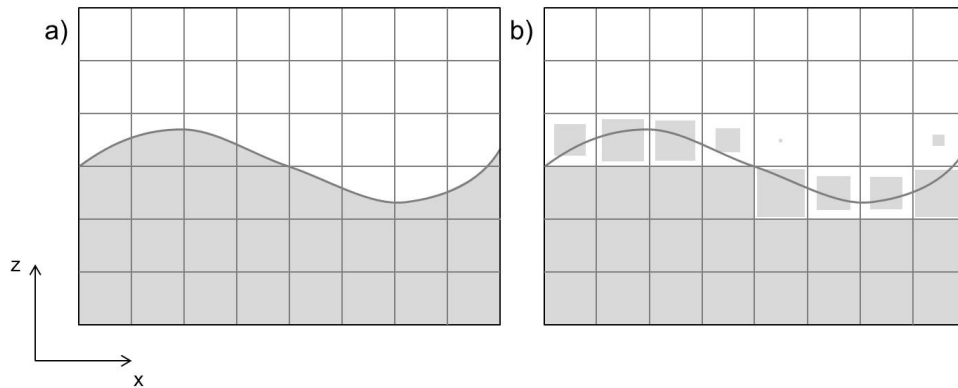


Figura 2.4: Interface de dois fluidos a) interface verdadeira, b) definição arbitrária da posição da fração de volume após o cálculo de C pela equação 2.11.

própria célula e da células adjacentes.

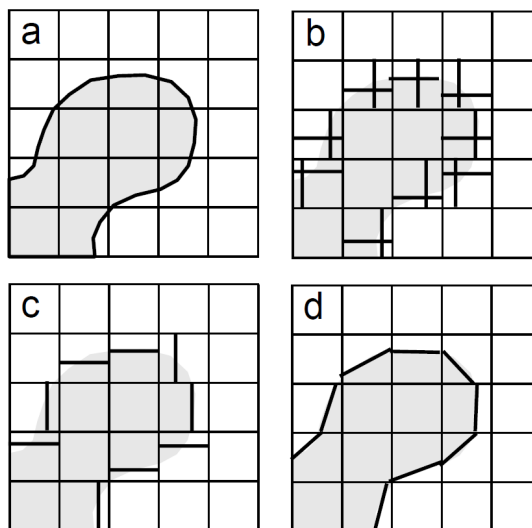


Figura 2.5: Reconstrução da interface em duas dimensões para o método *VOF*: a) Interface verdadeira, b) Método *SLIC* c) Método Hirt and Nichols d) Método *PLIC* (TRYGGVASON et al., 2011[93]).

Scardovelli e Zaleski [79] apontam quatro motivos pelos quais o uso do *VOF* é muito difundido:

- conserva a massa de uma maneira natural, como consequência direta do algoritmo da advecção, baseado na representação discreta da equação de continuidade (eq. 2.1),
- não necessita de preparação especial para realizar reconexões ou quebra da interface e, desta maneira, a mudança de topologia é implícita ao algoritmo, e

- o esquema é local e apenas os valores de C na interface e nas células vizinhas são necessários para atualizar o valor de C na interface. Desta maneira, é relativamente simples de implementar estes algoritmos em paralelo.

MÉTODO *LEVEL SET*

Proposto por Osher e Sethian (1988) [66], o método *Level Set* é euleriano e utiliza uma função distância com sinal, $\phi(x,y,z,t)$, para identificar os diferentes fluidos. É amplamente utilizado pela comunidade científica merecendo uma publicação de revisão do método com aplicações recentes (Gibou et al., 2018)[22]. Uma função distância é aquela cujo valor representa a menor distância do ponto em que está sendo analisada à interface (conceito definido com mais precisão em § 3.2.1). Esta função distância é identificada por isolinhas (2D) ou isossuperfícies (3D), em que os valores negativos se referem a um dos fluidos, valores positivos se referem ao outro e o valor zero corresponde à posição da interface (figura 2.6).

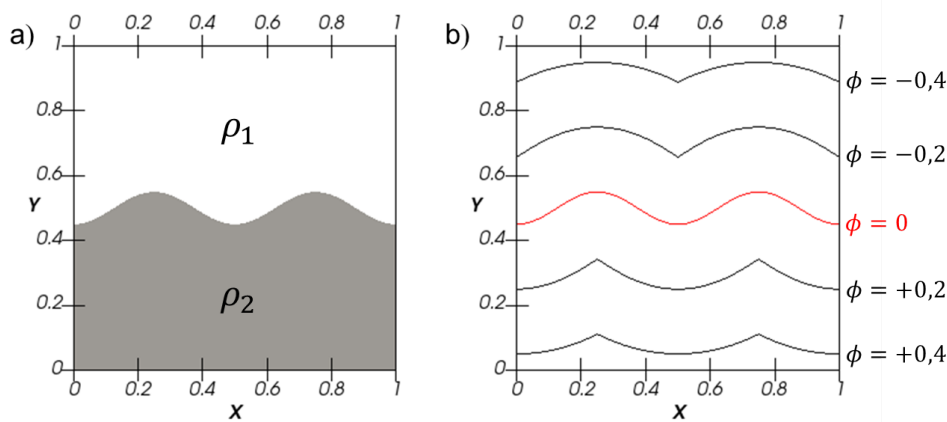


Figura 2.6: Interface de dois fluidos a) interface original, b) isolinhas de ϕ do método *Level Set*.

O movimento da interface também ocorre por advecção, respeitando:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = 0. \quad (2.12)$$

Uma vez que a massa específica e a viscosidade são descontínuas na interface, tanto problemas de excesso de difusão (alargamento da interface) como oscilações numéricas são esperados se não houver um tratamento adequado do fluido próximo à interface. Para minimizar estes

problemas, o método *Level Set* utiliza uma função Heaviside suave, diretamente relacionada à célula, que define explicitamente a posição da interface ($\phi = 0$).

A transição na interface é mantida suave, mas com espessura da ordem de grandeza do tamanho da célula, para evitar a introdução de distúrbios com escala de comprimento igual à da malha, pois a interface infere uma propriedade de salto abrupta de uma célula para a próxima (UNVERDI; TRYGGVASON, 1992 [94]). Para reconstruir as propriedades materiais do escoamento, como massa específica e viscosidade, uma outra função marcadora, $I(\phi)$, do tipo Heaviside é utilizada

$$I(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi < -\delta\Delta_c, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\delta\Delta_c} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\delta\Delta_c}\right) \right] & \text{se } |\phi| \leq \delta\Delta_c, \\ 1 & \text{se } \phi > \delta\Delta_c, \end{cases} \quad (2.13)$$

em que δ é um coeficiente empírico, normalmente igual a 1,5 e Δ_c é a discretização característica do problema, que varia de acordo com o fenômeno a ser simulado. O valor de δ representa uma interface com espessura de três células, e, assim, $\delta\Delta_c$ representa metade da espessura da interface. Nota-se que, neste método, a interface possui uma espessura virtual, pois é representada por uma função suave. As propriedades físicas, como a massa específica e a viscosidade cinemática, são calculadas como:

$$\rho = (1 - I)\rho_1 + I\rho_2 \quad e \quad \nu = (1 - I)\nu_1 + I\nu_2, \quad (2.14)$$

em que ρ_1 , ρ_2 , ν_1 e ν_2 são a massa específica e a viscosidade cinemática dos fluidos 1 e 2. A equação 2.14 pode ser aplicada analogamente às outras propriedades dos fluidos.

Como ϕ é uma função distância, sua advecção, teoricamente, poderia ser realizada por um método padrão de equações hiperbólicas. Entretanto, a advecção de ϕ pode fazer com que esta variável não seja mais uma função distância (quando $|\nabla\phi| \neq 1$), descaracterizando a interface (SUSSMAN et al., 1994[88]). Em um campo de escoamento complexo e variável, é possível que ϕ desenvolva um gradiente abrupto para a equação de advecção 2.12, especialmente se a interface possui declividades acentuadas. Como consequência, torna-se difícil de manter

constante a espessura da zona de transição (eq. 2.13). Assim, o cálculo do vetor normal e da curvatura deixam de ser precisos e pode ocorrer uma variação significativa de massa, provocando problemas de conservação de massa (ZHANG et al., 2010[105]).

Para reduzir os problemas produzidos por esta questão, Sussman et al. (1994) [88] propuseram a reinicialização da variável ϕ em um determinado passo de tempo, por

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{sgn}(\phi_0) (|\nabla \phi| - 1) = 0, \quad (2.15)$$

em que sgn é o sinal da função, ϕ_0 é a função não reinicializada e τ é uma variável relacionada a discretização espacial (muitas vezes $\Delta\tau = 0,1\Delta_c$). A reinicialização faz com que a variável ϕ seja novamente uma função distância e é mais efetiva próximo à $\phi = 0$.

Para movimentos lentos da interface, o método não necessita se reinicializar a cada passo de tempo; porém, se o movimento da interface for rápido, existe a necessidade de reinicializar com mais frequência, podendo ser realizada mais de uma vez por passo de tempo. A reinicialização pode resultar em movimento artificial da interface que contribui para uma conservação de massa defasada (TRYGGVASON et al. (2011) [93]). Entretanto, com o uso de um esquema de alta ordem, com o refinamento de malha e com um esquema de reinicialização mais adequado, o problema com a conservação de massa do método *Level Set* pode ser evitado ou, ao menos, reduzido (SUSSMAN et al., 1998 [86]).

O método *Level Set* tem um apelo pela simplicidade, pois não existem passos complexos adicionais, como no método *VOF* que demanda a reconstrução da interface ou a consideração de objetos adicionais como os utilizados pelo método *Front Tracking*.

2.1.5 MÉTODOS HÍBRIDOS - FRONT TRACKING

Os métodos híbridos possuem características dos métodos de rastreamento e dos de captura de interface. Este grupo é formado, predominantemente, por métodos lagrangianos que representam a interface com marcadores, que indicam a localização da interface dentro do domínio do escoamento.

O método *Front Tracking* foi apresentado em 1992 por Unverdi e Tryggvason [94]. Ao invés de fazer a advecção de uma função marcadora, pontos marcadores conectados entre si são

movidos pelo próprio movimento do fluido (figura 2.7).

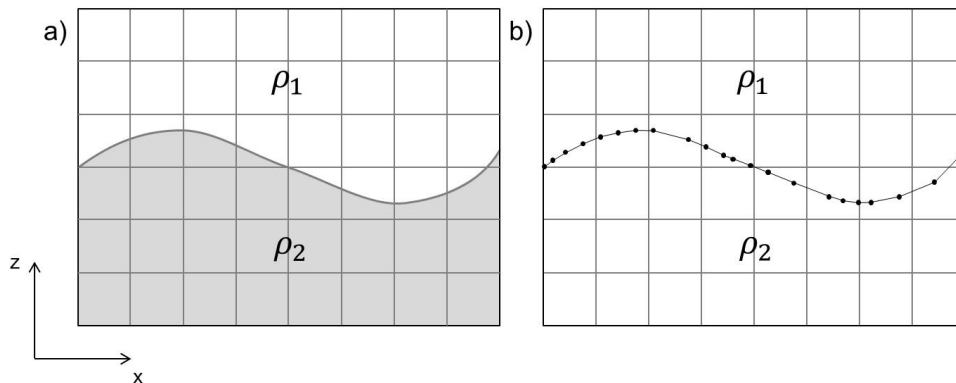


Figura 2.7: Interface de dois fluidos: a) interface original, b) interface representada por meio de pontos interconectado no método *Front Tracking*.

Neste método utiliza-se dois gradeamentos: o gradeamento fixo, onde as equações de Navier-Stokes são usualmente resolvidas, e o gradeamento móvel que, com uma abordagem lagrangiana, representa a interface dos fluidos por marcadores. Em seu trabalho, Unverdi e Tryggvason (1992) [94] apresentam uma malha euleriana tridimensional para o cálculo das equações de Navier-Stokes e outra malha, intrínseca à primeira, não estruturada e triangular para representar a interface (figura 2.8). Assim, uma das vantagens deste método é que a representação da interface tem uma liberdade maior do gradeamento onde as equações de movimento são resolvidas, podendo se utilizar malhas adaptativas ou até mais refinadas.

Diferente do método *MAC*, o método *Front Tracking* adota os marcadores apenas na posição da interface. O conjunto de marcadores e suas conexões é denominado de frente (*front*) e existem diversos métodos diferentes para considerá-la. As conexões são representadas por linhas (2D) ou superfícies (3D). Marcadores podem ser adicionados ou removidos com o intuito de manter a representatividade da interface.

Na maioria dos casos, a frente é movida pelo campo de velocidades (calculado pela equação da quantidade de movimento). Assim que a frente se move, é necessário atualizar as propriedades do fluido no gradeamento fixo. A maneira mais utilizada para transferir a informação entre a frente e o gradeamento do escoamento é por meio de uma função marcadora suave que pode ser representada no gradeamento do escoamento (TRYGGVASON et al., 2011 [93]). Esta função marcadora suave pode ser semelhante à função apresentada no método *Level Set* (equação

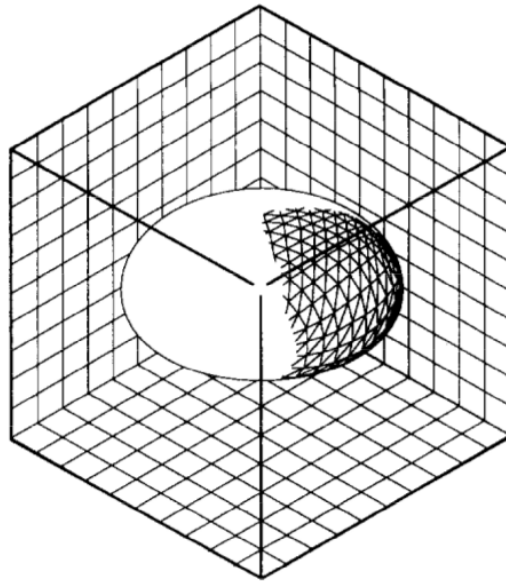


Figura 2.8: Domínio computacional é discretizado por uma malha regular, cartesiana e estacionária. A representação da interface é representada por uma outra malha não estruturada e triangular (Unverdi e Tryggvason, 1992 [94]).

2.13).

Em geral, as simulações numéricas de escoamentos multifásicos devem levar em conta as mudanças da topologia, como, por exemplo, quando uma gota ou uma bolha entram em colapso. Quando a interface é explicitamente rastreada por marcadores conectados, deve-se atentar para tais mudanças para que se modifique a conectividade dos pontos de maneira apropriada. A complexidade desta operação é, normalmente, citada como a maior desvantagem do método *Front Tracking* (TRYGGVASON et al., 2001 [92]).

2.1.6 RESUMO SOBRE OS MÉTODOS DE REPRESENTAÇÃO DE INTERFACE

A tabela 2.2 apresenta uma compilação dos métodos aqui citados, com suas principais características, vantagens e desvantagens. Além destes apresentados, diversos outros métodos existem como o *Constrained Interpolation Profile Method* (TAKEWAKI et al., 1985) [89], o *Phase-field Method* (JACQMIN, 1999)[34] e o *VOF/Level Set Method* (SUSSMAN; PUCKET, 2000)[87]. A escolha do método mais adequado para representar a interface depende do problema específico a ser resolvido e dos métodos utilizados para a resolução da equação da continuidade e da quantidade de movimento.

Tabela 2.1: Comparação entre os principais métodos de representação de interface.

Atributo	<i>VOF</i>	<i>Level-Set</i>	<i>Front-Tracking</i>
Autores Pioneiros	Hirt e Nichols (1981) [31]	Osher e Sethian (1988) [66]	Unverdi e Tryggvason (1992) [94]
Tipo de captura	Função Marcadora não Suave	Função Marcadora Suave	Marcadores e Função Marcadora Suave
Custo computacional	intermediário	baixo	alto
Complexidade de implementação	intermediária	baixa	alta
Mudança de Topologia	simulada	simulada	modelada
Principais vantagens	Bibliografia ampla	Simplicidade	Malha secundária para representar a interface
Principais desvantagem	Dificuldade em reconstruir a interface e em se estender de 2D para 3D	Problemas com conservação de massa	Problemas com mudança de topologia
Publicações que utilizam	[3] [2] [32]	[105] [102] [90]	[92] [104] [13]

2.1.7 TENSÃO SUPERFICIAL

A tensão superficial é uma propriedade termodinâmica do líquido que é função da temperatura e de outras variáveis de estado como a composição química e pureza da interface.

Ferziger e Peric (2002) [15] mencionam que a condição dinâmica exige que as forças da interface estejam em equilíbrio. Isto quer dizer que as forças normais em ambos lados da interface são da mesma magnitude e com direções opostas, enquanto que as forças tangenciais possuem a mesma magnitude e direção.

De acordo com Scardovelli e Zaleski (1999)[79], o tensor da pressão de capilaridade, que pode ser representado por um tensor tangencial à interface, é dado por

$$\mathbf{T} = \sigma (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \delta_S, \quad (2.16)$$

em que \mathbf{T} é o tensor de pressão tangencial à interface, σ é o coeficiente de tensão superficial, \mathbf{I} é o tensor identidade, \mathbf{n} é o vetor normal à interface e δ_S é o delta de Dirac, referente à posição da interface. As forças capilares, \mathbf{f}_σ , (referente à tensão superficial), podem ser representadas

como a divergência de \mathbf{T} , tomando a forma

$$\mathbf{f}_\sigma = \nabla \cdot \mathbf{T} = 2\sigma\kappa\delta_S \mathbf{n}, \quad (2.17)$$

em que κ é a curvatura da interface.

Para considerar a tensão superficial, a equação de Navier-Stokes (eq. 3.1) ganha um novo termo referente às forças capilares, tomando a forma

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\sigma}{\rho} \kappa \delta_S n_{ij}, \quad (2.18)$$

em que σ é a tensão superficial, n_{ij} é o vetor normal, δ_S é o delta de Dirac que indica a presença da interface, dado por

$$\delta_S = \begin{cases} 1 & \text{referente à interface,} \\ 0 & \text{fora da interface.} \end{cases} \quad (2.19)$$

2.2 ERROS NUMÉRICOS: DISPERSÃO E DISSIPACÃO NUMÉRICA

Todos os esquemas numéricos acrescentam erros ao modelo matemático em que são aplicados. Estes erros podem provir do truncamento da série de Taylor, que podem se manifestar como dispersão e/ou dissipação numérica.

Dispersão é o erro que adiciona aos resultados oscilações que não estão relacionadas ao fenômeno simulado. Métodos de alta ordem provocam mais erros de dispersão se comparados com os de baixa ordem e estes erros são causados unicamente por derivadas de ordem ímpar. Estes erros estão relacionados à fase e provocam *wiggles*, oscilações espúrias de pequena escala, normalmente do tamanho da malha.

Por outro lado, o erro de *dissipação* é aquele que, como o próprio nome sugere, provoca uma perda ou ganho de energia que não está relacionada ao fenômeno em questão. Os erros de dissipação estão relacionados à amplitude da incógnita e podem ser separados em *sobredissipativos* (*over-dissipative*) e *subdissipativos* (*sub-dissipative*). Métodos de baixa ordem possuem mais erros de dissipação se comparados com os métodos de alta ordem, e são provocados por derivadas de ordem tanto par quanto ímpar. Uma característica importante dos erros de dissipação, é que estes erros, quando *sobredissipativos*, podem evitar problemas provocados pelo erro de dispersão, como os *wiggles*.

Para exemplificar, uma equação unidimensional de advecção pura $\frac{\partial f}{\partial t} = u \frac{\partial f}{\partial x}$ é resolvida utilizando o método de Runge-Kutta de segunda ordem para determinar a derivada temporal, com $\Delta x = 0,1m$, $\Delta t = 0,1s$ e $u = 1,05m/s$, durante 1s. Utilizando como esquema numérico de derivação espacial o *upwind* de primeira ordem (fig. 2.9), notamos que o erro de dissipação numérica é grande o suficiente para fazer com que a variável f reduza o seu valor inicial máximo em mais de 50% em 1 segundo. Já, quando utilizamos o esquema centrado de segunda ordem para calcular a derivada espacial (fig. 2.10), a solução é descaracterizada por separar a onda propagada em diversas ondas menores, além de ocorrer o efeito de sobreposição entre ondas, aumentando levemente ($\approx 10\%$) o valor máximo da solução depois de 1 segundo. Para esquemas centrados, o erro de dissipação numérica é inexistente, logo, os problemas visualizados são unicamente de dispersão.

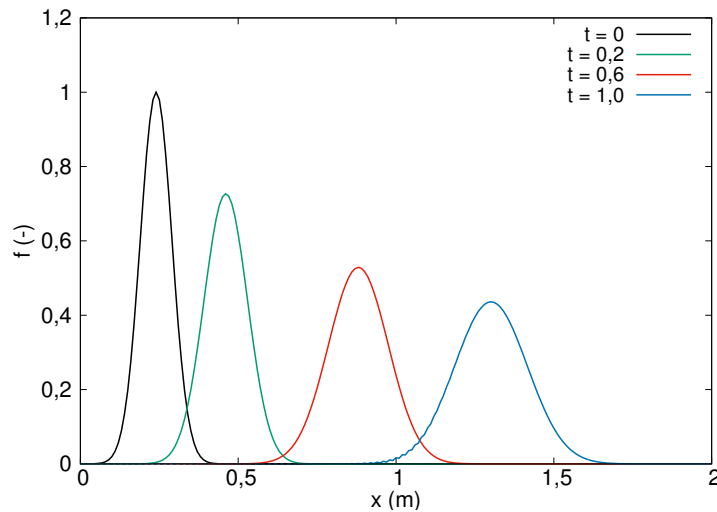


Figura 2.9: Advecção de uma variável qualquer f com um esquema *upwind* de primeira ordem, caracterizando o erro de dissipação.

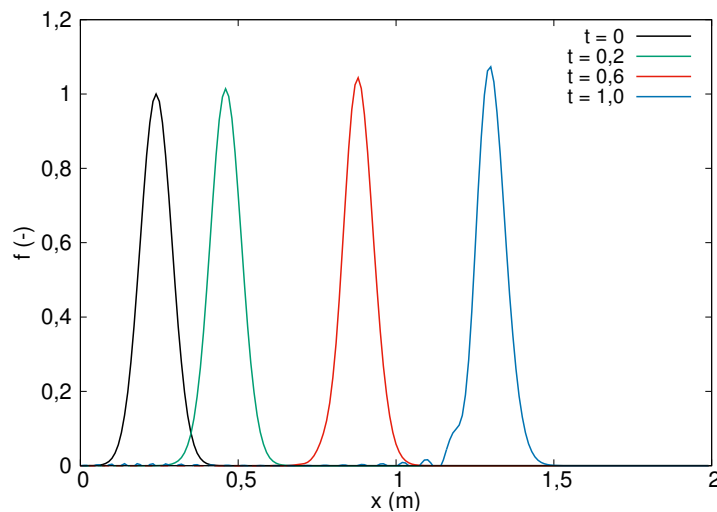


Figura 2.10: Advecção de uma variável qualquer f com um esquema centrado de segunda ordem, caracterizando o erro de dispersão.

2.2.1 ANÁLISE DE FOURIER DOS ESQUEMAS EM DIFERENÇAS FINITAS

De acordo com Lele (1992)[45], considerando o desenvolvimento da série de Taylor

$$f_{i+1} = f_i + (x_{i+1} - x_i) f'_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} f''_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3!} f'''_i + \dots, \quad (2.20)$$

para a derivada primeira com precisão de ordem n , pode se designar o esquema compacto centrado pela relação do tipo

$$\sum_{j=-p}^p \alpha_j f'_{i+j} = \sum_{k=-q}^q a_k f_{i+k} + O(\Delta x^n), \quad \text{para } i = 1, \dots, n_x, \quad (2.21)$$

onde α_j e a_k são coeficientes obtidos pelo desenvolvimento em série de Taylor. Quando $p = 2$ e $q = 3$, tem-se que

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x} + O(\Delta x^n). \quad (2.22)$$

em que α , β , a , b e c são os coeficientes obtidos pelo desenvolvimento em série de Taylor. A aproximação para a derivada segunda pode ser obtida de forma semelhante e desenvolvendo-a se encontra

$$\beta f''_{i-2} + \alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} + \beta f''_{i+2} = a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2} + O(\Delta x^n). \quad (2.23)$$

Assim, quando esquemas possuem $\alpha \neq 0$ e/ou $\beta \neq 0$, o esquema é denominado implícito centrado (IC) ou compacto; caso contrário, é chamado de esquemas explícitos centrados (EC). Uma grande vantagem dos esquemas compactos é que estes necessitam de um número menor de pontos para calcular uma derivada de alta ordem, se comparados aos métodos explícitos centrados.

A análise baseada na série de Fourier permite quantificar erros para um número de onda a ser resolvido por um esquema numérico, já que a derivada calculada no campo espectral (após aplicar a série de Fourier) é exata. Para aplicar a série de Fourier se considera uma função $f(x)$, periódica em um intervalo $[0, L_x]$. Esta função pode ser escrita como

$$f(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \hat{f}_j e^{ik_x x}, \quad (2.24)$$

em que $k_x = \left(j \frac{2\pi}{L_x}\right)$ é o número de onda, ι é a unidade imaginária e \hat{f}_j são os coeficientes de Fourier. Neste caso, por conveniência, j representa o índice na direção do eixo x . A partir da equação 2.24 é possível verificar que, derivando a função, obtém-se

$$f'(x) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \hat{f}_j \iota k_x e^{ik_x x}. \quad (2.25)$$

Pode-se identificar os coeficientes de Fourier de $f'(x)$ como

$$\hat{f}'_j = \iota k_x \hat{f}_j. \quad (2.26)$$

Assim, o método de análise consiste em comparar o valor exato de \hat{f}'_j dado pela equação 2.26 com o valor $(\hat{f}'_j)_{df}$ obtido com o esquema de diferenças finitas. Afirma-se que para um esquema representado pela equação 2.22, tem-se

$$(\hat{f}'_j)_{df} = \iota k'_x \hat{f}_j, \quad (2.27)$$

em que k'_x é o número de onda modificado, ou seja, representa a aproximação feita pelo uso do esquema numérico em diferenças finitas.

Defini-se o erro provocado pela aproximação da derivada de primeira ordem como

$$\epsilon_{1der} = \frac{|k_x - k'_x|}{k_x}, \quad (2.28)$$

em que, para métodos baseados nos esquemas compactos centrados de até 6^a ordem, o número de onda modificado é determinado como

$$k'_x \Delta x = \frac{a \sin(k_x \Delta x) + (b/2) \sin(2k_x \Delta x) + (c/3) \sin(3k_x \Delta x)}{1 + 2\alpha \cos(k_x \Delta x) + 2\beta \cos(2k_x \Delta x)}. \quad (2.29)$$

Para a derivada segunda, a expressão equivalente é

$$\epsilon_{2der} = \frac{|k_x^2 - k''_x|}{k_x^2}, \quad (2.30)$$

em que, para métodos baseados na equação 2.23, o número de onda modificado segundo [43] é definido como

$$k''_x \Delta x^2 = \frac{2a(1 - \cos(k_x \Delta x)) + (b/2)(1 - \cos(2k_x \Delta x)) + (2c/9)(1 - \cos(3k_x \Delta x))}{1 + 2\alpha \cos(k_x \Delta x) + 2\beta \cos(2k_x \Delta x)}. \quad (2.31)$$

Assim, é possível identificar com mais exatidão o erro relacionando os números de onda aos

números de ondas modificados e aos modificados segundos, referentes aos métodos numéricos (figuras 2.11 e 2.12). Nota-se que os esquemas IC possuem erro menor do que os esquemas EC para uma mesma ordem.

Esquemas upwind possuem mais erros de dissipação do que os centrados, o que lhes fornece uma redução de problemas com *wiggles*, os tornando mais robustos. Ainda, Nagarajan et al. (2003)[60] demonstram que esquemas deslocados possuem menos erros na derivada primeira reduzindo assim os problemas com erros de dispersão numérica (figura 2.13).

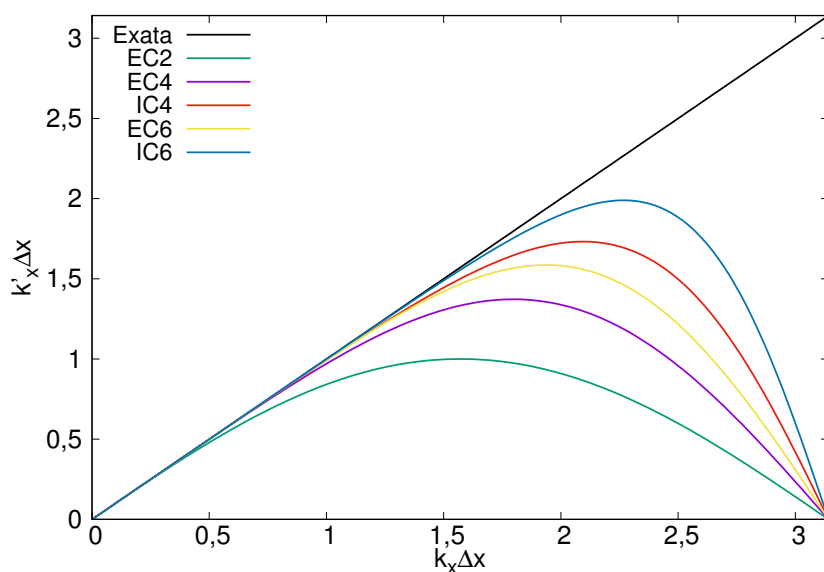


Figura 2.11: Número de onda modificado em função do número de onda para esquemas centrados, com coeficientes seguindo: EC2: $a = 1$; EC4: $a = 4/3$ e $b = -1/3$; IC4: $\alpha = 1/4$ e $a = 3/2$; EC6: $a = 3/2$, $b = -3/5$ e $c = 1/10$; IC6: $\alpha = 1/3$, $a = 14/9$ e $b = 1/9$. As constantes não apresentadas para cada esquema são nulas.

2.2.2 ERROS DE DISPERSÃO E DISSIPACÃO

Os erros de dispersão e dissipação numérica estão relacionados aos esquemas numéricos adotado para a resolução da equação diferencial. Para derivadas ímpares o esquema pode fornecer erros de dispersão e dissipação; porém, para derivadas pares apenas podem se observar erros de dissipação numérica. Uma peculiaridade dos esquemas centrados é que estes não introduzem erros de dissipação pelas derivadas ímpares.

Para analisar os erros de um método, considera-se uma equação simplificada unidimensional

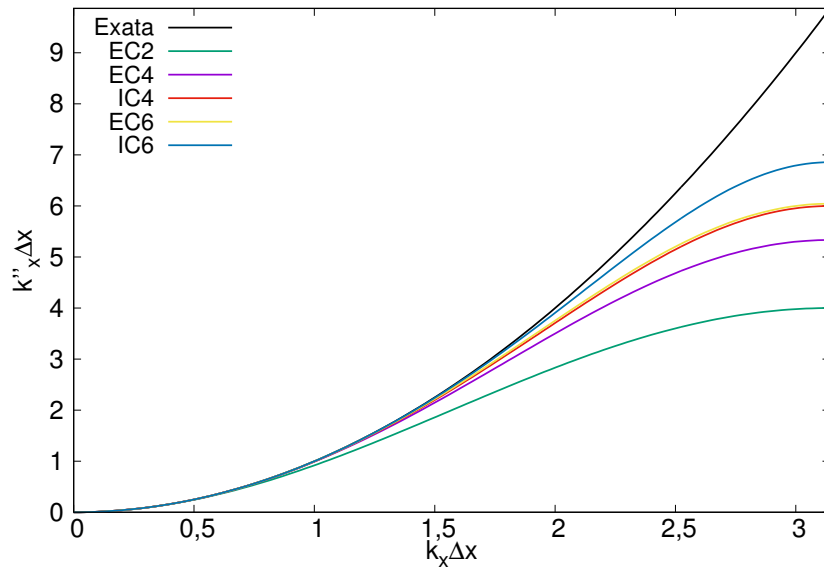


Figura 2.12: Número de onda modificado segundo função do número de onda para esquemas centrados. Os coeficientes são os mesmos do que para a primeira derivada, sem ser os dos esquemas implícitos em que: IC4, $\alpha = 1/10$ e $a = 6/5$; IC6, $\alpha = 2/11$, $a = 12/11$ e $b = 3/11$.

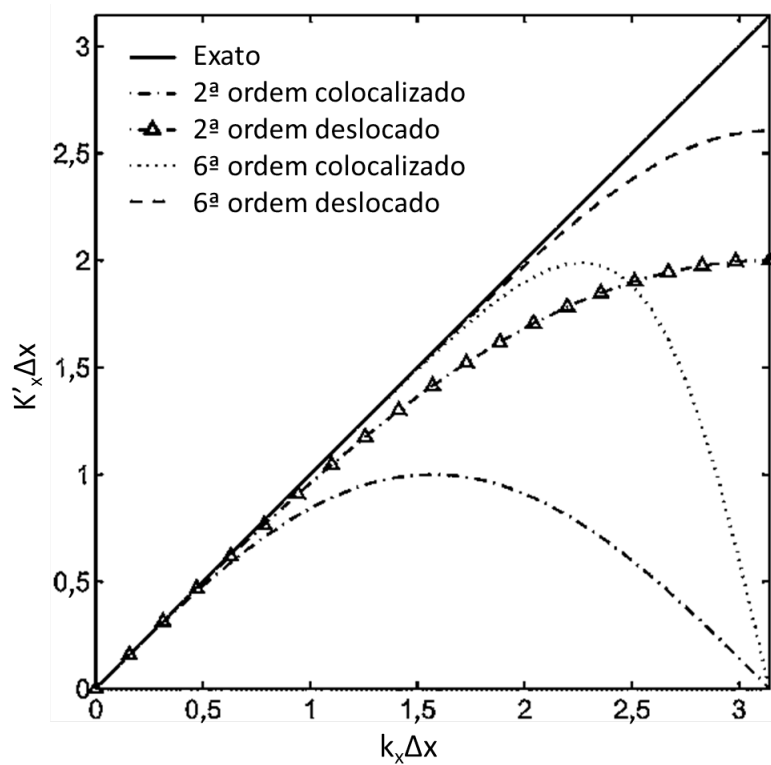


Figura 2.13: Espectro do número de onda modificado para diversos operadores de derivada primeira (adaptado de Nagarajan et al., 2013[60]).

de convecção-difusão

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = v \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad (2.32)$$

em que f é uma variável qualquer e c é uma velocidade de propagação constante, com uma distribuição uniforme de n_x pontos em $[0, L_x]$. Caso $\Delta x = \frac{L_x}{n_x - 1}$, o valor da variável independente, no espaço, pode ser definido como:

$$x_i = (i - 1) \Delta x, \quad \text{para } i = 1, \dots, n_x. \quad (2.33)$$

Para quantificar os erros de dispersão e dissipação, considera-se a equação de convecção-difusão 2.32, para $t \geq 0$, $-\infty < x < +\infty$. Nestas condições, com a série de Fourier esta equação pode ser reescrita como

$$f(x, t) = \hat{f}(t) e^{tkx}, \quad (2.34)$$

em que a solução exata é dada por

$$f(x, t) = \hat{f}_0 \underbrace{e^{tk(x-ct)}}_A \underbrace{e^{-vk^2 t}}_B, \quad (2.35)$$

onde \hat{f}_0 é a condição inicial em $t = 0$, o termo A é a representação do termo convectivo e o termo B é a representação do termo difusivo, ambos no campo espectral. É importante enfatizar que como esta é uma solução exata, ela não possui erros de dispersão e dissipação e, sendo assim, será usada como solução de referência.

Para analisar o método numérico, discretizam-se espacialmente as soluções referentes as equações 2.34 e 2.35, da forma

$$f(x_i, t) = \hat{f}(t) e^{tkx_i}, \quad (2.36)$$

e

$$f(x_i, t) = \hat{f}_0 e^{tk(x_i - c \frac{k'}{k} t)} e^{-vk'' t}. \quad (2.37)$$

Cabe ressaltar que a equação 2.37 é válida para qualquer esquema numérico.

Para identificar os efeitos de dispersão e dissipação individualmente, é conveniente separar a parte real da imaginária do número de onda modificado ($k' = k'_R + ik'_I$). Nota-se que, na prática

comum, as derivadas segundas são resolvidas por esquemas centrados, e, assim, o número de onda modificado segundo possui apenas uma parte real ($k'' = k_R''$), portanto, derivadas pares não introduzem erros de dispersão. Assim, a equação 2.37 pode ser reescrita como

$$f(x_i, t) = \hat{f}_0 e^{ik \left(x_i - c \frac{(k_R' + ik_I')}{k} t \right)} e^{-\nu k'' t}, \quad (2.38)$$

que desenvolvida fornece:

$$f(x_i, t) = \hat{f}_0 \underbrace{e^{ik \left(x_i - c \frac{k_R'}{k} t \right)}}_{conv.} \underbrace{e^{-(\nu k'' - ck_I') t}}_{dif.}. \quad (2.39)$$

Por conseguinte, a comparação das soluções exata (eq. 2.35) com a sua aproximação (eq. 2.39) nos leva à quantificação dos erros de dispersão e dissipação.

Os erros de dispersão, que correspondem à modificação artificial da velocidade de fase c , são encontrados na parte imaginária da equação 2.39, isto é, dados pela parcela $c \frac{k_I'}{k}$. Fazendo a diferença entre o termo convectivo da equação de referência 2.35 com o da aproximação numérica 2.39 temos a quantificação deste erro, estimado unicamente pela derivada primeira, como

$$E_{disp} = \frac{k_R'}{k} - 1, \quad para \quad 0 \leq k\Delta x \leq \pi. \quad (2.40)$$

Assim, um valor negativo do erro de dispersão corresponde a uma sub-estimativa da velocidade de fase.

Como mencionado por Mahmood et al. (2011)[51], esquemas *upwind* de alta ordem são utilizados para eliminar erros de dispersão numérica, devido ao seu elevado erro de dissipação numérica. A mesma propriedade não é encontrada nos esquemas centrados.

O erro de dissipação, que modifica a amplitude da oscilação, pode ser obtido analisando a parte real da equação 2.39, ou seja, o termo $\nu k'' - ck_I'$. Fazendo a diferença entre o termo difusivo da equação de referência 2.35 com o da aproximação numérica 2.39 temos a quantificação deste erro, estimado pela derivada primeira e segunda, como

$$E_{diss} = \frac{k'' - k^2}{k^2} - Re_{\Delta x} \frac{k_I'}{k^2 \Delta x}, \quad para \quad 0 \leq k\Delta x \leq \pi, \quad (2.41)$$

em que $Re_{\Delta x} = c\Delta x/\nu$ é denominado número de Reynolds da malha. Esquemas centrados

não possuem erros de dissipação para a primeira derivada. Assim, $k'_1 = 0$, o que levaria a uma equação semelhante à 2.40. Desta maneira, os erros de dispersão e dissipação de diversos esquemas centrados (figuras 2.14 e 2.15) tem relação direta aos gráficos apresentados nas figuras 2.11 e 2.12.

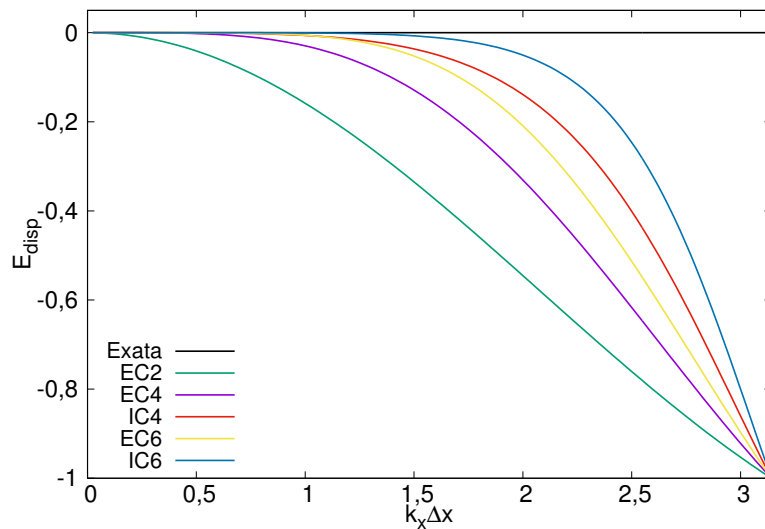


Figura 2.14: Erro de dispersão em função do número de onda para esquemas centrados, com coeficientes seguindo: EC2: $a = 1$; EC4: $a = 4/3$ e $b = -1/3$; IC4: $\alpha = 1/4$ e $a = 3/2$; EC6: $a = 3/2$, $b = -3/5$ e $c = 1/10$; IC6: $\alpha = 1/3$, $a = 14/9$ e $b = 1/9$.

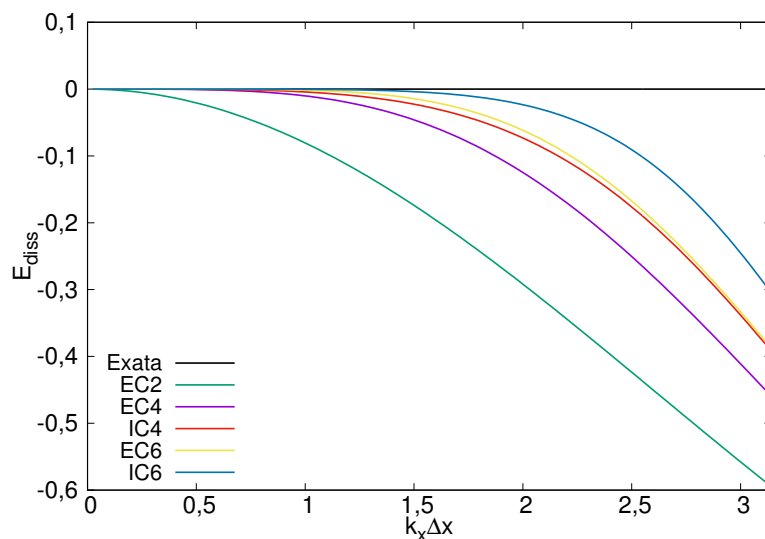


Figura 2.15: Erro de dissipação em função do número de onda segundo para esquemas centrados. Para os esquemas EC2, EC4 e EC6, os coeficientes utilizados são os mesmo do que os da primeira derivada e para: IC4: $\alpha = 1/10$ e $a = 6/5$; IC6: $\alpha = 2/11$, $a = 12/11$ e $b = 3/11$.

2.2.3 HIPERVISCOSIDADE

De acordo com Lamballais et al. (2011) [43], na resolução das equações de Navier-Stokes, a perda de precisão introduzida por um esquema numérico nas pequenas escalas, combinado com um erro de *aliasing* e outros problemas numéricos (condição de contorno, erro nas propriedades conservativas em nível de discretização, etc), frequentemente fornecem oscilações espúrias nas pequenas escalas (*wiggles*).

Em geral, métodos de baixa ordem possuem mais erros de dissipação do que os métodos de alta ordem. A primeira vista, o erro de dissipação pode ser uma característica negativa, porém, ele pode reduzir, ou até mesmo eliminar, os *wiggles* gerados pelo erro de dispersão. Desta maneira, um método de baixa ordem pode ser mais estável que um método de alta ordem, mesmo possuindo mais erros, adquirindo estabilidade ao perder exatidão.

Lamballais et al. (2011)[43] apresentam uma ideia pertinente para minimizar os erros de dispersão, principalmente em métodos compactos de alta ordem. Utilizando os esquemas compactos (Lele, 1992)[45], é possível de aplicar com exatidão um erro de dissipação numérica modificando os coeficientes das derivadas segundas. Os autores sugerem que se pode concentrar os erros de dissipação apenas nas menores escalas, minimizando, ou até mesmo eliminando os *wiggles*. Esta técnica é denominada de **hiperviscosidade**.

Nesta linha de pesquisa, Dairay et al. (2017)[11] utilizaram a mesma técnica de hiperviscosidade para aplicar um LES implícito (ILES) ao método numérico. Ou seja, a hiperviscosidade fornece um erro de dissipação numérica controlável, podendo ser utilizada até mesmo para representar os efeitos de dissipação de energia da turbulência somente para as menores escalas, imitando o efeito de um modelo LES.

É importante enfatizar que a hiperviscosidade não aumenta o custo computacional dos cálculos, já que está atrelada unicamente à escolha dos coeficientes das derivadas do método numérico. Claramente, não se pode controlar os erros de dissipação da derivada primeira ao se utilizar esquemas centrados compactos, pois estes métodos não possuem erros de dissipação nestas derivadas.

2.2.4 ERROS DE MÉTODOS DE ALTA ORDEM EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS

No caso de escoamentos bifásicos, por causa da presença da interface (como já dito anteriormente), instabilidades provenientes da dispersão numérica podem ocorrer ao utilizar esquemas de alta ordem para resolver a equação de movimento.

As principais variáveis a serem afetadas por estes erros são as derivadas relacionadas à massa específica (ρ) e às viscosidades (μ e ν). Por estes motivos, não são facilmente encontrados na literatura formulações que utilizam métodos de alta ordem para simular os fluidos em escoamentos bifásicos.

Uma forma eficiente de reduzir os problemas de instabilidade numérica é utilizar a hiperviscosidade para controlar os erros na pequena escala. Assim, ao calcular a velocidade não corrigida (quando se utiliza o método da Projeção [8]), a hiperviscosidade controla os erros nas pequenas escalas provenientes do termo convectivo.

2.2.5 INSTABILIDADE NUMÉRICA

A análise de dispersão e dissipação numérica não é suficiente para identificar se uma simulação numérica é numericamente estável ou não, ou seja, se sua solução converge ou diverge. Neste caso é necessário realizar uma análise do esquema de derivação temporal para determinar seu diagrama de estabilidade.

O diagrama de estabilidade relaciona a velocidade máxima e a viscosidade máxima que podem ser representadas em determinada malha espacial e temporal. Assim, para a velocidade e viscosidade do problema em questão é aplicada uma correção destes valores considerando os erros de dispersão e dissipação para identificar, pelo diagrama de estabilidade do esquema utilizado, se a solução é estável ou não para a malha espaço-temporal escolhida.

Como exemplo, tem-se que uma simulação é estável utilizando o método de Adams-Bashforth 2ª ordem e instável utilizando o método de Euler explícito. Esta simulação pode se tornar estável para ambos os esquemas por causa dos erros de dissipação e dispersão numéricos (figura 2.16).

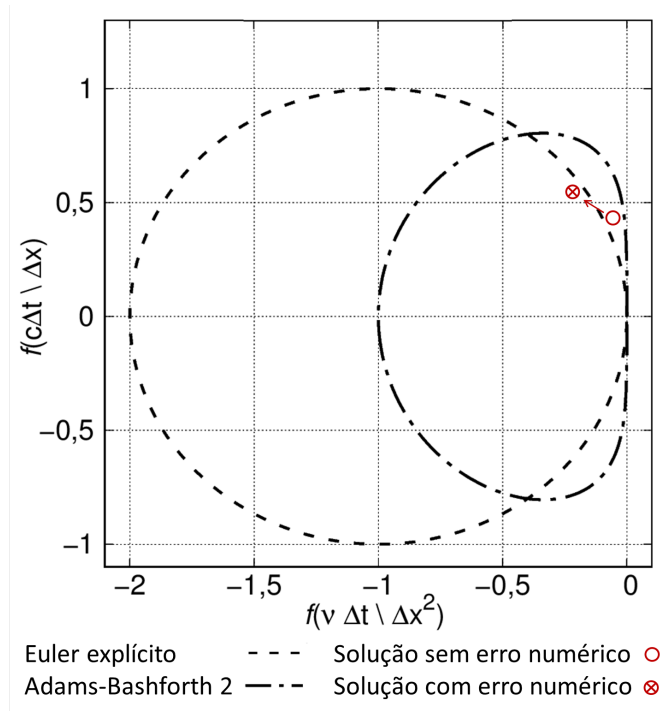


Figura 2.16: Diagramas de estabilidade para os esquemas Euler explícito e Adams-Bashforth segunda ordem; “○” representa o valor máximo de velocidade e viscosidade de um fenômeno hipotético e “⊗” representa a correção da posição deste mesmo fenômeno no diagrama causada pelo uso de um esquema numérico que provoca erros de dispersão e dissipação. A simulação passou a ser estável tanto para o esquema de Euler explícito quanto para o de Adams-Bashforth

2.3 TURBULÊNCIA

Os escoamentos na natureza, em sua grande maioria, são turbulentos. Em 1972, Tennekes e Lumley [91] comentaram sobre a abrangência do escoamento turbulento na natureza e afirmam que o escoamento laminar é a exceção e não a regra, pois para se encontrar um escoamento laminar, é necessário que o sistema fluido possua pequenas dimensões e altas viscosidades (*Stoke flows*).

Depois de uma década de seu famoso experimento que analisava a mudança do regime laminar para turbulento, Reynolds (1894)[72] estabeleceu um parâmetro adimensional para identificar a existência e a intensidade da turbulência em um escoamento. Este parâmetro é conhecido como número de Reynolds:

$$Re = \frac{VL}{\nu}, \quad (2.42)$$

em que V e L são uma velocidade e um comprimento característicos do escoamento, respectivamente, e ν é a viscosidade cinemática do fluido. Outra grande contribuição de Reynolds

foi a proposição de tratar problemas de escoamentos turbulentos por meio da *decomposição de Reynolds*.

Em escoamentos laminares, as partículas do fluido viajam em linhas ordenadas sem perder sua identidade pela mistura entre diferentes camadas. As partículas de fluido entre duas camadas adjacentes não se misturam, exceto por difusão molecular (GARDE, 2010 [20]). A maior dispersão nos escoamentos turbulentos faz com que a distribuição espacial das velocidades médias no tempo seja mais uniforme do que em um escoamento laminar, exceto próximo a paredes.

Uma forma de visualizar os vórtices é calculando-se a vorticidade do escoamento ($\omega = \nabla \times U$). A vorticidade indica a intensidade do vórtice, assim como os seus padrões estruturais, quando se visualizado em uma isossuperfície. Infelizmente, próximo a paredes utilizar a vorticidade pode inferir informações incoerentes sobre os vórtices. Para sanar este problema, utiliza-se o Critério Q que representa um balanço local entre a taxa de deformação e a magnitude da vorticidades, definindo vórtices como áreas onde a magnitude da vorticidade é maior do que a magnitude da taxa de de deformação [33] como

$$Q = \frac{1}{2} (|\Omega_{i,j}|^2 - |S_{i,j}|^2) > 0 \quad (2.43)$$

em que Ω é o rotacional e S é a taxa de deformação.

Os avanços nos estudos da turbulência se deram, inicialmente, por causa da observação do fenômeno, que resultou futuramente no desenvolvimento de modelos matemáticos para a descrição do fenômeno. Apenas no último meio século a computação foi capaz de ser aplicada para os estudos de turbulência. O cálculo do escoamento turbulento se desenvolveu adequadamente após o aparecimento do computador, diferentemente do acontecido com o escoamento laminar, que já possuía grande parte de sua teoria desenvolvida e de seus problemas resolvidos através de equações analíticas.

Até a década de 60, a única forma de representar a turbulência era utilizando modelos baseados na *decomposição de Reynolds* (RANS - *Reynolds Average Navier-Stokes*)[82]. Apenas a partir dos anos 70, com o crescimento da capacidade de cálculo computacional novas tendências para o tratamento numérico da turbulência foram possíveis, propiciando o desenvolvimento da

Simulação Numérica Direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*) e de Simulação de Grandes Escalas (LES - *Large-Eddy Simulation*).

2.3.1 ESPECTRO E ESCALAS DA TURBULÊNCIA

Pope (2000)[69] menciona que, em escoamentos com altos números de Reynolds, existe uma diferenciação entre as escalas turbulentas do movimento. O movimento de grande escala é fortemente influenciado pela geometria do problema. O comportamento do movimento de pequena escala é determinado quase que inteiramente pela taxa à qual este movimento recebe energia das escalas maiores e pela viscosidade. Assim, os movimentos de pequenas escalas possuem uma característica universal, independente da geometria do problema.

De acordo com Garde (2010)[20], o escoamento, quando turbulento, contém vórtices de vários tamanhos. Os maiores vórtices serão da ordem da dimensão da geometria ou do comprimento característico (como exemplo, o diâmetro do cilindro para escoamentos em torno de cilindros). O menor vórtice é da ordem de milímetros (dependendo da viscosidade do fluido); entretanto, é importante enfatizar que o tamanho do menor vórtice é suficientemente grande se comparado ao percurso livre médio das moléculas do fluido.

Os vórtices são tridimensionais por natureza, mesmo se o escoamento possui características bidimensionais. Vórtices de diversos tamanhos estão agregados uns nos outros e não são permanentes na natureza. Isto é, os maiores vórtices retiram energia do escoamento, sendo então continuamente formados, e transferem esta energia para os vórtices menores e estes para os ainda menores até que os menores vórtices finalmente se dissipam pelo efeito do atrito viscoso. Este processo é denominado de cascata de Kolmogorov.

É comum falar no espectro tridimensional da turbulência. Ocorre que não se pode "medir" vórtices, e sim apenas as flutuações que eles causam. Assim, é feito o espectro de cada componente, cada um correspondendo a uma flutuação de velocidade (MÖLLER; SILVESTRINI, 2004 [59]). Cada tamanho de vórtice possui uma frequência e uma energia. Os vórtices maiores (baixo número de onda) possuem menor frequência e maior energia, contrário dos vórtices menores (alto número de onda), que possuem maior frequência e menor energia.

A função de densidade autoespectral Θ_{ii} , também denominada de espectro de potência, ou

ainda espectro de frequências, é utilizada para associar uma frequência a uma determinada flutuação da velocidade e é tida como

$$\Theta_{ii}(f_r) = \frac{1}{BeT} \int_0^T c'^2(f_r, Be, t) dt, \quad (2.44)$$

em que f_r é a frequência de determinado vórtice representado pelo número de onda k_i , T é o tempo de observação, Be é a largura da banda de frequências, ou seja, a resolução da função densidade autoespectral. Neste caso c' é a flutuação da velocidade ou da pressão. O espectro pode ser representado em termos do número de onda

$$k_i = \frac{2\pi f_r}{\bar{u}_i} = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (2.45)$$

em que \bar{u}_i é a velocidade média na direção principal do escoamento e λ é o comprimento de onda do vórtice. Ainda, o espectro de frequências (eq. 2.44) pode ser escrito em função do número de onda (eq. 2.45) como

$$\Theta_{ii}(k_i) = \frac{\bar{u}_i}{2\pi} \Theta_{ii}(f_r), \quad (2.46)$$

sendo denominado de espectro do número de onda na direção i .

Möller e Silvestrini (2004 [59]) mencionam que se pode distinguir regiões características do espectro de turbulência, de forma simplificada, como:

- Região de baixa frequência, onde as escalas são limitadas pela geometria do problema considerado. É a região dos maiores e mais energéticos vórtices, onde o espectro assume um expoente -1 ($\Theta_{ii}(k_i) \sim k_i^{-1}$) na direção principal do escoamento,
- Região de equilíbrio universal, dado que ela se encontra em qualquer escoamento turbulento. A dissipação ocorre e existe a isotropia local (local no espectro) e é caracterizada por duas sub-regiões:

$$\begin{aligned} \Theta &\sim \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} && \text{Sub-região inercial (Kolmogorov),} \\ \Theta &\sim k^{-7} && \text{Dissipação viscosa (Heisenberg),} \end{aligned} \quad (2.47)$$

em que ε é o termo de dissipação turbulenta.

De acordo com Schlichting e Gersten (2003)[80], a turbulência isotrópica local é determinada unicamente por duas grandezas, ν e ε , que produzem o comprimento de escala das menores estruturas da turbulência, chamado de **comprimento de Kolmogorov** e é fornecido por

$$\ell_k = \left(\nu^3/\varepsilon\right)^{1/4}, \quad (2.48)$$

a escala do número de onda

$$k_k = \frac{2\pi}{\ell_k}, \quad (2.49)$$

e a escala do tempo

$$t_k = (\nu/\varepsilon)^{1/2}. \quad (2.50)$$

Assim, para que uma simulação numérica seja considerada uma DNS é necessário que todas as escalas de turbulência sejam representadas na própria malha de cálculo.

Ao se plotar o número de onda em forma de espectro é possível visualizar a escala dissipativa de Kolmogorov, além das escalas de energia referente às diversas frequências dos vórtices de um escoamento (figuras 2.17 e 2.18). Pode-se identificar as subregiões de turbulência quando se faz a análise do espectro do número de onda de um escoamento. Ao se criar este tipo gráfico para resultados numéricos, é possível de verificar se a simulação representou todas as escalas da turbulência.

2.3.2 TURBULÊNCIA EM ESCOAMENTOS COM SUPERFÍCIE LIVRE

Os números de Reynolds característicos de rios (figura 2.19) são muito maiores do que os usualmente observados em tubulações ou escoamento em torno de objetos. Visto que os escoamentos em rios e em canais são predominantemente turbulentos, o número de Reynolds não se propõe apenas a definir se o escoamento é turbulento ou não, mas também proporciona a escala do tamanho do maior vórtice.

Quando se analisa a turbulência provocada pela propagação de uma onda, tem que se atentar ao utilizar o número de Reynolds, pois algumas ondas não possuem uma velocidade característica que transporta massa. Quando a onda é oscilatória, ou seja, não transporta massa, a

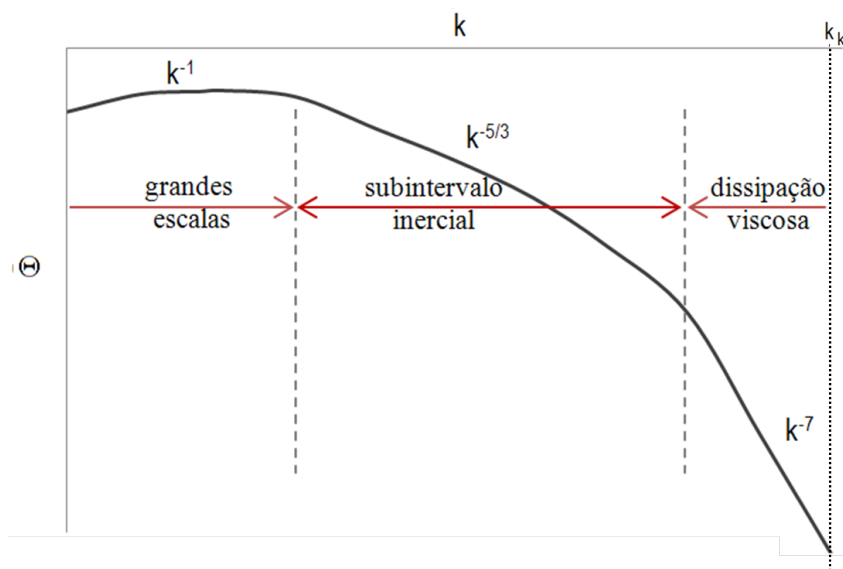


Figura 2.17: Esquema do número de onda representando as escalas de turbulência.

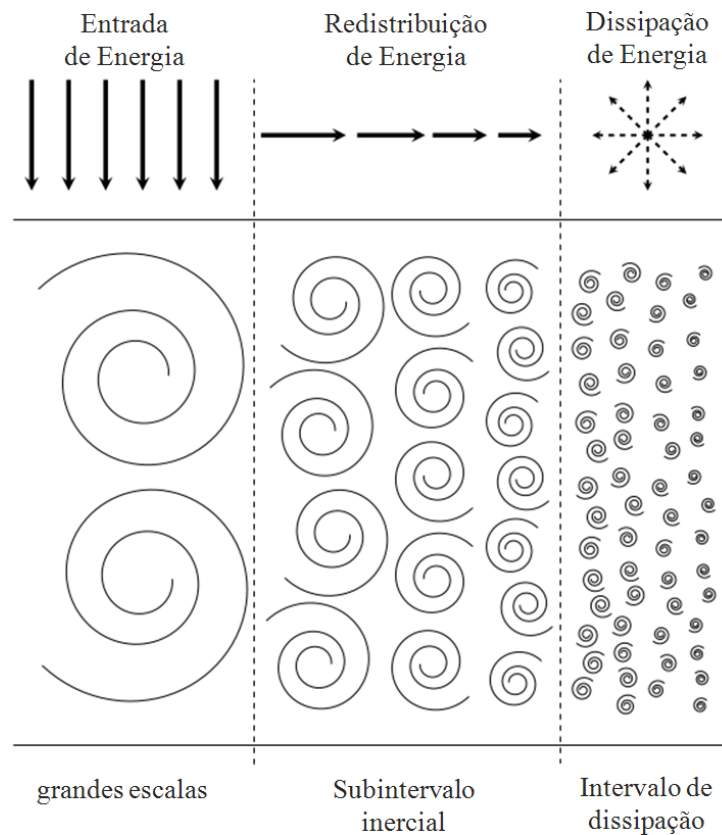


Figura 2.18: Diagrama do processo de cascata de energia em uma turbulência totalmente desenvolvida. Adaptado de Puhales et al. (2015)[71].

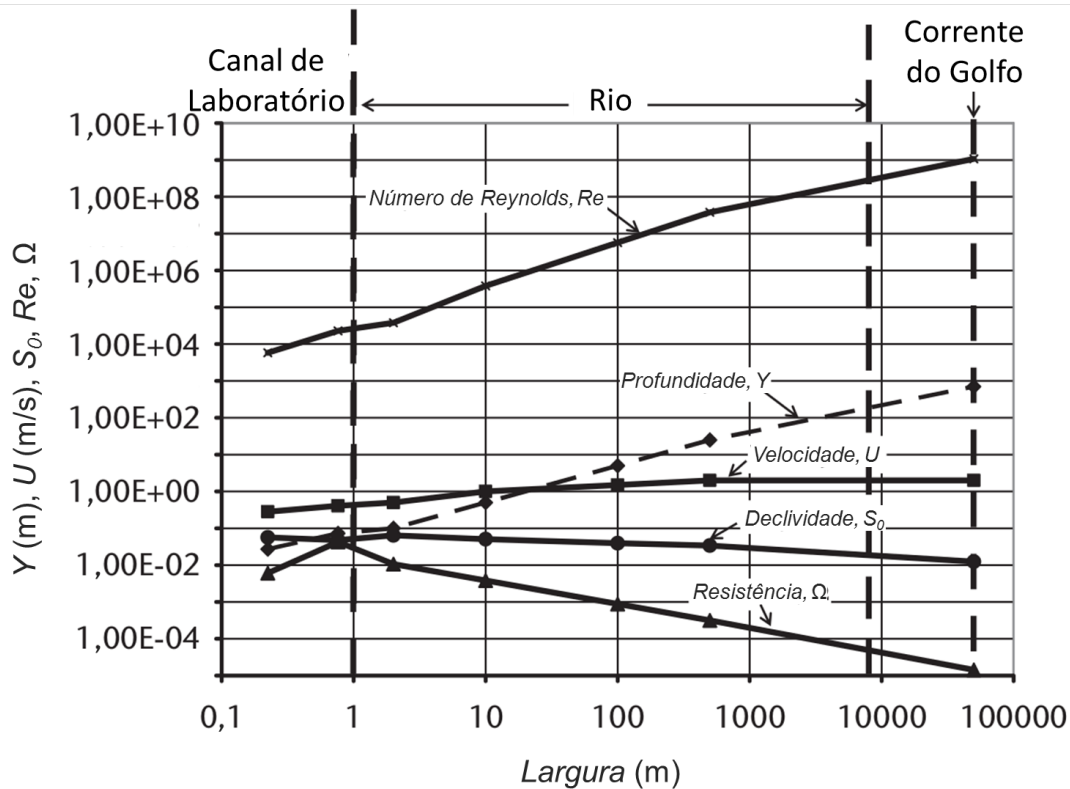


Figura 2.19: Estimativa de comportamento da profundidade (Y), velocidade (U), declividade (S_0), Número de Reynolds (Re) e resistência (Ω) em função da escala espacial (largura) para canais e rios. Adaptado de Dingman (2009)[14].

celeridade desta não pode ser considerada como a velocidade característica, pois ela não transporta energia com esta velocidade, não criando vórtices. Já para uma onda translatória, que transporta massa, a celeridade pode ser a velocidade de referência. Assim, as ondas oscilatórias não possuem força inercial na propagação da onda e devem-se analisar as forças causadas pelo próprio movimento orbital (*i.e.* às hodógrafas) que a onda desenvolve. Neste caso, o número de Reynolds pode ser relacionado às velocidades máximas ou mínimas da onda, envolvendo suas velocidades extremas.

Dingman (2009)[14] caracterizou qualitativamente as ondas que ocorrem em corpos hídricos naturais, dependendo dos motivos de sua formação (tabela 5.1). As características são avaliadas em pares.

- **Adição:** quando a onda provoca um aumento no volume do corpo hídrico, ou;
- **Deslocamento:** quando o volume de água do corpo é constante.
- **Solitária:** quando apenas uma única onda é desprendida, ou;
- **Periódica:** se existem repetidas ondas se formando periodicamente.

- **Translatória** ou **oscilatória**, como já mencionado anteriormente;
- **Dinâmica**: quando as características da onda podem ser deduzidas pelos princípios de momento ou energia, em conjunto com a conservação de massa, ou;
- **Cinética**: quando estas podem ser deduzidas unicamente pelos princípios de conservação de massa.

Tabela 2.2: Características qualitativas em corpos hídricos naturais produzidas por diversas causas (adaptado de Dingman, 2009 [14]).

<i>Causa</i>	<i>Adição ou Deslocamento</i>	<i>Solitária ou Periódica</i>	<i>Translatória ou Oscilatória</i>	<i>Dinâmica ou Cinemática</i>
Vento	Deslocamento	Periódica	Oscilatória ^a	Dinâmica
Seiche	Deslocamento	Periódica	Oscilatória	Dinâmica
Marés	Deslocamento	Periódica	Translatória	Dinâmica
Tsunami de terremoto	Deslocamento	Solitária	Translatória	Dinâmica
Escorregamento de terra	Deslocamento	Solitária	Translatória	Dinâmica
Falha de barragem	Adição	Solitária	Translatória	Cinética e dinâmica
Macaréu*	Adição	Solitária	Translatória	Dinâmica
Onda de inundação	Adição	Solitária	Translatória	Cinética e dinâmica

* também conhecido como pororoca.

^a ondas provocadas pelo vento se tornam translatórias ao se aproximarem da costa.

A turbulência em canais abertos é um tema há muito pesquisado e continua proporcionando desenvolvimento científicos importantes [62]. Com o desenvolvimento das simulações de escoamentos multifásicos, e com a possibilidade de se considerar a turbulência numericamente, seja por modelos ou simulando-a diretamente, inúmeras novas pesquisas tornaram-se viáveis de serem desenvolvidas.

Lee et al. (2011) [44] realizaram uma DNS em canais abertos considerando a interface ar-água examinando os efeitos da deformação da interface nas estruturas turbulentas da água. Um dos últimos avanços nesta área é a simulação de ressaltos hidráulicos utilizando DNS (MORTAZAVI et al., 2016) [58] ou mesmo um modelo de turbulência do tipo RANS (BAYON et al., 2016)[4].

A interação multifásica entre objetos sólidos, líquido e gás também são estudados. Xie et al. (2014) [99] desenvolveram sua pesquisa sobre estruturas turbulentas em escoamento em canais

abertos com dunas utilizando LES. Na mesma linha de pesquisa, Hamza et al. (2015)[25] desenvolveram sua pesquisa em turbulência de escoamento bifásicos sobre um obstáculo utilizando um modelo de turbulência do tipo RANS.

Uma análise do efeito da turbulência na aplicação de ondas em escoamentos bifásicos foi apresentado por Maza et al. (2015)[54], que simularam um tsunami que passa por uma bateria de cilindros, representando árvores. Utilizando um modelo de turbulência do tipo RANS, eles verificaram a perda de energia da onda causada por estes obstáculos.

Diversas pesquisas tem sido produzidas utilizando as equações de Navier-Stokes, com ou sem modelos de turbulência, para simular escoamentos com interface água-ar. Nenhuma das publicações aqui citadas apresentou um código de alta ordem (acima de segunda ordem). A utilização de esquemas de alta ordem é essencial na simulação de escoamentos turbulentos, principalmente para números de Reynolds altos, pois estes escoamentos possuem uma grande escala de vórtices, em que a precisão de cálculo nas menores escalas pode ser crucial.

3 METODOLOGIA MATEMÁTICA

Neste capítulo, é apresentada a metodologia matemática, tanto para o método *Level Set*, que foi escolhido para representar a interface entre os fluidos (§ 2.1.4), quanto para a Equação de Navier-Stokes e da continuidade, que representam a dinâmica dos fluidos como um todo. As justificativas para a escolha do método *Level Set* também são expostas.

3.1 EQUAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO E DA CONTINUIDADE

Este trabalho tem o objetivo de obter um código de alta ordem de precisão para escoamentos multifásicos. Para isso, realiza-se modificações em um código já existente, denominado *Incompact3d* ([41], [42]), que é utilizado para realizar simulações numéricas de escoamentos monofásicos com, apenas um fluido, com equações adimensionalizadas, utilizando um esquema centrado de sexta ordem, além de um método espectral para a resolução da equação de Poisson. Este é um código livre e aberto, sendo utilizado para a simulação numérica acadêmica nos últimos anos ([12] [98] [70] [16]). Ainda, o código *Incompact3d* possui a possibilidade de paralelização utilizando uma decomposição 2D, o que faz possível paralelizar os cálculos com até 100.000 núcleos computacionais. Isso faz dele uma ferramenta ideal para atingir o objetivo deste trabalho.

As equações de Navier-Stokes e da continuidade para escoamentos incompressíveis são consideradas originalmente no código *Incompact3d* em forma adimensional, como

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \Pi}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \right), \quad (3.1)$$

e

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (3.2)$$

onde u_i é a componente i -éssima da velocidade, t é o tempo, x_i é a coordenada espacial, Π é

a pressão e Re é o número de Reynolds. Para as equações 3.1 e 3.2, as variáveis são todas adimensionais.

O principal interesse em escoamentos multifásicos, para este trabalho, é o estudo de escoamentos e propagações de ondas em corpos hídricos, onde a massa específica e a viscosidade dinâmica, da água e do ar, possuem diferenças significativas. Nestes casos, a relação entre as massas específicas $\rho_\Gamma = \frac{\rho_{\text{água}}}{\rho_{\text{ar}}} \approx 830$ e as viscosidades dinâmicas $\mu_\Gamma = \frac{\mu_{\text{água}}}{\mu_{\text{ar}}} \approx 55$, em que Γ representa a condição de salto através da interface. Em escoamentos multifásicos, a viscosidade e a massa específica não são constantes no espaço e no tempo, e normalmente a equação de movimento é considerada, com adição da força da gravidade, como

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (3.3)$$

em que p é a pressão total e g é a aceleração da gravidade. Para a aplicação de escoamentos multifásicos água-ar, se criará uma versão dimensional do código *Incompact3d*.

3.1.1 EQUAÇÃO DE POISSON E TERMO DE PRESSÃO

Para resolver as equações de Navier Stokes, o código *Incompact3d* aplica o método de Projeção [8], o qual utiliza uma equação de Poisson para calcular a variação da pressão. Uma das vantagens no uso do código *Incompact3d* é a precisão, inclusive nas pequenas escalas, com um baixo custo computacional e, para isso, o código resolve a equação de Poisson com um método espectral, mesmo se condições de contorno de Dirichlet forem utilizadas [41].

Na utilização do método da Projeção, no passo da projeção se tem que

$$\frac{\vec{u} - \vec{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (3.4)$$

em que \vec{u}^* representa o campo de velocidades não corrigido. Aplica-se o operador divergência

$$\frac{\nabla \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right), \quad (3.5)$$

e considerando a equação da continuidade (eq. 3.2), encontra-se a equação de Poisson

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{\nabla \cdot \vec{u}}{\Delta t}. \quad (3.6)$$

Para aplicar a Transformada Rápida de Fourier (*Fast Fourier Transform* - FFT) à equação de Poisson (3.6), esta deve possuir coeficientes de derivada constantes em seu lado esquerdo, o que não ocorre na equação 3.6. Assim, como utilizado usualmente no código *Incompact3d*, para aplicar a técnica da FFT se deve utilizar a equação de Poisson da forma

$$\nabla^2 \left(\frac{p}{\rho} \right) = \frac{\nabla \cdot \vec{u}}{\Delta t}. \quad (3.7)$$

mesmo se ρ varia no espaço e no tempo. Para este fim, um algebrismo na equação da quantidade de movimento é necessário. Caso a massa específica não seja constante no espaço, o termo de pressão na equação do movimento (eq. 3.3) pode ser escrito como

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + p \frac{\partial (1/\rho)}{\partial x_i}, \quad (3.8)$$

onde $\Pi = \frac{p}{\rho}$. Outras formas matematicamente equivalentes à equação 3.8 são

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \Pi}{\partial x_i} + \frac{\Pi}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}, \quad (3.9)$$

e

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \Pi}{\partial x_i} + \Pi \frac{\partial \ln(\rho)}{\partial x_i}. \quad (3.10)$$

Mesmo que estas três formulações (eq. 3.8, 3.9 e 3.10) sejam matematicamente equivalentes, numericamente não o são. A formulação apresentada pela equação 3.9 será utilizada por motivos de simetria da derivada, que é calculada com o auxílio da função Heaviside (2.13) (procedimento explanado ainda neste capítulo, em § 3.2.2). Assim, a nova equação do movimento (eq. 3.3) a ser considerada neste trabalho toma a forma dimensional

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = g_i - \frac{\partial \Pi}{\partial x_i} - \frac{\Pi}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (3.11)$$

3.1.2 TERMOS ADVECTIVOS

A forma padrão do código *Incompact3d* para os termos advectivos é a formulação antissimétrica, dada por

$$u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (3.12)$$

que permite modelar mais adequadamente as pequenas escalas e possui menos efeitos de *aliasing* [39].

3.1.3 TERMOS DIFUSIVOS

O código *Incompact3d* resolve o termo difusivo

$$v \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \right), \quad (3.13)$$

enquanto que usualmente, códigos multifásicos adotam a forma

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]. \quad (3.14)$$

A grande vantagem de considerar os termos difusivos como na equação 3.13 é a boa precisão da derivada segunda que pode se atingir. Os erros são menores quando a derivada é calculada numericamente como uma derivada segunda e não como duas vezes uma derivada primeira [60], já que o *Incompact3d* não utiliza malha deslocada para o cálculo das velocidades. Ainda, o código conta com uma importante ferramenta que aplica a **hiperviscosidade** [43], que está diretamente relacionada com os coeficientes do esquema numérico utilizado para calcular as derivadas segundas. Assim, será considerada uma nova forma do termo difusivo, representada por

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = v \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.15)$$

em que o termo $\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i \partial x_j}$ é nulo ao considerar-se a equação da continuidade (3.2). Com esta nova formulação, mantem-se as vantagens da equação (3.13), enquanto se representa a variação de viscosidade presente em escoamentos multifásicos.

3.1.4 PRESSÃO HIDROSTÁTICA

Quando a força gravitacional é considerada em um escoamento multifásico, ela provoca uma drástica variação da pressão normalizada ($\Pi = p/\rho$) através da interface (fig. 3.1a), que pode criar problemas de dispersão numérica.

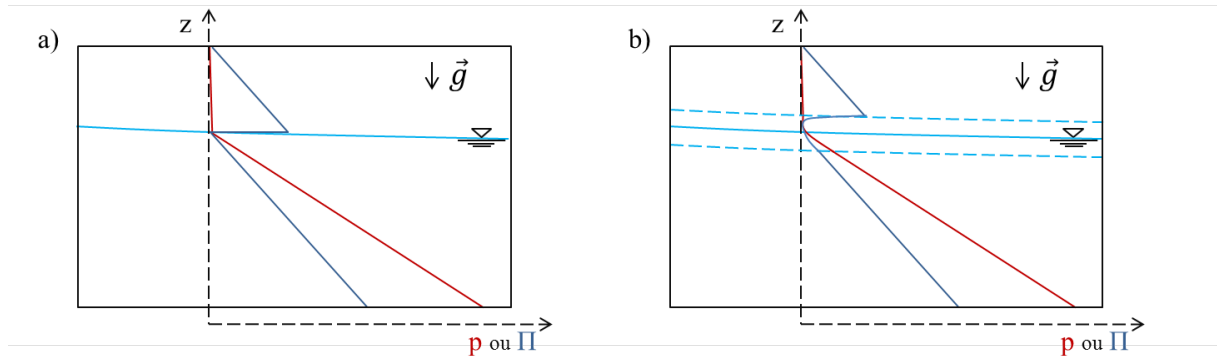


Figura 3.1: Representação da variação das pressões (p e Π) com a profundidade z ; a) interface com espessura nula, b) interface com espessura significativa.

Uma maneira de resolver este problema é separando a pressão total em duas parcelas: uma de pressão hidrostática e outra de pressão não hidrostática. Muitos métodos de rastreamento de interface realizam esta separação, escrevendo-a da forma

$$p = p_h + p_{nh} \quad \xrightarrow{\div \rho} \quad \frac{p}{\rho} = \Pi = \frac{p_h + p_{nh}}{\rho} = \Pi_h + \Pi_{nh}, \quad (3.16)$$

em que p_{nh} é a parcela da pressão não hidrostática, p_h é a parcela hidrostática, Π_{nh} é a parcela da pressão não hidrostática normalizada e Π_h é a parcela hidrostática normalizada. Ainda, outra vantagem de realizar esta separação é que o novo termo de pressão (eq. 3.9) é calculado semi-implicitamente (como mostrado em § 4.2.3).

A p_h segue a lei de variação com a altitude z da forma

$$\frac{dp_h}{dz} = \rho g, \quad (3.17)$$

e, para dois pontos distintos dentro do domínio (independente do fluido), que

$$\int_{z_1}^{z_2} \frac{dp_h}{dz} dz = \int_{z_1}^{z_2} \rho g dz \rightarrow p_{h,z_2} - p_{h,z_1} = \int_{z_1}^{z_2} \rho g dz. \quad (3.18)$$

Tomando que p_{h,z_2} está posicionado espacialmente acima de p_{h,z_1} , pode-se considerar a pressão atmosférica como $p_{h,z_2} = p_{atm}$. A posição z_1 se refere a uma altura z qualquer e a posição z_2 se refere ao topo do domínio, ou seja L_z . Assim, definimos

$$p_{h,z} = g \int_z^{L_z} \rho dz + p_{atm} \quad \xrightarrow{\div \rho} \quad \Pi_{h,z} = \frac{g}{\rho} \int_z^{L_z} \rho dz + \Pi_{atm}. \quad (3.19)$$

E, por fim, a derivada da pressão hidrostática normalizada fica

$$\frac{\partial \Pi_{h,z}}{\partial x_i} = g \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \int_z^{L_z} \rho dz \right) = \frac{g}{\rho^2} \left[\rho \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\int_z^{L_z} \rho dz \right) - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \int_z^{L_z} \rho dz \right]. \quad (3.20)$$

A p_h e sua derivada podem ser calculadas como demonstrado e a p_{nh} é calculada como originalmente na equação da quantidade movimento, ou seja, usando uma equação de Poisson, resolvida com um método espectral.

3.1.5 TENSÃO SUPERFICIAL

O termo da força devida à tensão superficial é subtraído do lado direito da equação de Navier-Stokes 3.11 e é dado por

$$\frac{1}{\rho} \sigma \kappa \delta_s n_{ij} \quad (3.21)$$

a formulação matemática da curvatura κ , do vetor normal n_{ij} e o Delta de Dirac δ_s são obtidas pelo método de representação da interface. Para uma curvatura côncava, tem-se que κ possui sinal negativo, enquanto que para uma curvatura convexa, κ possui sinal positivo.

O desenvolvimento conceitual da tema "tensão superficial" foi apresentada em § 2.1.7 e a definição matemática da curvatura, do vetor normal e Delta de Dirac serão apresentadas ainda neste capítulo.

3.2 INTERFACE - MÉTODO LEVEL SET

O método *Level Set* foi escolhido para representar a interface entre os fluidos, pois considera esta interface com uma função suave para representar a transição entre os mesmo. Esta característica é importante, já que o método de representação da interface, neste trabalho, é utilizado

em conjunto com a equação de dinâmica dos fluidos calculada por esquemas compactos centrados de alta ordem. Caso estes esquemas não sejam utilizados adequadamente, podem introduzir erros persistentes de dispersão numérica.

3.2.1 FUNÇÃO DA DISTÂNCIA

Proposto por Osher e Sethian (1988)[66], o método *Level Set* utiliza como variável a função distância mínima entre um ponto qualquer do domínio e a interface, da forma

$$d(\vec{x}) = \min(|\vec{x} - \vec{x}_\Gamma|), \quad (3.22)$$

em que \vec{x} é o vetor posição de um ponto do escoamento a ser analisado e \vec{x}_Γ é o vetor posição de um ponto da interface. Assim, $d(\vec{x})$ representa a menor distância de um ponto do domínio à interface.

Para diferenciar os fluidos em questão, utiliza-se a variável ϕ que é uma função distância à qual é atribuída um sinal (*Signed Distance Function* - figura 3.2) dependendo do fluido em que o vetor posição \vec{x} está localizado, definida como

$$\phi(\vec{x}) = \begin{cases} +d(\vec{x}) & : \vec{x} \text{ está no fluido 1,} \\ d(\vec{x}) = 0 & : \vec{x} \text{ está na interface,} \\ -d(\vec{x}) & : \vec{x} \text{ está no fluido 2.} \end{cases} \quad (3.23)$$

Uma característica matemática importante da função distância $\phi(\vec{x})$ é que $|\nabla\phi| = 1$. Garantindo esta condição, a função distância representará verdadeiramente uma distância, e características como o vetor normal (\vec{n}) à interface e a curvatura (κ) podem ser calculadas por

$$\vec{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}, \quad (3.24)$$

e

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right). \quad (3.25)$$

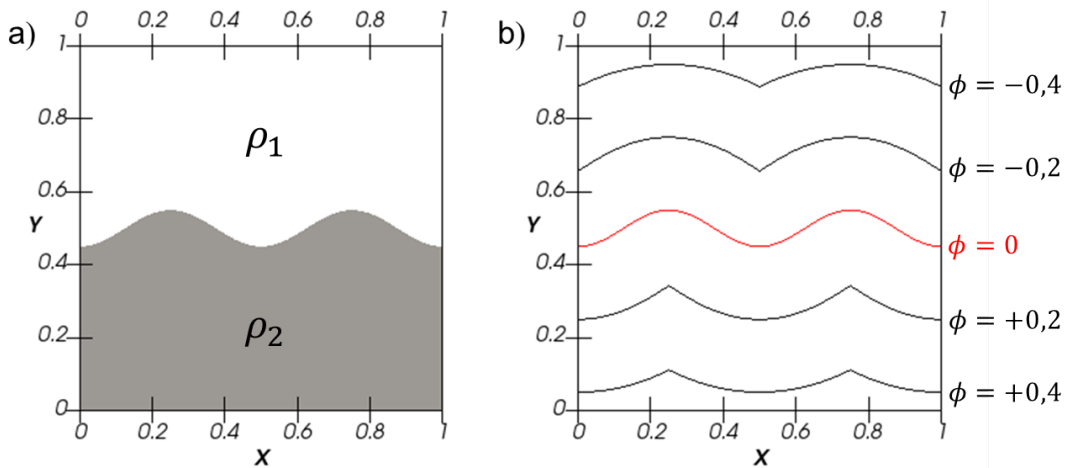


Figura 3.2: Interface de dois fluidos a) interface original, b) isolinhas de ϕ do método *Level Set*.

3.2.2 ADVECCÃO DA INTERFACE E PROPRIEDADES FÍSICAS

O movimento da interface é calculado por meio de uma equação de advecção

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi = 0, \quad (3.26)$$

em que \vec{v} é o vetor velocidade do escoamento. Considerar que a viscosidade e a massa específica são fisicamente descontínuas através da interface pode, facilmente, ocasionar problemas de dispersão e difusão numéricas. Para evitar estes problemas, o método *Level Set* utiliza uma função Heaviside suave (I), que auxilia na variação destas propriedades físicas. A expressão de I é dada por

$$I(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi < -\delta\Delta_c, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\delta\Delta_c} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\delta\Delta_c}\right) \right] & \text{se } |\phi| \leq \delta\Delta_c, \\ 1 & \text{se } \phi > \delta\Delta_c. \end{cases} \quad (3.27)$$

em que Δ_c é a discretização numérica característica do escoamento (conceito definido no Capítulo 4) e δ é um coeficiente que relaciona o número de células envolvidas na variação desta função (normalmente, se utiliza $\delta = 1,5$ para manter a interface fina [37] [38] [18] [76], porém, no presente trabalho, valores maiores precisam ser utilizados, como será discutido em § 4.3.3). Logo, o termo $\delta\Delta_c$ representa metade da espessura virtual da interface (figura 3.3) que está relacionada com a suavidade da função Heaviside.

A variação de uma propriedade física qualquer η através da interface é calculada se assumindo a forma

$$\eta = (1 - I)\eta_1 + I\eta_2, \quad (3.28)$$

em que η_1 e η_2 são as propriedades físicas, como a viscosidade e a massa específica, do fluido 1 e do fluido 2. A função delta de Dirac (δ_s), utilizada para o cálculo do termo de tensão superficial (eq. 3.21), pode ser obtida com o apoio das derivadas da função Heaviside (3.27 - figura 3.3), tendo-se

$$\delta_s \vec{n} = \nabla I(\phi). \quad (3.29)$$

O δ_s representa um pulso na qual a área entre a curva e o eixo horizontal é um.

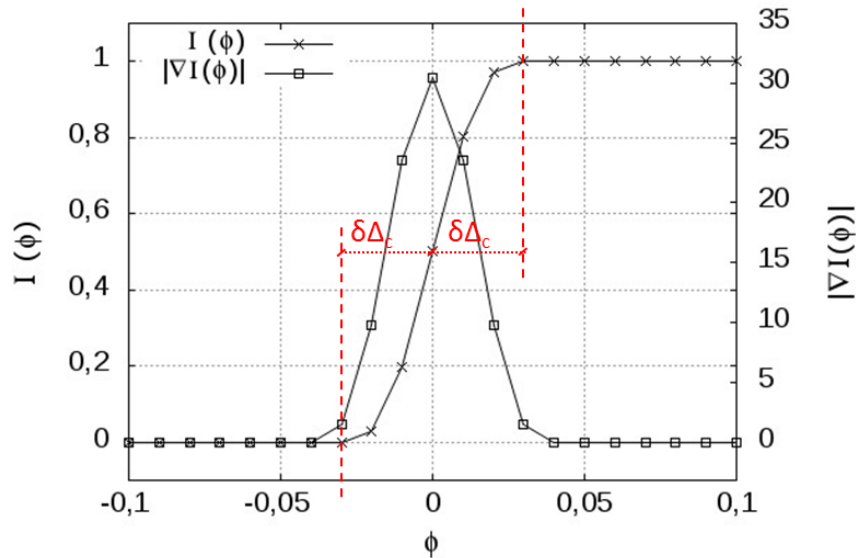


Figura 3.3: Exemplo de Função Heaviside e delta de Dirac com $\delta = 3$ e $\Delta_c = 0,01$.

3.2.3 REINICIALIZAÇÃO DA FUNÇÃO DISTÂNCIA

A necessidade de reinicializar a função distância foi discutida pela primeira vez por Chopp (1993)[7]. A advecção de ϕ (eq. 3.26) pode fazer com que esta variável não represente mais uma distância ($|\nabla\phi| \neq 1$), por causa da complexidade dos campos de velocidades utilizados para realizar esta advecção. Para resolver este problema, a variável ϕ tem que ser reinicializada para manter a característica de função distância.

Bridson (2008)[5] menciona que existem duas maneiras principais de reinicializar ϕ : utilizando um método de equações diferenciais parciais, que aproxima numericamente a função

advectada a uma função distância novamente ($|\nabla\phi| = 1$); ou, utilizando um método geométrico, como o *Fast Marching Method* [65], que calcula a função distância para cada passo de tempo, como na condição inicial, a partir da interface ($\phi = 0$). O primeiro método possui menor custo computacional, além de ser mais simples de se programar para um código paralelizado.

Neste trabalho, é utilizada a reinicialização proposta por Sussman et al. (1994)[88] como uma equação Eikonal dependente do tempo, representada por

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \text{sgn}(\phi_0)(|\nabla\phi| - 1) = 0, \quad (3.30)$$

em que sgn é o sinal da função, ϕ_0 é a função não reinicializada e τ é um tempo fictício (ou pseudo-tempo), relacionado com a discretização espacial (é comum utilizar $\Delta\tau = 0,1\Delta x$ [88] [90] [76]), pois a reinicialização não atua ao longo do tempo, e sim ao longo do espaço. A reinicialização induz que a variável ϕ seja novamente uma função distância e será mais efetiva nas proximidades de $\phi = 0$. Quando o termo $|\nabla\phi| = 1$, a reinicialização não é efetivada porque ϕ já é uma função distância por definição.

Considerar que $|\nabla\phi| = 1$ é pré-requisito de uma função distância, exceto para as regiões da função ϕ que possuem mais de um ponto equidistante à interface. Isto causa uma singularidade, pois a função nestes lugares é descontínua; estas estruturas singulares são denominadas *esqueletos* [17]. Na figura 3.4 é mostrada uma interface fictícia ($\phi = 0$) e seu esqueleto.

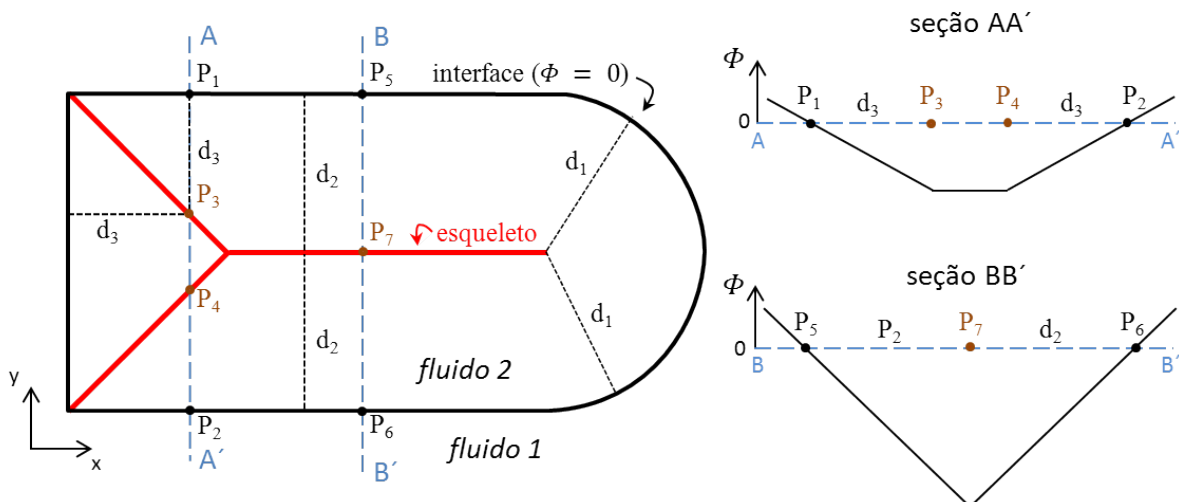


Figura 3.4: Representação dos esqueletos pertencentes a uma interface.

Com o uso de esquemas essencialmente não oscilatórios* e com poucos pontos para representar a variação suave da interface, a existência destes esqueletos não causa problemas numéricos graves, pois os erros não são propagados e são suavizados com o tempo. Logo, o gradiente calculado próximo aos *esqueletos* não deve afetar a solução da função que representa a interface ($\phi = \pm\delta\Delta_c$). Em esquemas oscilatórios, a propagação destes erros é maior, o que os torna difíceis de serem utilizados para resolver este tipo de problema.

Erros na advecção e o uso do procedimento de reinicialização fazem com que o método *Level Set* apresente erros na conservação da massa. Para garantir a conservação de volume, Son (2001)[83] propôs um passo de correção de volume, calculado por

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} = (V - V_0) |\nabla\phi|, \quad (3.31)$$

onde V é o volume de um dos fluidos calculado com o auxílio de ϕ e V_0 é o volume deste mesmo fluido que respeita a conservação de volume. No presente trabalho, uma pequena modificação foi feita nesta equação para manter a homogeneidade dimensional, encontrando-se

$$\frac{\partial\phi}{\partial\tau} = \frac{(V - V_0)}{V_0} |\nabla\phi|. \quad (3.32)$$

3.2.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA ϕ

Alguns autores (SON, 2001 [83]; OLSSON & KREISS, 2005 [64]) consideram a condição de contorno para ϕ como $\vec{n} \cdot \nabla\phi = 0$ (onde \vec{n} é a normal ao plano que define a condição de contorno, e não à interface), mesmo que isto crie resultados imprecisos próximos à condição de contorno. Isto pode ser feito, pois com o uso de esquemas não oscilatórios, os resultados insatisfatórios da condição de contorno não se propagam, não afetando os resultados próximos de $\phi = 0$. Procedimentos como a reinicialização de ϕ ajudam a minimizar, ou mesmo evitar, problemas com estas condições de contorno. Caso uma condição de deslizamento livre ou condição periódica for usada para o contorno de ϕ , estruturas de *esqueletos* podem ser criadas no contorno do domínio.

*Um esquema essencialmente não oscilatório não propicia fenômenos do tipo Gibbs, que gera oscilações espúrias de primeira ordem nos pontos de descontinuidade [28]. Certamente, quando utilizado de forma inadequada, estes esquemas podem cancelar oscilações reais do escoamento.

3.2.5 ESQUEMAS COMPACTOS PARA O MÉTODO *LEVEL SET* (COMPACTLSM)

Uma nova forma de resolver as equações propostas pelo método *Level Set* é apresentada no presente trabalho, denominada *CompactLSM*. Mesmo sendo fortemente indicado o uso de esquemas não oscilatórios para os cálculos do método *Level Set*, os esquemas compactos são avaliados para a resolução deste método, pois o desempenho numérico (com relação ao tempo de cálculo e à precisão) é muito superior ao do esquema WENO. Para que seja possível utilizar os esquemas compactos para esta tarefa, adiciona-se às equações de advecção 3.26 e reinicialização 3.30 um termo com derivada segunda, que numericamente possui valor desprezível para curvaturas suaves, como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla^2 \phi, \quad (3.33)$$

e

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{sgn}(\phi_0) (|\nabla \phi| - 1) = \gamma \nabla^2 \phi, \quad (3.34)$$

onde γ pode ser interpretado como um parâmetro de viscosidade virtual que fará com que o termo da derivada segunda seja numericamente desprezível nas escalas de interesse.

O termo de derivada segunda é utilizado para aplicar a hiperviscosidade (§ 2.2.3) que reduzirá os erros de dispersão numérica, presentes neste tipo de problema, viabilizando os cálculos ao atribuir estabilidade numérica sem reduzir a precisão do método. O valor adotado para γ deve ser cuidadosamente obtido no procedimento de verificação do método apresentado, e está intimamente ligado com o valor da hiperviscosidade (atribuído pela viscosidade espectral definida em § 4.2.1) e dos limites de estabilidade do esquema numérico temporal utilizado.

3.3 RESUMO DA METODOLOGIA MATEMÁTICA

Diversas modificações foram realizadas para que a metodologia matemática da equação de movimento levasse em consideração a variação das características físicas, isto é, da massa específica e do coeficiente de viscosidade. Para isso, a equação da quantidade de movimento utilizada, levando em conta as modificações anteriormente apresentadas, é

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = g_i - \frac{\partial \Pi}{\partial x_i} - \frac{\Pi}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{\sigma}{\rho} \kappa \delta_s n_{ij}, \quad (3.35)$$

onde a pressão foi decomposta em duas parcelas $\Pi = \Pi_n + \Pi_{nh}$. Cabe ressaltar que no código *Incompact3d* não modificado por este trabalho, esta equação normalmente toma a forma

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial \Pi}{\partial x_i} + \nu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \right). \quad (3.36)$$

A equação da continuidade não foi modificada e é considerada como a equação 3.2, já que não existe variação no volume das fases a serem simuladas.

Diversas condições iniciais e de contorno podem ser utilizadas para esta metodologia, e serão apresentadas no capítulo: Resolução Numérica (Capítulo 4).

Para o cálculo da interface e das variações da viscosidade e da massa específica, são utilizadas a nova metodologia *CompactLSM*, composta pelas equações

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla^2 \phi, \quad (3.37)$$

e a função Heaviside

$$I(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi < -\delta\Delta_c, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\delta\Delta_c} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{\pi\phi}{\delta\Delta_c} \right) \right] & \text{se } |\phi| \leq \delta\Delta_c, \\ 1 & \text{se } \phi > \delta\Delta_c, \end{cases} \quad (3.38)$$

em conjunto com

$$\rho = (1 - I)\rho_1 + I\rho_2 \quad e \quad \mu = (1 - I)\mu_1 + I\mu_2. \quad (3.39)$$

Para manter a característica de função distância na regiões do domínio próximas à interface, é utilizada a reinicialização

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{sgn}(\phi_0) (|\nabla \phi| - 1) = \gamma \nabla^2 \phi, \quad (3.40)$$

e, por fim, para aperfeiçoar a conservação de volume, é aplicada a equação

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{(V - V_0)}{V_0} |\nabla \phi|. \quad (3.41)$$

4 RESOLUÇÃO NUMÉRICA

A resolução numérica utilizada para o modelo matemático da interface e para as equações de quantidade de movimento e da continuidade é desenvolvida neste capítulo. Assim, o código proposto por este trabalho, denominado de *Incompact3d - Level Set* (ou *Incompact3d-LS*), é apresentado numericamente.

4.1 *INCOMPACT3D-LS*

O *Incompact3d* ([41], [42]) é um código para o cálculo adimensional de escoamentos com precisão das derivadas e interpolações de sexta ordem. Utiliza um método espectral para resolver a equação de Poisson proveniente do método da Projeção. O código utiliza a estratégia de decomposição *2D* para adquirir um alto nível de paralelização, podendo ser utilizado em até cem mil núcleos computacionais. Este código é programado em diferenças finitas para malha cartesiana, o que oferece a oportunidade de implementar esquemas compactos de alta ordem para a discretização espacial, sem maiores complicações. Também é utilizado o Método de Fronteiras Imersas (*Immerse Boundary Method - IBM*) que permite a implementação de sólidos com geometrias diversas.

A principal originalidade do código é a resolução da equação de Poisson completamente no espaço espectral, independente das condições de contorno utilizadas (periódica, deslizamento livre, não deslizamento, entrada/saída, entre outras). A malha da pressão é deslocada para o centro do elemento da malha de velocidades, reduzindo oscilações espúrias da pressão [15]. Entretanto, a malha de velocidade é colocalizada para todas as direções nos nós.

Para atender o objetivo proposto no presente trabalho de possibilitar simulações de escoamentos multifásicos, diversas modificações foram implementadas no código *Incompact3d*.

- Considerou-se uma mudança de variáveis adimensionais para dimensionais;

- uma nova etapa de cálculo foi adicionada ao código: a atualização das propriedades físicas pelo método *Level Set* (figura 4.1);
- modificou-se o termo de pressão;
- considerou-se que a viscosidade e a massa específica são variáveis ao longo do tempo e espaço, colocadas com as velocidades (figura 4.2);
- adicionou-se o termo referente à tensão superficial;
- adicionou-se o termo referente à gravidade.

O código *Incompact3d*, com estas modificações é denominado *Incompact3d-LS*.

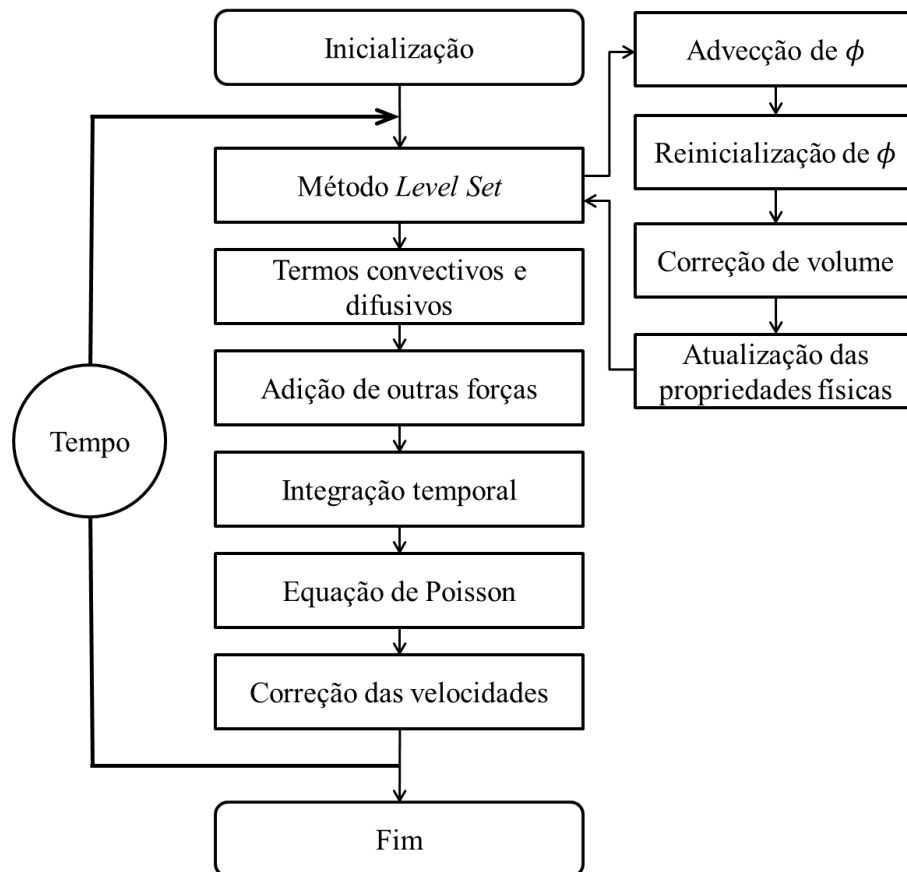


Figura 4.1: Fluxograma do código *Incompact3d-LS*.

4.2 EQUAÇÕES DE MOMENTUM

A equação de momentum (eq. 3.35) e da continuidade (eq. 3.2) são utilizadas em conjunto para resolver problemas de escoamentos incompressíveis multifásicos, com o auxílio da

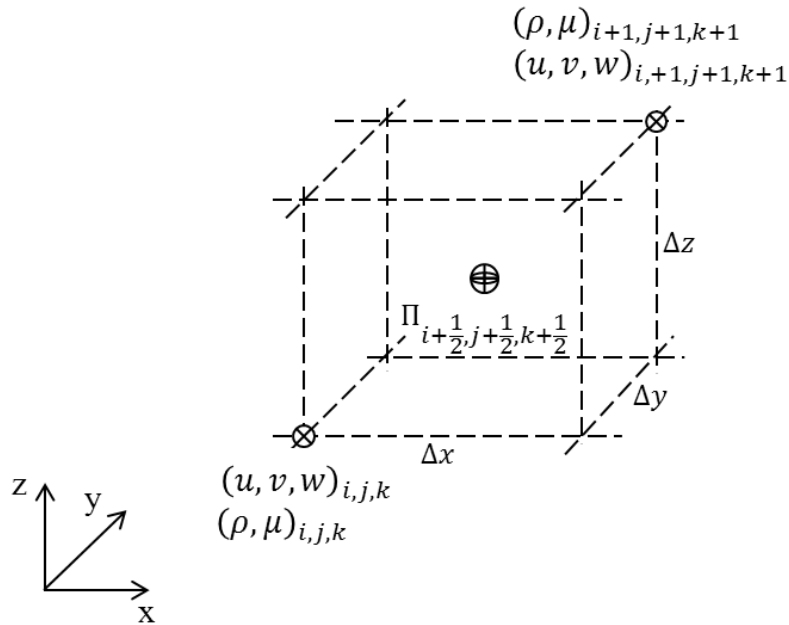


Figura 4.2: Localização em que as variáveis são calculadas na malha.

metodologia *CompactLSM*. O método da Projeção[8] é utilizado para realizar este cálculo, necessitando resolver a equação de Poisson (eq. 3.7) para calcular a variação da pressão.

4.2.1 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

Dois métodos numéricos são utilizados para o cálculo da equação 3.35: o primeiro é baseado em diferenças finitas, utilizando esquemas compactos centrados de 6ª ordem para as derivadas primeiras, segundas e interpolações [45]; o segundo é baseado na Transformada Rápida de Fourier (*Fast Fourier Transform* - FFT), que auxilia na resolução da equação de Poisson no campo espectral.

a) Esquemas compactos centrados

Lele (1992) [45] apresentou os esquemas compactos centrados para diversas ordens de precisão, incluindo derivadas e interpolações. Se f é uma variável diferenciável no espaço, a expressão considerada para a aproximação da primeira derivada é da forma:

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x}, \quad (4.1)$$

cujos coeficientes estão relacionados entre si em função da ordem de precisão desejada, pelas expressões

$$\left. \begin{aligned} a + b + c &= 1 + 2\alpha && \text{para ordem de precisão } O \geq 2, \\ a + 2^2b + 3^2c &= 2\frac{3!}{2!}\alpha && \text{para } O \geq 4, \quad e \\ a + 2^4b + 3^4c &= 2\frac{5!}{4!}\alpha && \text{para } O \geq 6. \end{aligned} \right\} \dots \quad (4.2)$$

Assim, pode-se equacionar

$$a = \frac{4 + 2\alpha}{3}, \quad b = \frac{-1 + 4\alpha}{3} \quad e \quad c = \frac{1 - 3\alpha}{30}. \quad (4.3)$$

Para se reduzir o *stencil* considerando $c = 0$, adota-se $\alpha = 1/3$, obtendo $a = 14/9$ e $b = 1/9$. Esta aproximação é de sexta ordem que possui uma característica "quasi-espectral" por utilizar das próprias derivadas nos pontos adjacentes ($\alpha \neq 0$).

Analogamente, a expressão para a segunda derivada é

$$\alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2}, \quad (4.4)$$

em que os coeficientes devem possuir as relações

$$\left. \begin{aligned} a + b + c &= 1 + 2\alpha && \text{para } O \geq 2, \\ a + 2^2b + 3^2c &= \frac{4!}{2!}\alpha && \text{para } O \geq 4, \quad e \\ a + 2^4b + 3^4c &= \frac{6!}{4!}\alpha && \text{para } O \geq 6. \end{aligned} \right\} \dots \quad (4.5)$$

Da expressão formada pelas equações 4.5, pode-se obter

$$a = \frac{6 - 9\alpha}{4}, \quad b = \frac{-3 + 24\alpha}{5}, \quad c = \frac{2 - 11\alpha}{20}. \quad (4.6)$$

Para se reduzir o *stencil* considerando $c = 0$, adota-se $\alpha = 2/11$, obtendo $a = 12/11$ e $b = 3/11$, com aproximação também de sexta ordem.

Os esquemas compactos também são utilizados para calcular as derivadas primeiras para as

variáveis deslocadas, da forma

$$\alpha_p f'_{i-1/2} + f'_{i+1/2} + \alpha_p f'_{i+3/2} = a_p \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + b_p \frac{f_{i+2} - f_{i-1}}{\Delta x}, \quad (4.7)$$

e com $\alpha_p = 9/62$, tem-se $a_p = 63/62$ e $b_p = 17/62$ (Lele, 1992 [45]). Por fim, utiliza-se a interpolação para deslocar variáveis por

$$\alpha_l f_{i-1/2} + f_{i+1/2} + \alpha_l f_{i+3/2} = a_l \frac{f_{i+1} - f_i}{2} + b_l \frac{f_{i+2} - f_{i-1}}{2}, \quad (4.8)$$

com $\alpha_l = 3/10$, $a_l = 3/4$ e $b_l = 1/20$ (Lele, 1992 [45]).

Assim, para deslocar uma variável definida no nó i, j, k para o nó deslocado $i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}$ são necessárias três operações de interpolação, uma em cada direção. Para calcular uma derivada deslocada, são necessários dois procedimentos de interpolação e um de derivação deslocada. A derivação deslocada (eq. 4.7) realiza a interpolação em conjunto com a derivação. Por exemplo: para se calcular $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}$ a variável $f_{i,j,k}$ deve ser interpolada nas direções j e k (utilizando a equação 4.8 uma vez para a direção j e outra vez para a direção k), obtendo-se $f_{i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}$. Após, deriva-se esta nova variável na direção x utilizando a equação 4.7.

Hiperviscosidade e ILES

Para controlar os erros de dissipação numérica e, conseqüentemente, reduzir os erros de dispersão, a hiperviscosidade (§ 2.2.3) é aplicada modificando os coeficientes das derivadas segundas (equação 4.4). Para calcular o número de onda modificado segundo k'' , utiliza-se a equação proveniente do desenvolvimento da série de Taylor

$$k'' \Delta x^2 = \frac{2a(1 - \cos(k\Delta x)) + \frac{b}{2}(1 - \cos(2k\Delta x)) + \frac{2c}{9}(1 - \cos(3k\Delta x))}{1 + 2\alpha \cos(k\Delta x)}. \quad (4.9)$$

Pode-se fornecer um valor de k'' referente ao corte da malha (no núcleo $k_c \Delta x = \pi$) pela expressão

$$k'' \Delta x^2|_{\pi} = \frac{36a + 4c}{9(1 - 2\alpha)}, \quad \text{logo} \quad k''|_{\pi} = k''_c. \quad (4.10)$$

Nota-se que utilizando esta estratégia $c \neq 0$. Em conjunto com as relações de coeficientes para as derivadas segundas (equação 4.6), é possível de se obter o novo conjunto de coeficientes para

esta derivada

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{272 - 45k_c''\Delta x^2}{416 - 90k_c''\Delta x^2}, & a &= \frac{48 - 135k_c''\Delta x^2}{1664 - 360k_c''\Delta x^2}, \\ b &= \frac{528 - 81k_c''\Delta x^2}{208 - 45k_c''\Delta x^2}, & c &= \frac{-432 + 63k_c''\Delta x^2}{1664 - 360k_c''\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Como exemplo, utilizando o conjunto de equações 4.11, pode-se fixar o valor de $k''\Delta x^2$ para que seja igual a $n\pi^2$ no núcleo $k\Delta x = \pi$ em que n possui valor maior que 0,695. Valores de n menores do que 0,695 a metodologia provocariam uma "hipoviscosidade" ao invés de uma hiperviscosidade. Na figura 4.3[43], apresenta-se a curva do número de onda modificado sem a utilização da hiperviscosidade $k''\Delta x^2 = \frac{48}{7}$ (6CCSD2) e a curva utilizando a hiperviscosidade com $n = 1$ (6CCVD2). Para reduzir as oscilações nas pequenas escalas, pode-se ainda aumentar expressivamente o valor de $k''\Delta x^2$ até um ponto qualquer desejado. A escolha de $k''\Delta x^2$ deve ser feita com cuidado, pois um valor muito alto pode causar instabilidades numéricas relacionadas a dissipação, além de descaracterizar a difusão natural do escoamento que se quer representar.

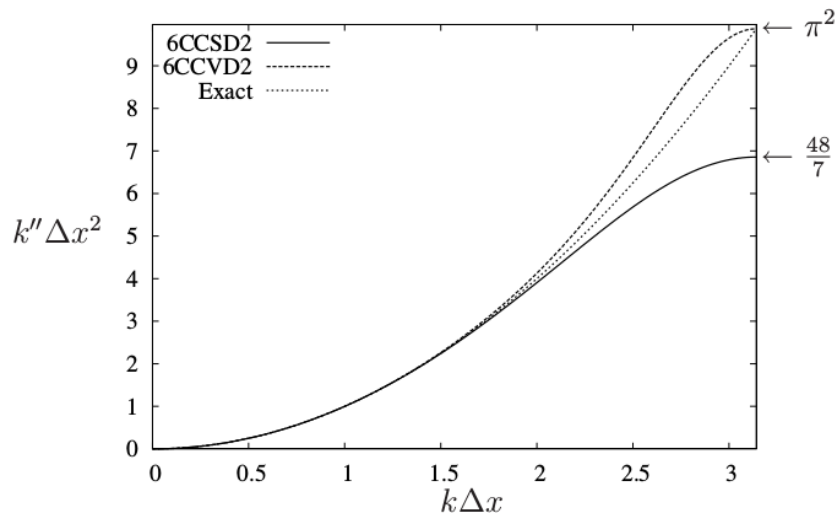


Figura 4.3: Exemplo de aplicação da hiperviscosidade para o *Incompact3d*. 6CCSD2 significa: esquema compacto centrado subdissipativo de sexta ordem, 6CCVD2 significa: esquema compacto centrado com dissipação variada de sexta ordem (representando o uso da hiperviscosidade) e *Exact* é a solução exata da equação de convecção difusão 2.32 [43].

Para ter mais liberdade no controle da dissipação numérica para aplicar o ILES (Implicit Large Eddy Simulation) [43][11], além do no núcleo $k\Delta x = \pi$, fixa-se também o valor de k'' para um novo núcleo em um número de onda intermediário (adotado na literatura $k\Delta x = 2\pi/3$). Ao se fixar um segundo ponto se reduz a ordem da derivada segunda, o que levaria o esquema numérico, que era de sexta ordem, se tornar de quarta ordem de precisão. A fim de evitar a perda

na ordem da derivada, o presente trabalho utiliza a metodologia de Dairay et al. (2017) [11] que adiciona à equação 4.4 mais um termo na expressão que representa a derivada compacta centrada, como:

$$\alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2} + d \frac{f_{i+4} - 2f_i + f_{i-4}}{16\Delta x^2}. \quad (4.12)$$

Ao fixar uma precisão de sexta ordem, dois coeficientes podem ser livremente escolhidos em (4.12), obtendo-se o seguinte conjunto de coeficientes

$$\begin{aligned} a + b + c + d &= 1 + 2\alpha && \text{para } O \geq 2, \\ a + 2^2b + 3^2c + 4^2d &= \frac{4!}{2!}\alpha && \text{para } O \geq 4, \quad \text{e} \\ a + 2^4b + 3^4c + 4^4d &= \frac{6!}{4!}\alpha && \text{para } O \geq 6. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Novamente, para calcular o número de onda modificado segundo, agora com o termo adicional, utiliza-se a equação proveniente do desenvolvimento da série de Taylor, chegando-se em

$$k''\Delta x^2 = \frac{2a(1 - \cos(k\Delta x)) + \frac{b}{2}(1 - \cos(2k\Delta x)) + \frac{2c}{9}(1 - \cos(3k\Delta x)) + \frac{d}{8}(1 - \cos(4k\Delta x))}{1 + 2\alpha \cos(k\Delta x)}. \quad (4.14)$$

Com a relação 4.14, considerando $k\Delta x = \frac{2\pi}{3}$, obtém-se um novo k'' modificado (k''_m), da forma

$$k''\Delta x^2|_{2\pi/3} = \frac{48a + 12b + 3d}{16(1 - \alpha)}, \quad \text{em que } k''|_{2\pi/3} = k''_m \quad (4.15)$$

Utilizando as relações dos coeficientes apresentados em (4.13), e considerando k''_m (eq. 4.15), um novo conjunto de coeficientes para a derivada segunda fica definido por

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{405k''_c\Delta x^2 - 1280k''_m\Delta x^2 + 2736}{810k''_c\Delta x^2 - 1280k''_m\Delta x^2 + 288}, & a &= \frac{256k''_m\Delta x^2 - 4329k''_c\Delta x^2 + 1120k''_c k''_m\Delta x^4 - 2288}{3240k''_c\Delta x^2 - 5120k''_m\Delta x^2 + 1152}, \\ b &= \frac{2115k''_c\Delta x^2 - 1792k''_m\Delta x^2 - 280k''_c k''_m\Delta x^4 + 1328}{405k''_c\Delta x^2 - 640k''_m\Delta x^2 + 144}, & c &= \frac{-9(855k''_c\Delta x^2 + 256k''_m\Delta x^2 - 160k''_c k''_m\Delta x^4 - 2288)}{8(405k''_c\Delta x^2 - 640k''_m\Delta x^2 + 144)}, \\ d &= \frac{198k''_c\Delta x^2 + 128k''_m\Delta x^2 - 40k''_c k''_m\Delta x^4 - 736}{405k''_c\Delta x^2 - 640k''_m\Delta x^2 + 144}. \end{aligned}$$

Utilizando esta técnica, podem-se concentrar os erros de dissipação apenas nas menores escalas, minimizando, ou até mesmo eliminando, as oscilações espúrias (*wiggles*).

Para se aplicar o ILES é aconselhável imitar os efeitos dissipativos de algum modelo LES já popularizado, tendo-se assim alguma expectativa de dissipação numérica a ser aplicada. Dairay et al. (2017) [11] utilizaram a hiperviscosidade para imitar o Método *Spectral Vanishing Viscosity* (SVV). Primeiramente, identificou-se a dissipação provocada pelo SVV e depois modificaram-se os coeficientes dado pela equação 4.16 para tornar o seu erro de dissipação numérica semelhante ao da dissipação esperada pelo SVV. Esta metodologia é aplicada, considerando-se uma viscosidade espectral (ν_s'') definida como

$$\nu_s'' = \nu \frac{k'' - k^2}{k^2}. \quad (4.16)$$

O método SVV comporta-se como

$$\nu_s(k) = \begin{cases} 0 & \text{se } k < 0,3k_c, \\ \nu_0 \exp \left[- \left(\frac{k_c - k}{0,3k_c - k} \right)^2 \right] & \text{se } 0,3k_c \leq k \leq k_c, \end{cases} \quad (4.17)$$

em que ν_0 é um parâmetro de controle do valor da viscosidade espectral no corte da malha em que ν_s/ν_0 fornece o formato da curva de dissipação. Assim, para imitar o efeito do SVV, utilizam-se as aproximações do número de onda modificado segundo, como

$$k_c'' = (1 + \nu_0/\nu) k_c^2, \quad (4.18)$$

e

$$k_m'' = (1 + \nu_s/\nu) \frac{4k_c^2}{9}. \quad (4.19)$$

Condições de contorno

Quatro diferentes condições de contorno podem ser consideradas em cada direção espacial: condição periódica, condição de von Neumann (deslizamento livre), condição de Dirichlet (prescrita), e condição de saída livre (convecção livre). As condições de contorno periódicas

e de deslizamento livre utilizam os esquemas definidos pelas equações 4.1 e 4.4 para todos os pontos considerados. Assim, nos pontos dos contornos $i = 1$ e $i = n_x$, deve ser realizada uma substituição de valores com pontos fantasmas em f_{-1} , f_0 , f_{n_x+1} , f_{n_x+2} . Já para a condição de contorno do tipo Dirichlet, utiliza-se derivadas descentradas.

Expondo em mais detalhes, os quatro tipo de condição de contorno são:

- Condição de contorno periódica: as substituições para f podem ser descritas como $f_0 \rightarrow f_{n_x}$, $f_{-1} \rightarrow f_{n_x-1}$, e para suas derivadas como $f'_0 \rightarrow f'_{n_x}$, $f''_0 \rightarrow f''_{n_x}$;
- Condições de deslizamento livre: tem-se que $f_0 \rightarrow f_2$, $f_{-1} \rightarrow f_3$, $f'_0 \rightarrow -f'_2$, $f''_0 \rightarrow f''_2$, para funções simétricas (quando se deseja $f'|_{\text{contorno}} = 0$) e $f_0 \rightarrow -f_2$, $f_{-1} \rightarrow -f_3$, $f'_0 \rightarrow f'_2$, $f''_0 \rightarrow -f''_2$ para funções antissimétricas (quando se deseja $f|_{\text{contorno}} = 0$). Estas modificações para $i = n_x$ e para as outras direções podem ser deduzidas analogamente.
- Condições de não deslizamento ou de saída livre: formulações descentradas são aplicadas para as aproximações das derivadas e interpolações nos contornos, como

$$\begin{aligned}
 f'_1 + 2f'_2 &= \frac{1}{2\Delta x}(-5f_1 + 4f_2 + f_3), \\
 f''_1 + 11f''_2 &= \frac{1}{\Delta x^2}(13f_1 - 27f_2 + 15f_3 - f_4), \\
 f'_{n_x} + 2f'_{n_x-1} &= \frac{1}{2\Delta x}(-5f_{n_x} + 4f_{n_x-1} + f_{n_x-2}), \\
 f''_{n_x} + 11f''_{n_x-1} &= \frac{1}{\Delta x^2}(13f_{n_x} - 27f_{n_x-1} + 15f_{n_x-2} - f_{n_x-3}),
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

que possuem precisão de terceira ordem. Nos pontos adjacentes ao contorno, uma formulação de três pontos é utilizada

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{4}f'_1 + f'_2 + \frac{1}{4}f'_3 &= \frac{3}{2} \frac{f_3 - f_1}{2\Delta x}, \\
 \frac{1}{10}f''_1 + f''_2 + \frac{1}{10}f''_3 &= \frac{6}{5} \frac{f_3 - 2f_2 + f_1}{\Delta x^2}, \\
 \frac{1}{4}f'_{n_x} + f'_{n_x-1} + \frac{1}{4}f'_{n_x-2} &= \frac{3}{2} \frac{f_{n_x-2} - f_{n_x}}{2\Delta x}, \\
 \frac{1}{10}f''_{n_x} + f''_{n_x-1} + \frac{1}{10}f''_{n_x-2} &= \frac{6}{5} \frac{f_{n_x-2} - 2f_{n_x-1} + f_{n_x}}{\Delta x^2},
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

sendo estes esquemas de quarta ordem de precisão. Ao se utilizar as condições de con-

torno de Dirichlet (não deslizamento) e saída livre, deve-se atentar à perda do efeito de hiperviscosidade na região do contorno, já que não se utiliza mais o esquema centrado.

Ao se utilizar a condição de contorno de Dirichlet, deve-se impor qual a velocidade alvo em $f_{contorno}$; no caso de não deslizamento a velocidade alvo é zero.

Já, para a condição de saída livre disponível unicamente para o contorno L_x , em vez de uma velocidade alvo, utiliza-se uma equação de convecção pura de primeira ordem como

$$f_{n_x}^{n+1} = f_{n_x}^n - c(f_{n_x}^n - f_{n_x-1}^n), \quad (4.22)$$

em que a velocidade de fase c é

$$c = \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{(u_{max,nx-1} + u_{min,nx-1})}{2}, \quad (4.23)$$

para se encontrar a variável de saída que será imposta em $f_{contorno}$.

Formulação das Matrizes

Para facilitar a visualização da aplicação dos esquemas compactos, as relações antecedentes podem ser escritas em forma matricial como

$$\mathbf{A}_x \mathbf{f}' = \frac{1}{\Delta x} \mathbf{B}_x \mathbf{f} \quad e \quad \mathbf{A}'_x \mathbf{f}'' = \frac{1}{\Delta x^2} \mathbf{B}'_x \mathbf{f} \quad (4.24)$$

onde \mathbf{A}_x e \mathbf{B}_x são as matrizes dos coeficientes para a derivada primeira, \mathbf{A}'_x e \mathbf{B}'_x são as matrizes dos coeficientes para a derivada segunda, todas de tamanho $n_x \times n_x$; \mathbf{f} é o vetor das incógnitas, e \mathbf{f}' e \mathbf{f}'' são os vetores das derivadas de \mathbf{f} , todos de tamanho n_x .

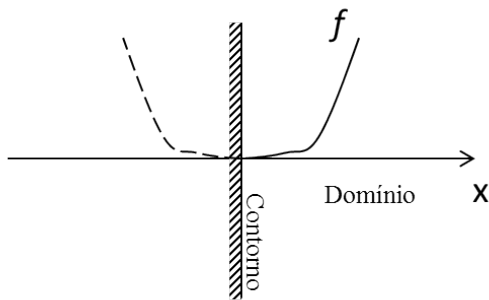
A seguir serão apresentadas as matrizes dos coeficientes utilizadas para cada condição de contorno.

1. Condição periódica: \mathbf{A}_x e \mathbf{B}_x são do tipo:

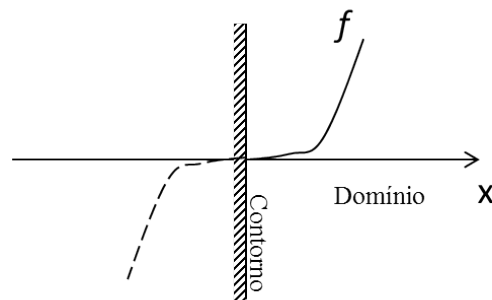
$$\mathbf{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & \alpha & & & & & & \alpha \\ \alpha & 1 & \alpha & & & & & \\ & \alpha & 1 & \alpha & & & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & & \alpha & 1 & \alpha \\ \alpha & & & & & & & \alpha & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_x = \begin{pmatrix} 0 & a & b & & & & & -b & -a \\ -a & 0 & a & b & & & & & -b \\ -b & -a & 0 & a & b & & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & -b & -a & 0 & a & b \\ b & & & & -b & -a & 0 & a \\ a & b & & & & -b & -a & 0 \end{pmatrix}.$$

2. Condição de deslizamento livre : Pode-se ter duas situações, sendo elas as condições de contorno simétrica (dita par) e antissimétrica (dita ímpar), exemplificadas na figura 4.4.

Quando f é par temos:



Par / Simétrica $\rightarrow f'|_{contorno} = 0$



Ímpar / Antissimétrica $\rightarrow f|_{contorno} = 0$

Figura 4.4: Condições de contorno para o caso de deslizamento livre; à esquerda, uma função par e, à direita, uma função ímpar.

$$\mathbf{A}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & & & & & \\ \alpha & 1 & \alpha & & & & & & \\ & \alpha & 1 & \alpha & & & & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & & & \alpha & 1 & \alpha \\ & & & & & & & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_x = \begin{pmatrix} 0 & & & & & & & & \\ -a & -b & a & b & & & & & \\ -b & -a & 0 & a & b & & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & -b & -a & 0 & a & b \\ & & & & -b & -a & b & a \\ & & & & & & & 0 \end{pmatrix}.$$

Quando f é ímpar tem-se:

hidrostática da pressão é calculada neste passo de tempo, pois a parcela hidrostática é calculada por integração em uma etapa diferente (§ 4.2.4). Como a pressão é deslocada espacialmente em relação à velocidade, para o cálculo do termo de divergência, $\nabla \cdot \vec{u}$, devem-se interpolar as velocidades e, então, realizar a derivada deslocada, como já explicado em § 4.2.1.

Após o cálculo de $\nabla \cdot \vec{u}$, o lado direito da equação 4.25 é convertido para o campo espectral utilizando FFT. Tal conversão é calculada com o uso de uma biblioteca [47] * que também realiza os comandos de decomposição 2D, relacionados à paralelização.

A equação equivalente de 4.25, no campo espectral é

$$-(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \hat{\Pi}_{k_x, k_y, k_z} = \frac{\gamma}{\Delta t} (\iota k_x \hat{u}_x + \iota k_y \hat{u}_y + \iota k_z \hat{u}_z), \quad (4.26)$$

em que $\hat{\Pi}$ e \hat{u} são as transformadas da pressão e da velocidade não corrigidas no campo espectral, e os números de onda (k_x, k_y, k_z) são referentes a cada direção espacial. A resolução desta equação, que representa a própria equação 4.25, é obtida diretamente por

$$\hat{\Pi}_{k_x, k_y, k_z} = -\frac{\gamma}{\Delta t} \left(\frac{\iota k_x \hat{u}_x + \iota k_y \hat{u}_y + \iota k_z \hat{u}_z}{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \right). \quad (4.27)$$

Esta transformação faz com que estes valores de pressão normalizada dependam de uma constante $(\hat{\Pi}_{0,0,0})$ que, de forma arbitrária, é definida como nula. Depois da resolução da equação de Poisson no campo espectral, os resultados de $\hat{\Pi}$ são reconvertidos para o campo espaço-tempo novamente.

É importante notar que, para as modificações do código propostas por este trabalho, a pressão é considerada e não apenas seu gradiente, como apresentado na equação 3.35. Assim, o valor de Π é importante para solução da equação e não somente o valor de sua derivada, como normalmente.

4.2.2 INTEGRAÇÃO NO TEMPO

O código *Incompact3d-LS* possui versatilidade na escolha do método de derivação no tempo (possibilidade disponível no próprio *Incompact3d*). Os métodos disponíveis são: Runge-Kutta

*Disponível em <http://www.2decomp.org>

de 3ª ordem (RK3), Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4), Adams-Bashforth de 2ª ordem (AB2) e Adams-Bashforth de 3ª ordem (AB3).

Em relação à eficiência computacional e aos benefícios de estabilidade, o esquema AB3 foi o escolhido para resolver a equação de Navier Stokes no tempo em que sua aproximação é

$$\tilde{u}_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{12} (23F_i^n - 16F_i^{n-1} + 5F_i^{n-2}), \quad (4.28)$$

em que o termo F_i será definido em sequencia. Como esta equação não é possível de ser utilizada nos primeiros dois passos de tempos computacionais, então, no primeiro passo de tempo é utilizado o Método de Euler Explícito:

$$\tilde{u}_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t F_i^n, \quad (4.29)$$

e, no segundo é utilizado o método AB2:

$$\tilde{u}_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{2} (3F_i^n - F_i^{n-1}). \quad (4.30)$$

Observa-se que \tilde{u}_i^{n+1} está sendo considerado no lugar de u_i^{n+1} , devido à utilização do Método de Projeção, o qual será explicado a seguir.

4.2.3 MÉTODO DE PROJEÇÃO, PRESSÃO SOBRE-IMPLÍCITA E CORREÇÃO DE VELOCIDADES

O método da Projeção, proposto por Chorin (1968)[8], é utilizado para o cálculo dos campos de velocidade e pressão das equações de Navier-Stokes. Este método respeita a equação da continuidade 3.2 em sua concepção. Para cada ciclo de simulação, no primeiro passo (passo de predição), calcula-se um campo de velocidade não corrigida (\tilde{u}_i), ignorando o gradiente de pressão não hidrostática (Π_{nh}) no tempo $n + 1$, da forma:

$$\frac{\tilde{u}_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = a_n F_i^n + b_n F_i^{n-1} + c_n F_i^{n-2}, \quad (4.31)$$

em que

$$F_i^n = -u_j^n \frac{\partial u_i^n}{\partial x_j} + g_i - \frac{\Pi^{n+1/2} \partial \rho^{n+1}}{\rho^{n+1} \partial x_i} + \frac{1}{\rho^{n+1}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu^{n+1} \left(\frac{\partial u_i^n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^n}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial \Pi_h^{n+1}}{\partial x_i} - \frac{\sigma}{\rho^{n+1}} \kappa^{n+1} (\delta_s n_{ij})^{n+1}. \quad (4.32)$$

Observa-se que o termo de pressão hidrostática Π_h já é adicionado nesta equação. Caso $\frac{\partial \Pi_{nh}}{\partial x_i}$ seja numericamente nula para todas as direções, o campo de velocidades, \tilde{u}_i , deve respeitar a condição de divergência nula (*divergence free* - $\partial \tilde{u}_j / \partial x_j = 0$). A viscosidade e a massa específica são consideradas no tempo $n + 1$, pois já foram atualizadas para o passo de tempo atual, já que a resolução do Método *Level Set* precede a resolução das equações de Navier-Stokes.

No segundo passo (passo de projeção), obtém-se o campo de pressão utilizando uma equação de Poisson, em que o lado esquerdo é calculado em função de $\nabla \cdot \vec{u}$. Após, o campo de velocidades corrigidas (\vec{u}) é calculado levando em consideração o gradiente de pressão. Neste passo se resolve a equação de Poisson

$$\frac{\partial^2 \Pi_{nh}^{n+1}}{\partial x_j \partial x_j} = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \tilde{u}_j^{n+1}}{\partial x_j}, \quad (4.33)$$

obtendo-se Π_{nh}^{n+1} . Deriva-se Π_{nh}^{n+1} espacialmente utilizando um sistema de equações formado por (4.7) e, então, a velocidade é corrigida por:

$$u_i^{n+1} = \tilde{u}_i^{n+1} - \Delta t \frac{\partial \Pi_{nh}^{n+1}}{\partial x_i}. \quad (4.34)$$

Agora sim, este novo campo de velocidades respeita a equação da continuidade, independente de $\frac{\partial \Pi_{nh}}{\partial x}$.

O novo termo que envolve a pressão, ρ e seu gradiente $\left(\frac{\Pi^{n+1/2} \partial \rho^{n+1}}{\rho^{n+1} \partial x_i} \right)$ é assumido como sendo semi-implícito, como $\Pi^{n+1/2} = \Pi_h^{n+1} + \Pi_{nh}^n$, e é calculado junto com o termo convectivo e difusivo em \vec{u} . A consideração deste termo faz com que a pressão possa ser instável ao longo do tempo para uma variação de ρ muito grande, como é o caso deste trabalho ($\rho_\Gamma \approx 830$).

Um simples teste foi aplicado para verificar a estabilidade ao se utilizar o termo $\left(\frac{\Pi^{n+1/2} \partial \rho^{n+1}}{\rho^{n+1} \partial x_i} \right)$. Em um domínio bidimensional com 14 metros de altura e 10 metros de largura, um desnível

inicial na interface é considerado (figura 4.5). As condições iniciais de velocidade e pressão não-hidrostatica são campos nulos. A malha utilizada foi de $\Delta x = \Delta z = 0,5m$, $\Delta t = 10^{-3}s$ e $\delta = 4$.

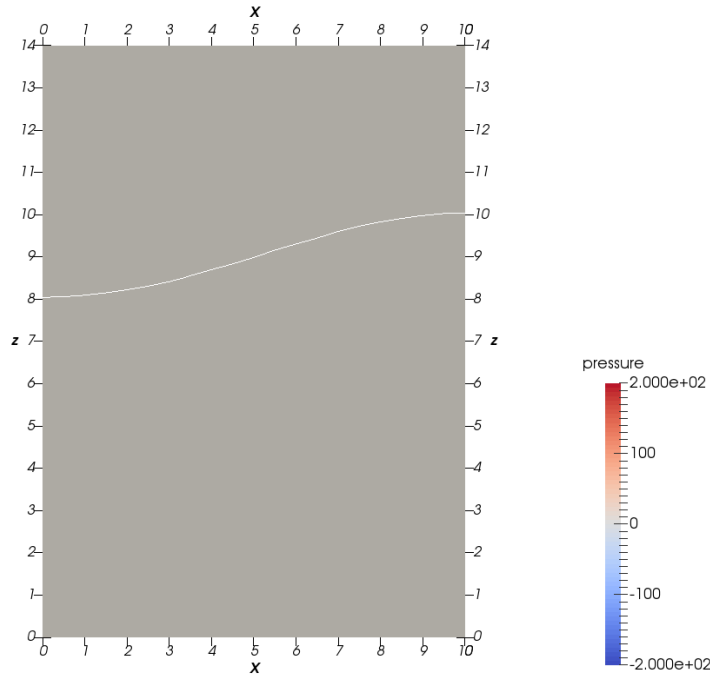


Figura 4.5: Condição inicial do teste de estabilidade da pressão. A linha branca representa a interface entre os fluidos.

Quando $\rho_\Gamma = 5$, identificam-se instabilidades na pressão que se manifestam pelo desenvolvimento de oscilações de alta frequência (figura 4.6). Desta maneira, é necessário considerar uma nova condição de estabilidade proporcional a Δx , ρ_Γ e δ para evitar instabilidades na pressão.

Para reduzir, e até mesmo eliminar, estas oscilações uma nova consideração na pressão é proposta neste trabalho, nomeada de Consideração de Pressão Sobre-Implícita. Assim, no desenvolvimento temporal, uma nova variável é adicionada à equação 4.31, chamada β , de forma que

$$\frac{\tilde{u}_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = a_n F_i^n + b_n F_i^{n-1} + c_n F_i^{n-2} + \beta_i^n, \quad (4.35)$$

sendo β_i^n dado por:

$$\beta_i^n = \sum_{nt=n-m}^m \frac{\partial \Pi_{nh}^{nt}}{\partial x_i}, \quad (4.36)$$

onde m é o número de termos de pressão em tempos anteriores a serem adicionados. Assim, o valor mínimo de m é função de Δx , ρ_Γ e δ . A equação de Poisson e o passo de correção também

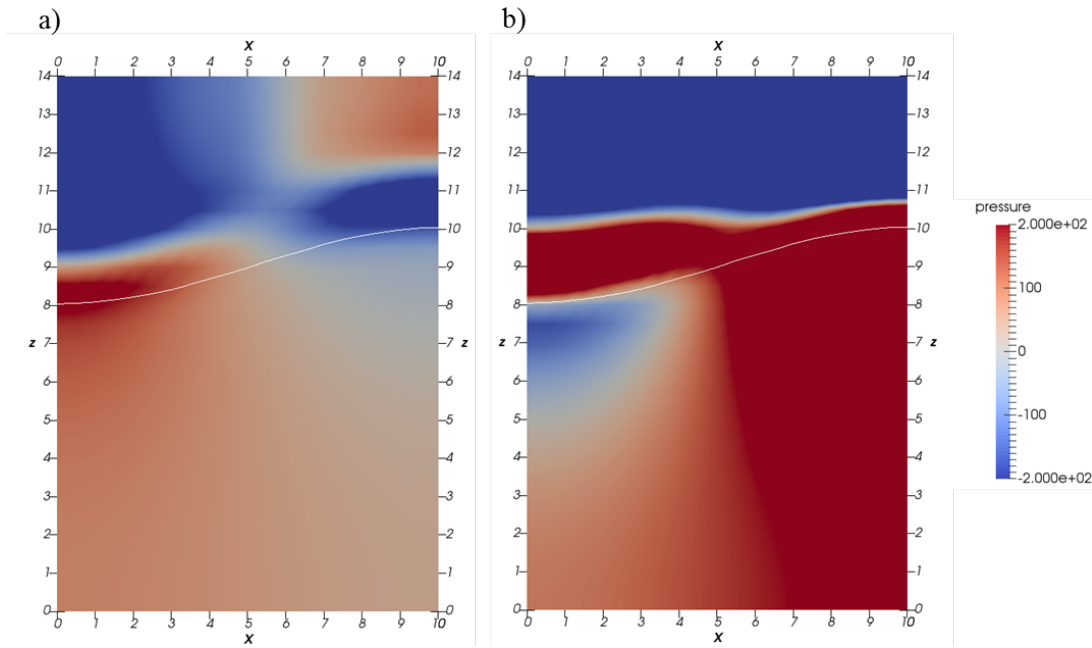


Figura 4.6: Campo de pressões em a) $t = 0.004s$; b) $t = 0.005s$

são modificados como

$$\frac{\partial^2 \Pi_{nh}^{n+1}}{\partial x_j \partial x_j} = \frac{1}{(m+1) \Delta t} \frac{\partial \tilde{u}_j^{n+1}}{\partial x_j}, \quad (4.37)$$

e

$$u_i^{n+1} = \tilde{u}_i^{n+1} - (m+1) \Delta t \frac{\partial \Pi_{nh}^{n+1}}{\partial x_i}. \quad (4.38)$$

Quanto maior for a variação da densidade maior será o valor de m necessário para garantir a estabilidade da simulação em relação à pressão.

Este método não cria um termo de pressão menor com a equação 4.37, desde que para calcular \tilde{u} a pressão é considerada " m " vezes. Este método pode ser compreendido como um compensador de pressão. A Consideração de Pressão Sobre-Implícita retira os termos de pressão anteriores e adiciona a mesma quantidade de vezes no termo implícito. Assim, os termos de pressão antecedentes são retirados da integração temporal, evitando a instabilidade numérica gerada por estes.

4.2.4 PRESSÃO HIDROSTÁTICA

Como a pressão foi segregada em pressão hidrostática e não hidrostática, o presente trabalho apresenta uma forma de calcular a pressão hidrostática utilizando a integração numérica. A

pressão hidrostática e suas derivadas são calculadas a partir das equações 3.19 e 3.20. São utilizadas tanto integrais quanto derivadas de ρ para realizar este cálculo. O cálculo das derivadas é mostrado em § 4.3.3, a partir da função Heaviside.

As integrais podem ser calculadas utilizando um esquema compacto de sexta ordem. Isto é possível realizando o problema inverso do apresentado na equação 4.24. Porém, como ρ possui grande variação, este método pode provocar erros relacionados a dispersão numérica.

Assim, um outro método é proposto utilizando a regra de integração de Simpson de terceira ordem. Pode-se considerar a integral 3.19 no eixo z (figura 3.1), numericamente como

$$p_{h:i,j,k} = g \int_{z_{i,j,k}}^{z_{i,j,Nz}} \rho dz = g \int_{z_{i,j,k}}^{z_{i,j,k+1}} \rho dz + p_{h:i,j,k+1}, \quad (4.39)$$

em que $p_{h:i,j,Nz} = 0$, e a pressão hidrostática normalizada como

$$\Pi_{h:i,j,k} = \frac{g}{\rho_{i,j,k}} \int_{z_{i,j,k}}^{z_{i,j,k+1}} \rho dz + \frac{p_{h:i,j,k+1}}{\rho_{i,j,k}}. \quad (4.40)$$

Considerando a regra de Simpson para resolver a integral, tem-se que

$$p_{h:i,j,k} = g \frac{\Delta z}{3} (\rho_{i,j,k} + 4\rho_{i,j,k+1} + \rho_{i,j,k+2}) + p_{h:i,j,k+2}, \quad (4.41)$$

e, dividindo por $\rho_{i,j,k}$, obtém-se

$$\begin{aligned} \Pi_{h:i,j,k} &= \frac{g}{\rho_{i,j,k}} \frac{\Delta z}{3} (\rho_{i,j,k} + 4\rho_{i,j,k+1} + \rho_{i,j,k+2}) + \frac{p_{h:i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} = \\ &= \frac{g\Delta z}{3} \left(1 + \frac{4\rho_{i,j,k+1} + \rho_{i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right) + \frac{p_{h:i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Finalmente, para o cálculo da derivada da pressão hidrostática normalizada se tem

$$\frac{\partial \Pi_{h:i,j,k}}{\partial x} = \frac{g\Delta z}{3} \left[4 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho_{i,j,k+1}}{\rho_{i,j,k}} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho_{i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p_{h:i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right). \quad (4.43)$$

Para calcular $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho_{i,j,k+1}}{\rho_{i,j,k}} \right)$, $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho_{i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right)$ e $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p_{h:i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right)$ não se pode utilizar a função Heaviside (método a ser explicado em § 4.3.3), pois não são derivadas unicamente de ρ . Assim, estas

derivadas foram desenvolvidas em

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho_{i,j,k+1}}{\rho_{i,j,k}} \right) = \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \frac{\partial \rho_{i,j,k+1}}{\partial x} - \frac{\rho_{i,j,k+1}}{\rho_{i,j,k}^2} \frac{\partial \rho_{i,j,k}}{\partial x}, \quad (4.44)$$

e, analogamente, para os termos $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho_{i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right)$ e $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p_{h:i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}} \right)$.

Assim, a equação 4.43 se torna

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi_{h:i,j,k}}{\partial x} = \frac{g\Delta z}{3} & \left(4 \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \frac{\partial \rho_{i,j,k+1}}{\partial x} - 4 \frac{\rho_{i,j,k+1}}{\rho_{i,j,k}^2} \frac{\partial \rho_{i,j,k}}{\partial x} + \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \frac{\partial \rho_{i,j,k+2}}{\partial x} - \frac{\rho_{i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}^2} \frac{\partial \rho_{i,j,k}}{\partial x} \right) \\ & + \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \frac{\partial p_{h:i,j,k+2}}{\partial x} - \frac{p_{h:i,j,k+2}}{\rho_{i,j,k}^2} \frac{\partial \rho_{i,j,k}}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

A derivada $\frac{\partial p_{h:i,j,k+2}}{\partial x}$ pode ser obtida da equação 4.41 como

$$\frac{\partial p_{h:i,j,k+2}}{\partial x} = g \frac{\Delta z}{3} \left(\frac{\partial \rho_{i,j,k+2}}{\partial x} + 4 \frac{\partial \rho_{i,j,k+3}}{\partial x} + \frac{\partial \rho_{i,j,k+4}}{\partial x} \right) + \frac{\partial p_{h:i,j,k+4}}{\partial x}, \quad (4.46)$$

em que $\frac{\partial p_{h:i,j,k+4}}{\partial x}$ é um termo já conhecido. Nota-se que esta integração deve ser feita de cima para baixo (de forma invertida), assim os termos posteriores da direção k já são conhecidos. Destaca-se também que a pressão é calculada na equação de Poisson deslocada da velocidade, e para realizar estes cálculos, esta necessita ser interpolada para os nós da célula.

4.3 INTERFACE - MÉTODO LEVEL SET

Nesta seção serão apresentados os esquemas utilizados para determinar a interface, calculada a partir do Método *Level Set*, levando em conta a equação de advecção de ϕ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi = 0, \quad (4.47)$$

a equação de reinicialização de ϕ

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{sgn}(\phi_0) (|\nabla \phi| - 1) = 0, \quad (4.48)$$

e a equação de correção de volume

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{(V - V_0)}{V_0} |\nabla \phi|. \quad (4.49)$$

A resolução numérica espacial destas equações utilizando o esquema WENO, amplamente utilizado para o Método *Level Set* [18] [100] [46] [103], é apresentada no Apêndice A.

4.3.1 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL - *COMPACTLSM*

O método *CompactLSM*, uma nova forma de resolver as equações propostas pelo método *Level Set*, é apresentada neste trabalho. Ao utilizar esquemas compactos de sexta ordem, garante-se o cálculo preciso e rápido das equações propostas. Devido à ausência de erros de dissipação numérica para as primeiras derivadas, normalmente os esquemas centrados não são indicados para resolver o método *Level Set*; porém, com o auxílio da hiperviscosidade, esta tarefa se torna apropriada.

Ao invés de considerar a advecção de ϕ dada pela equação 4.47, considera-se o acréscimo de um termo difusivo, ficando

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla^2 \phi, \quad (4.50)$$

em que γ é um coeficiente de difusividade virtual que está relacionado com a intensidade deste novo termo difusivo. Matematicamente, se a curvatura da interface for zero, pode-se incluir o termo $\nabla^2 \phi$, já que ϕ é uma função distância (*i.e.* $|\nabla \phi| = 1$) e pode-se reescrever a equação da curvatura (3.25) como $\kappa = -\nabla^2 \phi$. O valor de γ pode ser definido para forçar que o termo difusivo adicionado seja tão pequeno quanto a precisão da máquina, mesmo que κ tenha algum valor significativo. Assim, ainda que possua curvatura, com γ sendo um valor pequeno, o novo termo $\gamma \nabla^2 \phi$ pode ser aproximadamente zero, não afetando as escalas de interesse da equação 4.50.

A intensidade da hiperviscosidade (ν_0), implementada nas derivadas segundas (Lamballais et al., 2011[43]), pode ser utilizada para reduzir ou, até mesmo, eliminar oscilações espúrias. Se a relação correta entre γ e hiperviscosidade for imposta, o termo da derivada segunda afetará apenas as menores escalas que possuem oscilações indesejáveis. O uso desta metodologia para

o cálculo de uma DNS torna-se muito atrativo, pois as menores malhas, importantes quando se realiza uma DNS, não são necessárias para a definição adequada da interface pela metodologia *Level Set*, podendo serem filtradas sem gerar novos problemas.

Mesmo na reinicialização, a adição da segunda derivada pode ser efetivada com sucesso, da forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{sgn}(\phi_0) (|\nabla \phi| - 1) = \gamma \nabla^2 \phi. \quad (4.51)$$

4.3.2 AVANÇO NO TEMPO

Métodos numéricos para avanço no tempo podem causar oscilações espúrias. Logo, quando se tem interesse na solução de equacionamentos irrotacionais, é interessante o uso de métodos específicos que não provoquem oscilações numéricas.

O método *Time Variation Diminishing Runge-Kutta* de 3ª ordem (TVD RK3)[23] é utilizado para calcular o avanço no tempo. A propriedade de monotonicidade dos métodos TVD eliminam oscilações espúrias causadas pelo avanço temporal. O procedimento consiste em calcular o avanço temporal como

$$\begin{aligned} \phi^{(1)} &= \phi^{(0)} + \Delta t F[\phi^{(0)}], \\ \phi^{(2)} &= \frac{3}{4}\phi^{(0)} + \frac{1}{4}\phi^{(1)} + \frac{\Delta t}{4} F[\phi^{(1)}], \\ \phi^{(3)} &= \frac{1}{3}\phi^{(0)} + \frac{2}{3}\phi^{(2)} + \frac{2\Delta t}{3} F[\phi^{(2)}], \end{aligned} \quad (4.52)$$

em que $\phi^{(0)} = \phi^n$ e $\phi^{(3)} = \phi^{n+1}$.

Mesmo com a adição dos termos difusivos à metodologia do *Level Set*, a equação de advecção-difusão 4.50 é irrotacional, já que os termos difusivos são apenas um artifício numérico que afeta as menores escalas da malha. Assim, a formulação rotacional $\left(\frac{\partial(u_i \phi)}{\partial x_i}\right)$ ou a antissimétrica $\left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial(u_i \phi)}{\partial x_i} + u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}\right)\right)$ criam instabilidades nas condições de contorno. Para evitar este problema, deve-se utilizar a forma advectiva deste termo $\left(u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}\right)$.

Para o cálculo das equações 4.47 ou 4.50 pode ser utilizada a metodologia clássica WENO,

ou a apresentada por este trabalho (*CompactLSM*), dadas por

$$\underbrace{F[\phi] = -u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}}_{\text{WENO}} \quad \text{ou} \quad \underbrace{F[\phi] = -u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i}}_{\text{CompactLSM}}. \quad (4.53)$$

Para a equação de reinicialização 4.48 ou 4.51, Δt representa $\Delta \tau$ e ambas metodologias podem ser utilizadas por

$$\underbrace{F[\phi] = -sgn(\phi_0) \left(\left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right| - 1 \right)}_{\text{WENO}}, \quad \text{ou} \quad \underbrace{F[\phi] = -sgn(\phi_0) \left(\left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right| - 1 \right) + \gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_i}}_{\text{CompactLSM}}. \quad (4.54)$$

A correção do volume é calculada utilizando o esquema de Euler Explícito, que também possui em sua concepção as propriedades de TVD, da forma

$$\phi^{(n+1)} = \phi^{(n)} + \Delta \tau \left[\frac{(V - V_0)}{V_0} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right| \right]. \quad (4.55)$$

Esta equação não possui os termos difusivos (como as duas anteriores para o método *CompactLSM*) por não ter se observado ganhos em estabilidade numérica nos testes realizados e apresentados neste trabalho.

4.3.3 PROPRIEDADES FÍSICAS E GEOMÉTRICAS

A variação da massa específica e da viscosidade é demarcada pela espessura virtual da interface, definida pela função Heaviside (3.27), e, assim, a variação destas características físicas depende da suavidade desta função. Ao utilizar esquemas compactos de alta ordem para resolver a equação de quantidade de movimento, problemas graves de dispersão numérica podem ocorrer ao derivar valores de características físicas para uma espessura de interface (considerada, normalmente, como $\delta = 1,5$), já que a dessas propriedades pode ser grande ($\rho_\Gamma = \rho_2/\rho_1 \approx 830$). Assim, uma espessura de interface maior é utilizada no presente trabalho, a ser avaliada por simulações de verificação (§ 5.3.1). De qualquer forma, vale ressaltar que os métodos que utilizam poucos pontos para representar a interface são de baixa ordem (segunda ordem ou menor), enquanto que o presente trabalho possui formulação de sexta ordem espacial e terceira ordem

temporal.

Para evitar a interpolação espacial de ρ e μ na equação de movimento, seus valores são considerados colocados no ponto da malha onde se encontra a velocidade, isto é, no nó da malha. Todos os cálculos em que ρ foi calculado junto com algum termo de pressão, este termo de pressão foi deslocado para o nó da malha.

Para evitar dispersão por causa da grande variação destas grandezas na região da interface, as derivadas são obtidas analiticamente a partir da função Heaviside (2.14), da forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \frac{\partial [\rho_1 (1 - I)]}{\partial x_i} + \frac{\partial [\rho_2 I]}{\partial x_i} = -\rho_1 \frac{\partial I}{\partial x_i} + \rho_2 \frac{\partial I}{\partial x_i} = (\rho_2 - \rho_1) \frac{\partial I}{\partial x_i}, \quad (4.56)$$

e considerando a função 3.27, obtem-se

$$\frac{\partial I}{\partial x_i} = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi < -\xi/2, \\ \frac{1}{\xi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \left[1 + \cos \left(\frac{2\pi\phi}{\xi} \right) \right] & \text{se } |\phi| \leq \xi/2, \\ 0 & \text{se } \phi > \xi/2. \end{cases} \quad (4.57)$$

Ao substituir a equação 4.57 na equação 4.56 se obtém que a variação de ρ através da interface é função da derivada de ϕ , sendo suave próxima da interface, da forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_i} = \frac{(\rho_2 - \rho_1)}{\xi} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \left[1 + \cos \left(\frac{2\pi\phi}{\xi} \right) \right], \quad (4.58)$$

em que $\xi = 2\delta\Delta_c$ é a espessura virtual da interface. Esta equação pode ser utilizada analogamente para as derivadas em outras direções e para a viscosidade dinâmica.

Para cada tipo de fenômeno, um tamanho de malha característica (Δ_c) deve ser identificado. escoamentos com interfaces predominantemente horizontais devem considerar $\Delta_c = \Delta z$, como no caso de propagação de ondas com pequena amplitude ou no caso em que a relação entre A/λ seja pequena (por exemplo, ondas de Stokes de segunda ordem). Também se deve utilizar esta consideração para escoamentos com pequenas variações da superfície livre ou em que as pequenas variações, de grande curvatura ($\kappa \gtrsim 1$), não sejam relevantes ao problema em questão. Casos em que todas as dimensões sejam relevantes para representar a interface entre os fluidos, como no caso da simulação de gotas e bolhas, é recomendado considerar $\Delta_c = (\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$.

Por fim, para discretizações espaciais muito distintas entre si, deve-se considerar o maior incremento espacial, *i.e.* $\Delta_c = \max(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$.

As propriedades geométricas, muitas delas presentes no termo de tensão superficial, isto é: a curvatura (κ) 3.25 e o delta de Dirac com o vetor normal (δ, \vec{n}) 3.29, são calculadas diretamente com as derivadas compactas (eq. 4.1). A tensão superficial é adicionada como último termo da equação 4.32, sendo tratada explicitamente por meio da função de Heaviside.

5 APLICAÇÕES E RESULTADOS

Neste capítulo, inicialmente, será avaliada a solução da metodologia *CompactLSM*, por um viés puramente matemático (verificação). Posteriormente, será avaliado o código *Incompact3d-LS*, tanto por um viés matemático quanto físico (verificação e validação).

O método proposto por este trabalho, *Compact Level Set*, será avaliado, sem considerar a equação da quantidade de movimento, em que campos de velocidades serão fornecidos, caracterizando diferentes casos, sendo comparado ao método padrão WENO.

Após a análise do *Compact Level Set*, casos de verificação e validação do código *Incompact3d-LS* são apresentados, focando-se na resolução das equações de Navier-Stokes e da continuidade, ou seja, no método proposto por este trabalho, denominado *Incompact3d-LS*. Todos os casos são referentes a casos bifásicos de ar ($\rho = 1,204 \text{ kg m}^{-3}$ e $\mu = 1,8253 \times 10^{-5} \text{ Pa/s}$) e água ($\rho = 998,0 \text{ kg m}^{-3}$, $\mu = 1,00798 \times 10^{-3} \text{ Pa/s}$) ambos os fluidos à temperatura de 20°C . Há uma exceção no estudo de gotas, em que estes valores foram modificados de acordo com o caso experimental que será usado para comparação. O parâmetro que controla a intensidade da hiperviscosidade ν_0/ν (utilizado nas equações 4.17, 4.18 e 4.19) é definido particularmente para cada caso. A tensão superficial, também a ser definida particularmente, é considerada apenas nos casos da Queda de Gota e Quebra de Barragem.

Os testes com o código *Incompact3d-LS* se iniciam com uma verificação puramente numérica, utilizando o Método da Solução Manufaturada. Em continuação, tem-se a verificação/validação de dos casos de propagação de onda, em que os resultados são comparados com resultados da teoria de ondas. Em seguida, um caso de queda de gota individual em uma camada de água é simulado. Por fim, um caso de escoamento proveniente de quebra de barragem é validado com um caso experimental. A tabela 5.1 apresenta um resumo dos casos apresentados.

Tabela 5.1: Casos aplicados e motivações.

Caso	Código Utilizado	Motivação
Tensão de Cisalhamento Constante	<i>CompactLSM</i>	Verificação
Vórtice Único	<i>CompactLSM</i>	Verificação
Solução Manufaturada	<i>Incompact3d-LS</i>	Verificação
Efeito de Seiche 3D	<i>Incompact3d-LS</i>	Verificação/Validação
Ondas de Stokes	<i>Incompact3d-LS</i>	Verificação/Validação
Queda de Gota	<i>Incompact3d-LS</i>	Validação
Quebra de Barragem	<i>Incompact3d-LS</i>	Validação

5.1 VERIFICAÇÃO - *COMPACT LEVEL SET METHOD*

O *Compact Level Set Method* (*CompactLSM*), metodologia proposta por este trabalho, é comparado com o método *Level Set* calculado com WENO de 5ª ordem (*Standard*). Todos os testes são bidimensionais e foram baseados nos casos apresentados por Sabelnikov et al. (2014)[76]. A verificação é realizada pela avaliação do erro do valor da área formada por $\phi = 0$ (eq. 5.2). O valor da área tem que ser constante ao longo do tempo, pois não apresenta perda ou ganho de massa, e este erro é calculado como

$$A_{erro} = \max \left(\left| \frac{A_t - A_0}{A_0} \right| \right), \quad (5.1)$$

em que A_t é a área calculada após o término da simulação e A_0 é a área fornecida pela condição inicial. A área é obtida pela integração da função *Heaviside*, da forma

$$A = \int_D [1 - I(\phi)] dA \approx \sum_{i,j} [1 - I(\phi_{i,j})] \Delta x \Delta y. \quad (5.2)$$

Para viabilizar a solução da equação de advecção, o *CompactLSM* adota um termo difusivo virtual que conta com a ferramenta de hiperviscosidade (termo $\gamma \nabla^2 \phi$ na equação 4.50). A hiperviscosidade utilizada é formada por dois núcleos (§ 4.2.1) em $k_c = \pi$ e $k_m = \frac{2}{3}\pi$, assumindo o comportamento do método *Spectral Vanishing Viscosity* (SVV) LES, como apresentado em Lamballais et al., 2011[43]. O valor de ν_0/ν utilizado para a hipervisocidade é 4×10^6 e γ , o coeficiente de difusividade virtual, é $3 \times 10^{-8} \Delta x^2 / \Delta t$ *.

*Por meio de testes numéricos, observou-se uma relação de dependência linear entre ν_0/ν e γ . Assim, valores equivalentes aos adotados são, por exemplo, $\nu_0/\nu = 4$ e $\gamma = 3 \times 10^{-2} \Delta x^2 / \Delta t$

5.1.1 TENSÃO DE CISALHAMENTO CONSTANTE

Este teste consiste em aplicar uma tensão de cisalhamento constante na interface para verificar como ela se deforma ao possuir curvaturas maiores.

A função distância inicial e a distribuição permanente de velocidade (fig. 5.1) são dadas por

$$\phi_0(x,y) = \sqrt{x^2 + y^2} - 0,15, \quad u = x - y, \quad v = 2x - y. \quad (5.3)$$

A solução analítica desta deformação ao longo do tempo para este teste é

$$d(x,y,t) = \sqrt{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2} - 0,15, \quad (5.4)$$

sendo $\tilde{x} = x(\cos t - \sin t) + y \sin t$ e $\tilde{y} = -2x \sin t + y(\cos t + \sin t)$.

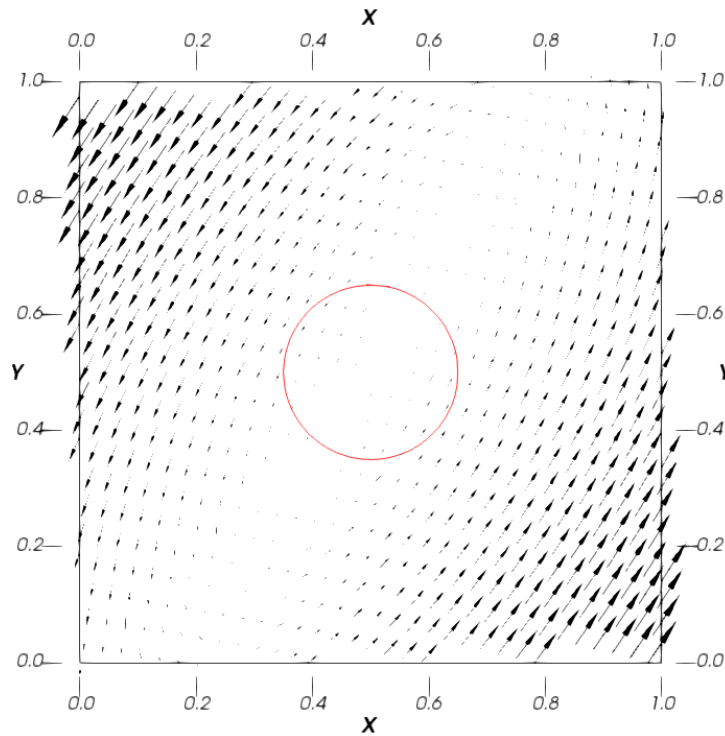


Figura 5.1: Campo de velocidade iniciais. A interface é representada pela circunferência em vermelho.

Três tamanhos diferentes de malha foram considerados e são apresentados na tabela 5.2. Erros relacionados à curvatura da interface foram encontrados ao utilizar o *CompactLSM*. Desta forma, a curvatura máxima foi obtida para cada simulação com malha distinta para avaliar este erro. Utilizando o *CompactLSM*, as simulações com $n_x = n_y = 64$ e $n_x = n_y = 128$ não foram

Tabela 5.2: Características do cálculo do caso Tensão de Cisalhamento Constante.

Lx = Ly	1m	ts*	1s
Δt	$0,25\Delta x/u_{max}$	Δτ	$0,1\Delta x$
Malha 1	$n_x = n_y = 64$	Δx = Δy = $1,5625 \times 10^{-2}m$	
Malha 2	$n_x = n_y = 128$	Δx = Δy = $7,8125 \times 10^{-3}m$	
Malha 3	$n_x = n_y = 256$	Δx = Δy = $3,90625 \times 10^{-3}m$	

* tempo simulado

finalizadas com sucesso. A simulação com $n_x = n_y = 256$ foi resolvida sem nenhum problema numérico (tabela 5.3 e figura 5.2). Os erros de distorção da interface provocados pela grande curvatura nas malhas mais grosseiras foram ocasionados pela presença de esqueletos na função distância que se encontravam muito próximos de $\phi = 0$. Estes esqueletos podem ser facilmente identificados visualmente pela variável $|\nabla\phi|$.

Tabela 5.3: Curvatura máxima sem distorção da interface para diferentes tamanhos de malha.

Malha ($n_x = n_y$)	k_{max}^*	Comentário
64	≈ 40	A distorção ocorre em $t \approx 0,5s$
128	≈ 90	A distorção ocorre em $t \approx 0,8s$
256	–	Não ocorreu distorção

* k_{max} representa a curvatura máxima atingida sem erro de distorção.

Um vantagem importante ao se utilizar o *CompactLSM* foi o tempo computacional (tabela 5.4) que foi 6,7 vezes mais rápido que o *Standard*. Ainda, o *CompactLSM* obteve uma precisão maior do que 13 vezes em comparação ao *Standard*. Isto mostra a vantagem da eficiência do método em questões de rapidez e precisão, contra a desvantagem da limitação de estabilidade referente à curvatura.

Tabela 5.4: Resultados para $n_x = n_y = 256$.

Método	A_{erro} (eq. 5.1)	Tempo de processamento (s)	Tempo de processamento adimensional
Standard	$5,1 \times 10^{-5}$	153	6,7
<i>CompactLSM</i>	$3,9 \times 10^{-6}$	23	1,0

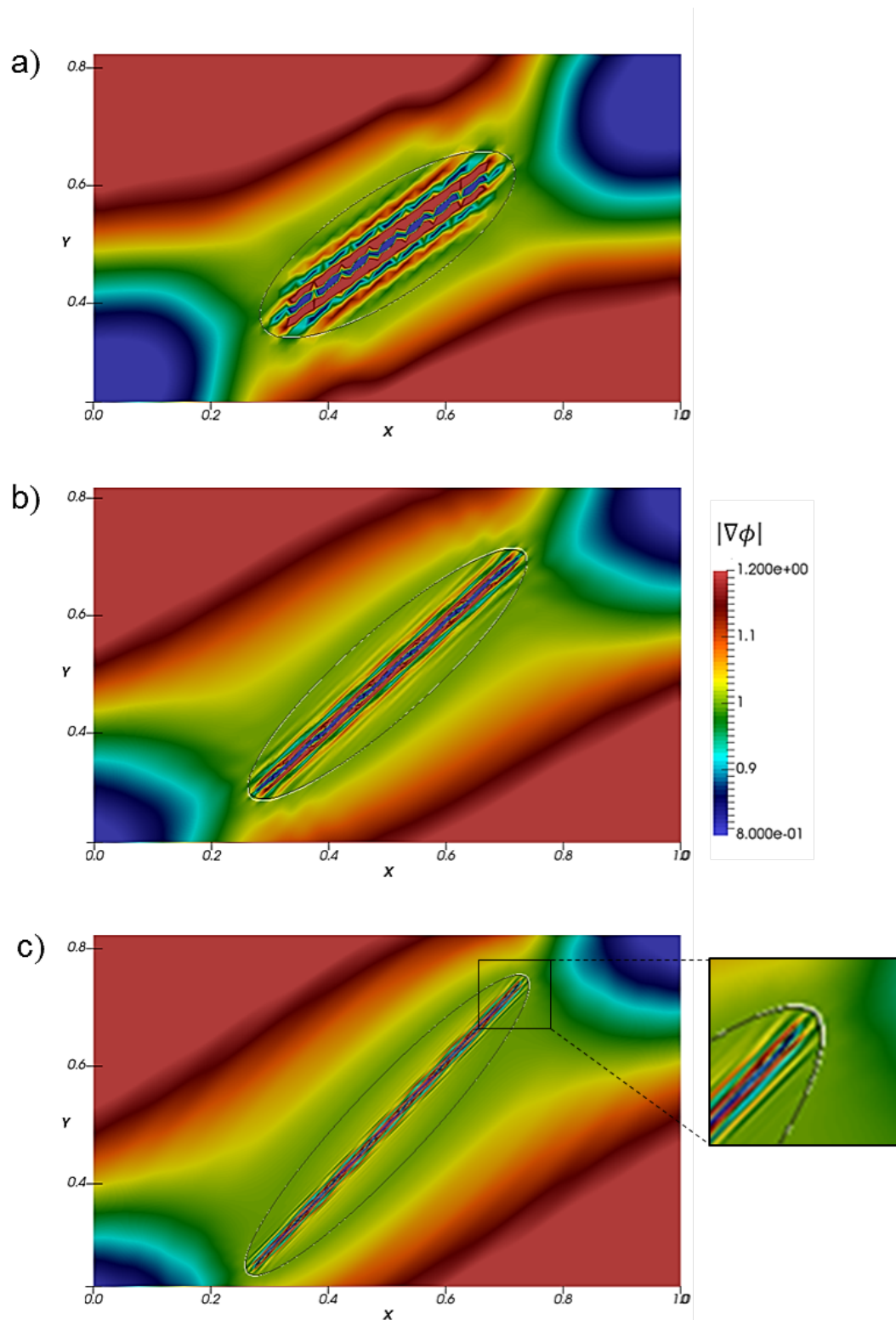


Figura 5.2: Campo de $|\nabla\phi|$ para: a) malha de 64 em $t \approx 0,5s$; b) malha de 128 em $t \approx 0,8s$; e c) malha de 256 em $t = 1,0s$. A linha branca representa a solução numérica e a linha preta representa a solução analítica da interface.

5.1.2 VÓRTICE ÚNICO

Este caso não possui solução analítica, porém é provocada uma curvatura extremamente elevada, e pode-se identificar qual a capacidade da metodologia representar este problema.

A velocidade, que é função do tempo, é dada por

$$u = 2 \sin^2(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi y) \cos(\pi t/T), \quad v = 2 \sin(\pi x) \cos(\pi x) \sin^2(\pi y) \cos(\pi t/T), \quad (5.5)$$

em que $T = 8s$ é o meio período. Inicialmente, a função distância com sinal (figura 5.3) é definida como

$$\phi_0 = \sqrt{(x - 0,5)^2 + (y - 0,75)^2} - 0,15. \quad (5.6)$$

Seis configurações diferentes de discretização espacial foram utilizadas, e suas características computacionais são apresentadas na tabela 5.5.

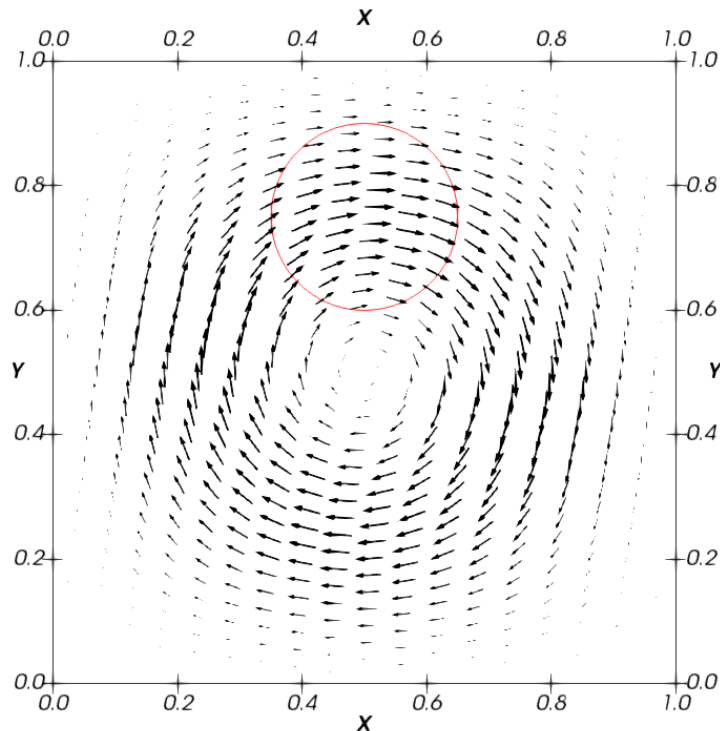


Figura 5.3: Localização da interface (linha vermelha) e campo de velocidade inicial.

Todas as simulações realizadas com o *CompactLSM* não obtiveram sucesso para um tempo total de cálculo de $8s$, pois ao atingir uma curvatura limite, deformações numéricas da interface são criadas (figura 5.4). Este é um caso especial, pois a curvatura da interface é inversamente

Tabela 5.5: Características computacionais do Vórtice Único.

Características Gerais	$Lx = Ly = 1m$		$ts^* = 8s$
	$\Delta t = 0,25\Delta x/u_{max}$		$\Delta \tau = 0,1\Delta x$
Características Específicas	Malha 1	$nx = ny = 64$	$\Delta x = \Delta y = 1,5625 \times 10^{-2}m$
	Malha 2	$nx = ny = 128$	$\Delta x = \Delta y = 7,8125 \times 10^{-3}m$
	Malha 3	$nx = ny = 256$	$\Delta x = \Delta y = 3,90625 \times 10^{-3}m$
	Malha 4	$nx = ny = 512$	$\Delta x = \Delta y = 1,953125 \times 10^{-3}m$
	Malha 5	$nx = ny = 1024$	$\Delta x = \Delta y = 9,765625 \times 10^{-4}m$
	Malha 6	$nx = ny = 2048$	$\Delta x = \Delta y = 4,8828125 \times 10^{-4}m$

* tempo simulado

proporcional ao tamanho da malha e, com uma malha mais refinada uma curvatura maior é possível de ser representada. Caso uma malha menor for utilizada, uma curvatura maior é encontrada, e, para as malhas testadas, o *CompactLSM* não teve a capacidade de realizar os cálculos sem distorcer a interface (tabela 5.6). O método *Standard*, não possui problemas com esqueletos, pois o método WENO foi desenvolvido para eliminar sua presença (por isso é chamado "essencialmente não oscilatório"). Claramente, as simulações não foram bem sucedidas ao utilizar o *CompactLSM*, por causa da formação de esqueletos na função distância. De qualquer maneira, com estes resultados é obtida uma equação potencial

$$|\kappa_{max}| = 1,6512\Delta x^{-0,785}, \quad (5.7)$$

que relaciona a curvatura máxima simulada pelo *CompactLSM* (antes de ocorrer deformação numérica da interface) e o tamanho da malha (figura 5.5), criando-se um limite de aplicação para o *CompactLSM*.

Tabela 5.6: Resultados de curvatura máxima para o caso Vórtice Único.

Número da Malha	tempo em que ocorreu o erro $\approx (s)$	$\kappa_{max}^* \approx (m^{-1})$
1	0,28	-38
2	0,40	-86
3	0,50	-131
4	0,59	-210
5	0,73	-412
6	0,83	-608

* κ_{max} representa o valor máximo da curvatura antes de ocorrer erros de distorção.

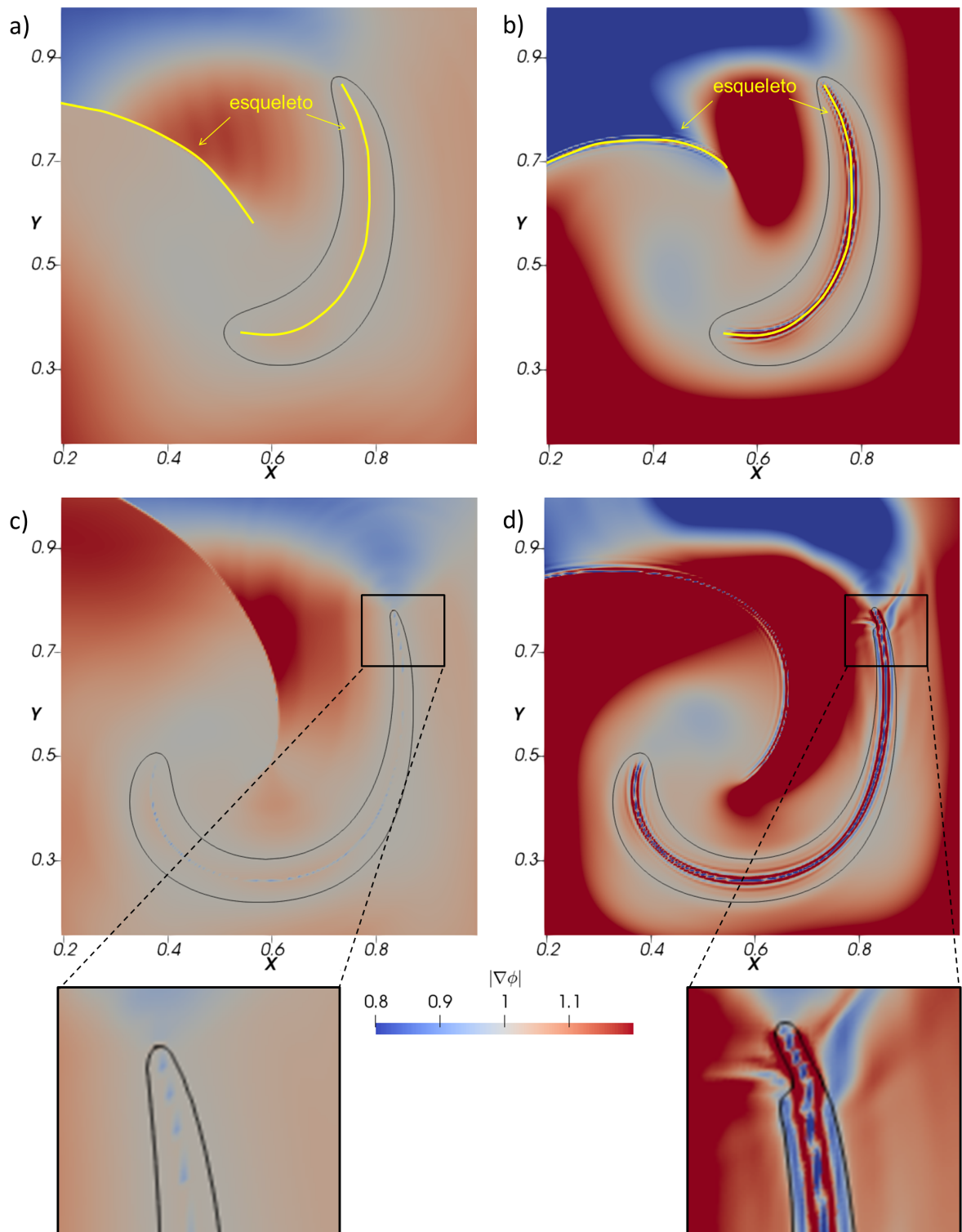


Figura 5.4: Caso do Vórtice Único: Campo de $|\nabla\phi|$ da simulação com Malha 3 para a) *Standard* com $\Delta t \approx 0,45$, b) *CompactLSM* com $\Delta t \approx 0,45$, c) *Standard* com $\Delta t \approx 0,8$ e d) *CompactLSM* com $\Delta t \approx 0,8$. A linha preta representa a $\phi = 0$.

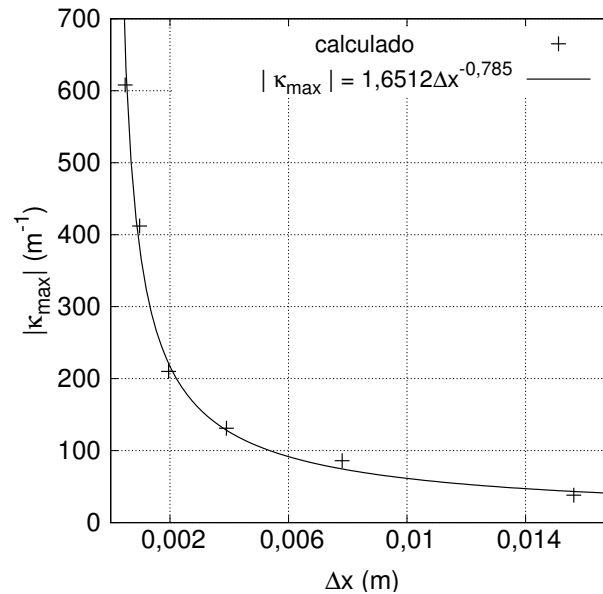


Figura 5.5: Relação entre a discretização espacial e curvatura máxima da superfície $\phi = 0$. Regressão potencial com $R^2 = 0.99$

Moghadam et al. (2016)[57] desenvolveram o método *Compact Conservative Level Set* (CCLS). Os autores calcularam o transporte da função distância e a etapa de reinicialização com esquemas compactos de alta ordem, mas a normal da função distância ($\nabla\phi$) foi calculada com o método *Fast Marching*, não relacionado com os esquemas compactos. Olsson and Kreiss (2005)[64] mencionam que esquemas não oscilatórios devem ser utilizados para calcular a normal; caso contrário oscilações espúrias no campo ϕ serão desenvolvidas na direção normal à interface $\phi = 0$.

De qualquer forma, o *CompactLSM* calculou com sucesso as superfícies com curvaturas menores do que a curvatura máxima com boa precisão e baixo custo computacional. Neste caso, para simulações com curvaturas máximas que respeitam a equação 5.7, o método *CompactLSM* é uma boa opção a ser utilizada.

5.2 VERIFICAÇÃO - *INCOMPACT3D-LS*

A partir desta etapa é aplicado o código que utiliza a equação da quantidade de movimento junto da equação da continuidade e do método de apresentação de interface multifásica. A verificação é realizada para identificar se as formulações matemáticas e numéricas foram implementadas adequadamente e se o método numérico adotado é condizente com o que ele oferece

na teoria. O código *Incompact3d-LS* é comparado com resultados analíticos, com a finalidade de analisar os erros produzidos pelo código. Na verificação, não é suficiente que a solução analítica seja exata, ela deve ser complexa o suficiente para que todos os termos da equação governante sejam testados, sendo indicado realizar a verificação para diversos casos distintos.

Para verificar o código proposto são desenvolvidos diversos casos. O primeiro é aplicando o Método da Solução Manufaturada (*Method of Manufactured Solution* - MMS) e os seguintes a verificação é realizada em conjunto com a validação para casos de ondas lineares que representa fisicamente o efeito de seiche em corpos hídricos, de ondas progressivas, de queda de gota e, por fim, de escoamento proveniente de quebra de barragem.

5.2.1 SOLUÇÕES MANUFATURADAS

Soluções manufaturadas são usadas para realizar verificações de códigos por um viés puramente matemático, sem se preocupar com as leis físicas. O MMS é um procedimento generalista para a criação de soluções analíticas que são utilizadas para definir a precisão de um código (ROACHE, 2002) [74]. O método consiste em criar soluções analíticas ao adicionar termos fonte às equações de interesse, os quais são calculados de forma que o conjunto de equações desejado tenha solução exata para determinada solução manufaturada. Os erros encontrados por este método devem reduzir quando $\Delta \rightarrow 0$.

O caso apresentado no presente trabalho foi desenvolvido por Wang et al. (2009)[96] e consiste na representação de um corpo hídrico com superfície livre em estado permanente. Este método foi desenvolvido para a verificação de Métodos de Rastreamento de Interface, que não consideram o ar como parte do domínio a ser calculado. Desta forma, mesmo que o código *Incompact3d-LS* represente escoamentos multifásicos, o MMS será utilizado para avaliar sua precisão, calculando-se os erros referentes unicamente ao volume de água da simulação.

A equação avaliada é

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] = \Upsilon, \quad (5.8)$$

em que Υ é o termo fonte obtido pela solução manufaturada proposta pelo MMS de Wang et al. (2009)[96]. Não se adiciona termo fonte na equação da continuidade, mantendo sua

configuração original (eq. 3.2). As variáveis manufaturadas para resolver as equações 5.8 e 3.2 são

$$u = \sin(x) \cos(y) \sin\left(\frac{\pi z}{h}\right) - \cos(x) \sin(y) \left[\cos\left(2\pi\frac{z}{h}\right) - 1\right], \quad (5.9)$$

$$v = -\cos(x) \sin(y) \sin\left(\frac{\pi z}{h}\right) + \sin(x) \cos(y) \left[\cos\left(2\pi\frac{z}{h}\right) - 1\right], \quad (5.10)$$

$$w = -\frac{A}{2\pi} \left[\sin^2(x) \cos^2(y) - \cos^2(x) \sin^2(y)\right] \left[\sin\left(2\pi\frac{z}{h}\right) - 2\pi\frac{z}{h} \cos\left(2\pi\frac{z}{h}\right) + 2\pi\right], \quad (5.11)$$

$$h = A \sin(x) \sin(y) + h_0. \quad (5.12)$$

em que A representa a amplitude da onda e h representa a altura do escoamento e h_0 a altura do escoamento sem as oscilações. Assim, estas equações devem ser consideradas como condições iniciais e de contorno da simulação. Para isso, as condições de contorno consideradas foram do tipo Dirichlet (figura 5.6).

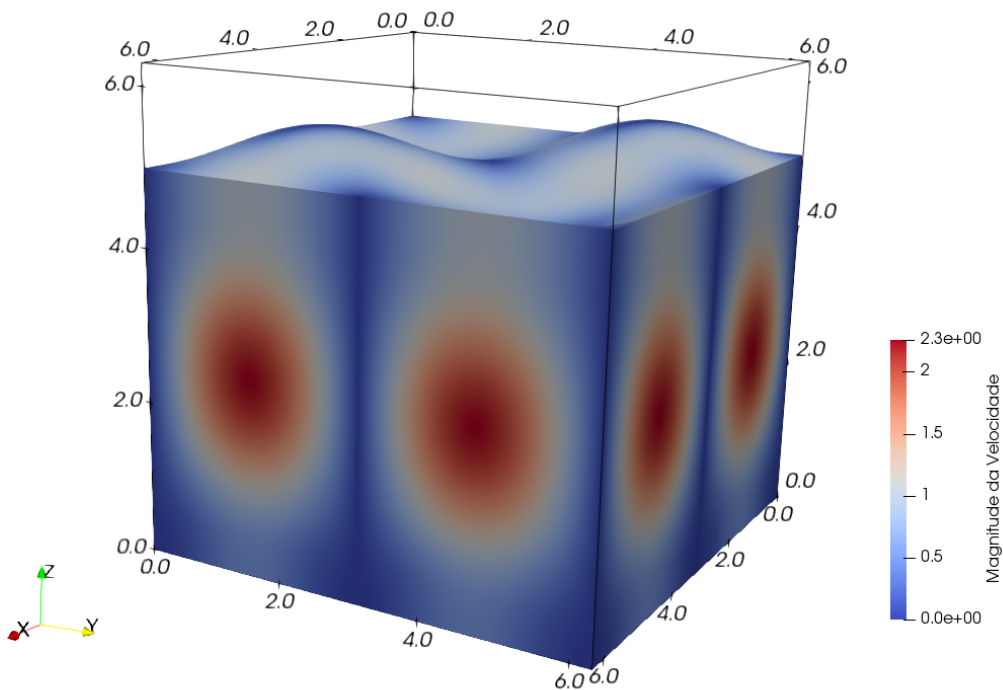


Figura 5.6: Campo de magnitude de velocidade e superfície livre para o caso MMS.

Para respeitar a equação 5.8 não foram considerados o termo de pressão (assim como a resolução da equação de Poisson) nem o de gravidade. A hiperviscosidade foi utilizada fixando

apenas $k'_c = \pi$ (respeitando as equações 4.10 e 4.11) não se utilizando ILES, ou seja, não se utilizou k'_m para este exemplo. O módulo máximo da curvatura da interface calculada para este caso foi de $1,0m^{-1}$, o que possibilita um $\Delta x_{max} = 1,89m$.

O erro do código para cada componente de velocidade é calculado por

$$u_{erro} = \sqrt{\frac{\sum (u_{a,i,j,k} - u_{c,i,j,k})^2}{N_x N_y N_z}} \quad (5.13)$$

em que u_a é a velocidade analítica e u_c é a velocidade calculada pelo código. Esta equação é aplicada analogamente para avaliar o erro nas velocidades v e w . Foram testadas 4 discretizações diferentes (tabela 5.7) com $ts = 10\Delta t$ de cálculo, já este é um caso permanente.

Tabela 5.7: Características computacionais do MMS.

Características Gerais	$Lx = Ly = Lz$	$2\pi m$
	h_0	5m
	A	0,5m
	Δt	$10^{-7}s$
	ts	$10^{-6}s$
	δ	18
Malha 1	$nx = ny = nz$	20
Malha 2	$nx = ny = nz$	50
Malha 3	$nx = ny = nz$	100
Malha 4	$nx = ny = nz$	200

Fazendo o teste de convergência da malha, identificou-se que o método proposto é de 5ª ordem (figura 5.7), inferior a 6ª ordem do código sem as condições de Dirichlet, mas ainda sim alta. Os erros se concentram próximo às condições de contorno (figura 5.8), provocados pela aproximação de 3ª ordem aplicada a estes, inerente ao próprio código *Incompact3d* quando se utiliza a condição de Dirichlet.

Calculou-se novamente o erro (para o mesmo teste de convergência da malha), agora, desconsiderando os pontos que fazem parte das condições de contorno (figura 5.9). Mesmo com um aumento significativo na ordem de precisão, ainda sim, não se obteve a sexta ordem, pois os métodos compactos são semi-espectrais, carregando os erros provocados em qualquer parte do domínio para o resto.

Os erros relacionados à velocidade vertical foram muito semelhantes aos relacionados às ve-

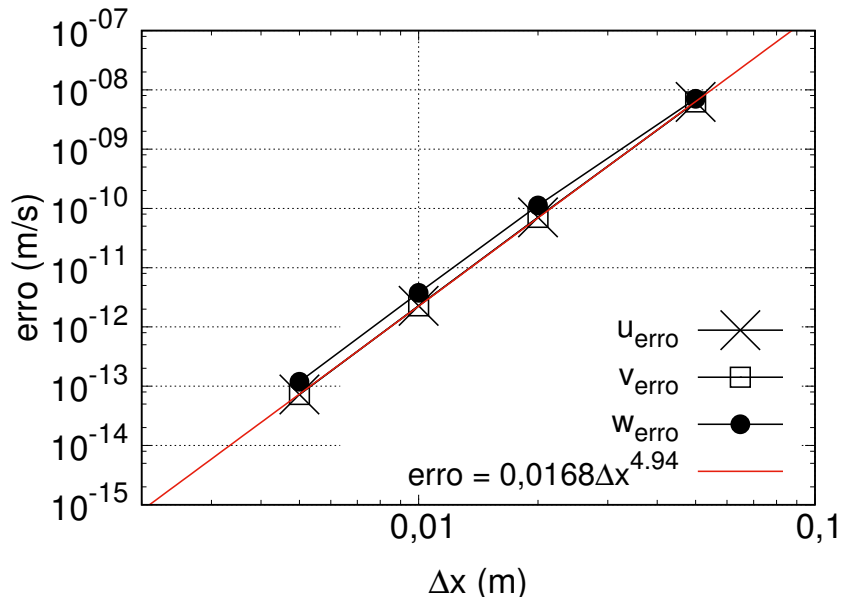


Figura 5.7: Teste de convergência de malha utilizando o MMS, considerando as velocidades u , v e w

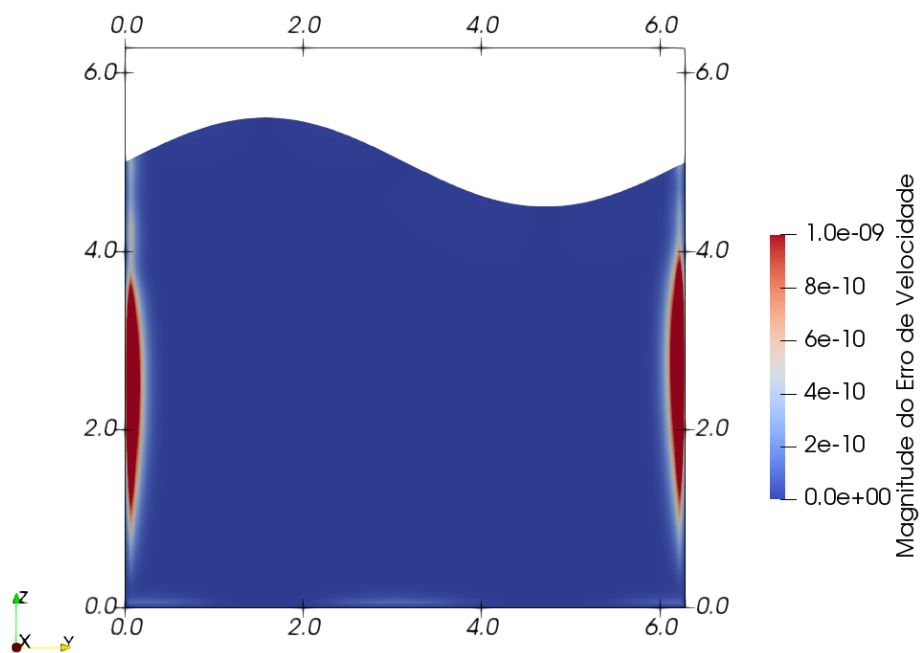


Figura 5.8: Corte no domínio representando a magnitude do erro das velocidades.

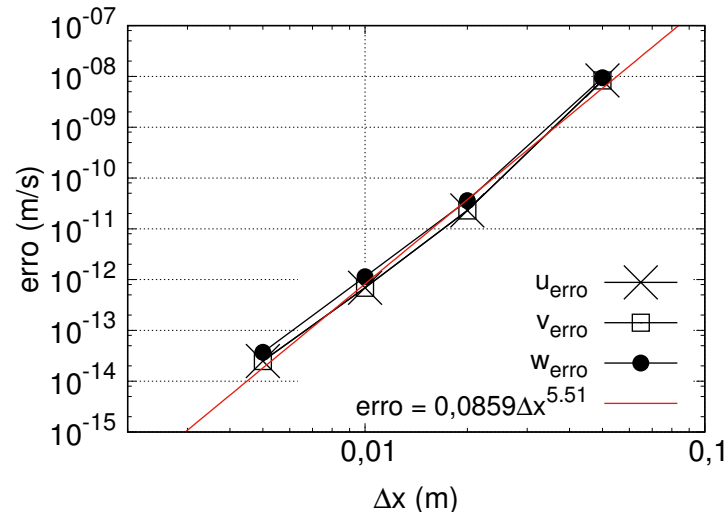


Figura 5.9: Teste de convergência de malha utilizando o MMS, desconsiderando-se as células dos contornos que possuem menor ordem.

localidades horizontais, indicando baixa interferência da interface na precisão do código, mesmo utilizando uma interface consideravelmente espessa. Como este caso não se considera a força gravitacional, a parte do código referente à pressão hidrostática não foi avaliada, devendo-se aprofundar os testes de verificações para este âmbito.

5.3 VALIDAÇÃO - *INCOMPACT3D-LS*

O código é validado para casos em que fenômenos reais são representados. Nos primeiros casos, mesmo representando fenômenos reais, equações teóricas de ondas são utilizadas para realizar a comparação e complementar com a verificação do esquema numérico; logo, as validações podem ser vistas também como verificações, porém não se pode requerer a mesma exatidão para as análises.

5.3.1 EFEITO DE SEICHE 3D

Este caso tem o principal objetivo de simular ondas lineares, que representam o efeito de seiche em corpos hídricos. A espessura da interface e o número de termos de pressão considerados (m) do método de pressão sobre implícita também são avaliados para identificar as suas influências na solução.

A condição inicial de onda é imposta pela variação espacial da condição inicial da interface, mantendo-a em desequilíbrio, no formato de uma senoide (figura 5.10). A pressão dinâmica e

o campo de velocidades são nulas no tempo inicial. Logo, avalia-se uma onda superficial tridimensional de baixa amplitude e grande comprimento. Pode-se verificar por equações teóricas a velocidade da fase e a amplitude calculada, assim como a distribuição do campo de velocidades na água. Este caso possui curvatura máxima de $0,026m^{-1}$ o que permitiria um $\Delta x_{max} = 198m$ (eq. 5.7), muito acima do utilizado. Não se utilizou o efeito da tensão superficial para este caso visto que a Teoria de Ondas não leva em conta essa característica. O parâmetro que controla a intensidade da hiperviscosidade é $\nu_0/\nu = 3$, para todos os testes deste caso.

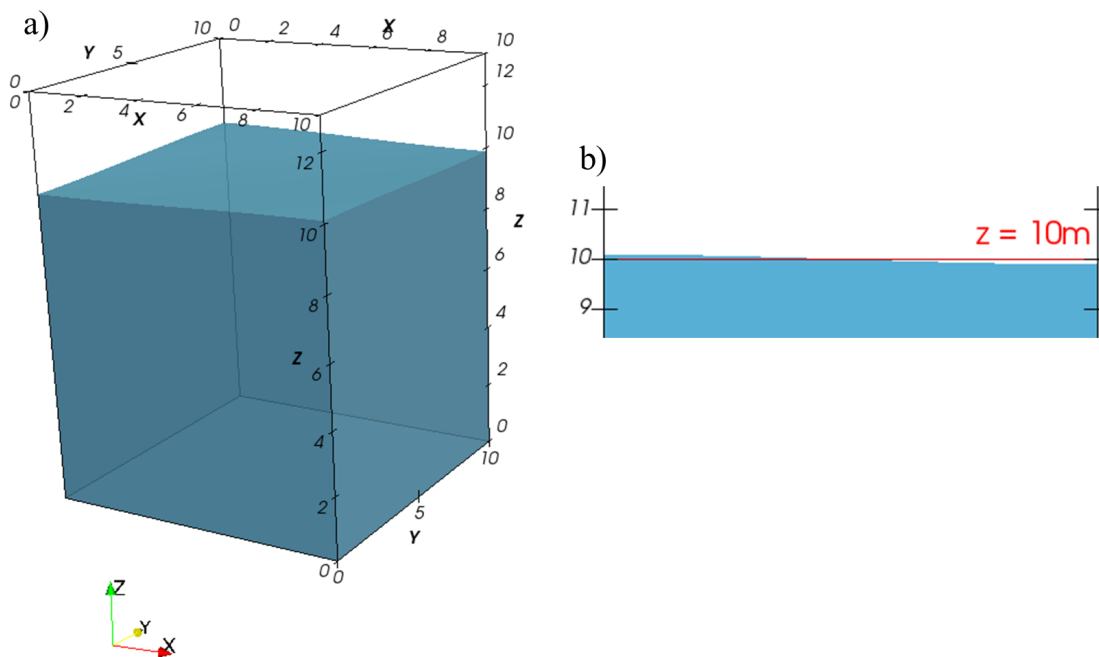


Figura 5.10: Domínio de simulação; a) visualização tridimensional do domínio e da condição inicial da interface, b) visualização bidimensional do domínio no plano $y = 10m$, enfatizando a variação da interface no instante inicial de tempo.

Os casos analíticos para este exemplo são calculados utilizando a teoria de ondas, que fornecem resultados idealizados. A variação da interface é obtida pela expressão

$$\eta(x, y, t = 0) = A \cos(k_x x) \cos(k_y y) \cos(\omega t) + h, \quad (5.14)$$

em que, para este caso específico, $\omega = \sqrt{gk \tanh(kh)}$ em rad/s , $k_x = \pi/\lambda_x$, $k_y = \pi/\lambda_y$ e $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ são os números de onda em m^{-1} , $A = 0,1m$ é a amplitude da onda e $h = 10m$ é a profundidade de água. Aproximações satisfatórias das velocidades orbitais para ondas de

Stokes de primeira ordem são:

$$u = \frac{Agk_x \cosh [k(h+z)]}{\omega \cosh(kh)} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(\omega t), \quad (5.15)$$

$$v = \frac{Agk_y \cosh [k(h+z)]}{\omega \cosh(kh)} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(\omega t), \quad (5.16)$$

$$w = -\frac{Agk \sinh [k(h+z)]}{\omega \cosh(kh)} \cos(k_x x) \cos(k_y y) \sin(\omega t), \quad (5.17)$$

AVALIAÇÃO DA ESPESSURA VIRTUAL DA INTERFACE

Fez-se uma análise da espessura virtual da interface, modificando o número de pontos que representa a espessura desta (δ). Buscou-se o melhor valor que representa o fenômeno analisando os erros gerados pelo código, aplicando-se uma média temporal dos resultados fornecidos pela equação 5.13.

Inicialmente, utilizou-se um domínio computacional com $L_x = L_y = 10m$ e $L_z = 15$, em que o número de pontos foram $n_x = n_y = 91$ e $n_z = 271$. O tempo simulado foi de $5s$ com um intervalo de $2 \cdot 10^{-4}s$ e o número de termos de pressão sobreimplícita m foi de 5.

Foram utilizadas as equações teóricas 5.18, 5.16 e 5.17 e encontrou-se que o δ ideal para a simulação é de 18, que também será utilizado nas simulações posteriores. Valores maiores do que 21 agregavam erros no modelo por falta de representatividade física da espessura da interface (figura 5.11), assim como valores menores do que 18 adicionavam *wiggles* à simulação provenientes da brusca variação de massa específica, ao se utilizar os esquemas compactos centrados de sexta ordem (figura 5.12). Entretanto, percebe-se que os erros gerados por estes *wiggles* na água são muito pequenos e não descaracterizam a solução (figura 5.13), melhorando inclusive a representação da superfície com os resultados teóricos. Desta forma, se o fluido de interesse for exclusivamente a água, para este caso, é possível utilizar $\delta = 6$. Observou-se que não é indicado utilizar $\delta < 6$, pois a solução numérica diverge.

AVALIAÇÃO DA PRESSÃO SOBREIMPLÍCITA

Avaliou-se também o número de termos de pressão sobre implícita (m) necessários para se ter uma simulação estável e qual é a influência numérica desta metodologia. A discretização

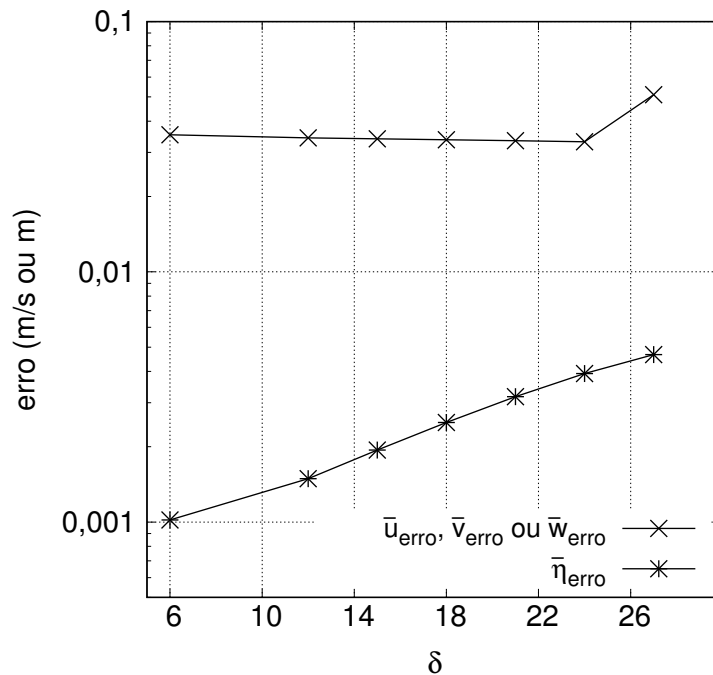


Figura 5.11: Média temporal dos erros de velocidades e de desnível para diferentes espessuras da interface para o tempo de 5 segundos.

espacial, temporal, as dimensões do domínio e as condições iniciais são semelhantes às características do teste anterior, porém um δ de 21 foi utilizado para este teste. A análise da média espaço-temporal dos erros (tabela 5.8) demonstra que o incremento do erro ao utilizar um valor maior de m é muito pequena, próxima a 0,1%. Quando se utiliza $m = 1$ o método se torna instável e diverge na iteração de número 96. Nota-se que para casos de variações mais drásticas, o código pode se tornar instável para os valores de m menores, mas que se mostraram estável para o caso Efeito de Seiche 3D. Assim, na continuidade deste trabalho, utiliza-se $m = 5$, evitando-se erros de oscilação numérica da pressão a um custo de precisão computacional muito baixo.

Tabela 5.8: Valores médios temporais dos erros para diferentes quantidades de termos de pressão sobreimplícita.

m	\bar{u}_{erro}	\bar{v}_{erro}	\bar{w}_{erro}	$\bar{\eta}_{erro}$
1	divergiu	divergiu	divergiu	divergiu
2	$3,338 \times 10^{-2}$	$3,338 \times 10^{-2}$	$3,338 \times 10^{-2}$	$3,164 \times 10^{-3}$
3	$3,339 \times 10^{-2}$	$3,339 \times 10^{-2}$	$3,339 \times 10^{-2}$	$3,165 \times 10^{-3}$
4	$3,340 \times 10^{-2}$	$3,340 \times 10^{-2}$	$3,340 \times 10^{-2}$	$3,166 \times 10^{-3}$
5	$3,341 \times 10^{-2}$	$3,341 \times 10^{-2}$	$3,341 \times 10^{-2}$	$3,168 \times 10^{-3}$
6	$3,342 \times 10^{-2}$	$3,343 \times 10^{-2}$	$3,343 \times 10^{-2}$	$3,171 \times 10^{-3}$

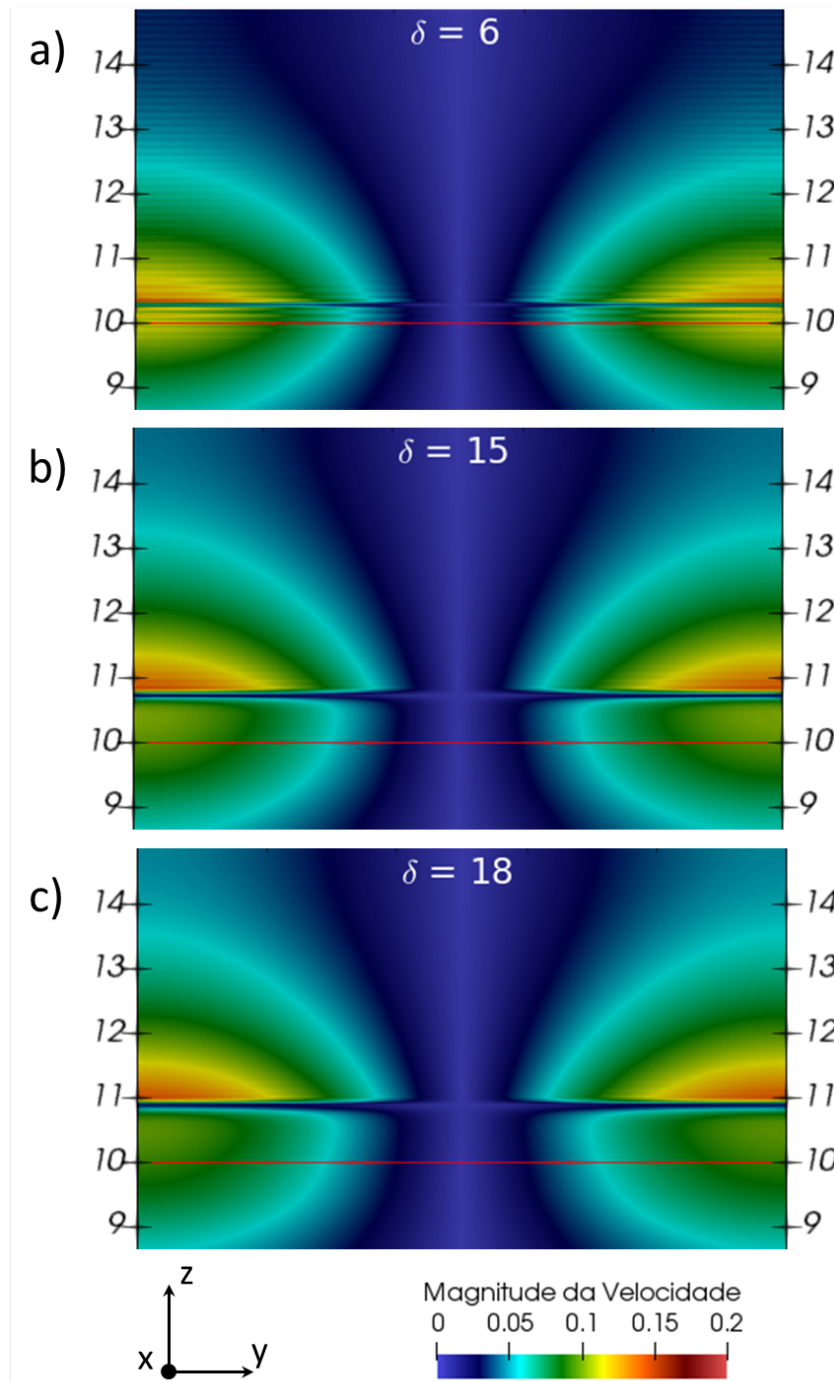


Figura 5.12: Comparação entre as magnitudes das velocidades para o tempo de 5s, para valores de a) $\delta = 6$, b) $\delta = 15$ e c) $\delta = 18$.

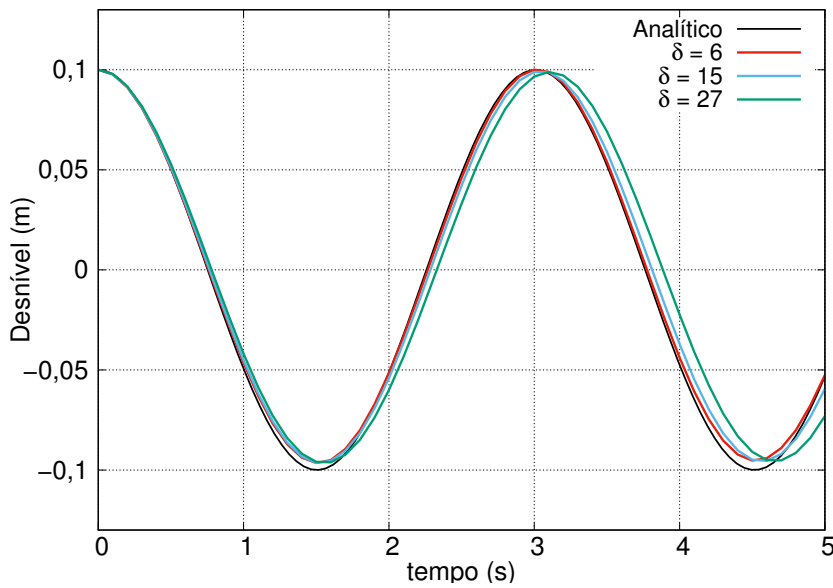


Figura 5.13: Comparação entre os desníveis das simulações com o resultado teórico para o caso de seiche em uma bacia fechada.

DISCRETIZAÇÃO DA MALHA

Foi analisada a variação dos erros refinando a malha apenas em z , ou refinando em todas as direções (tabela 5.9), utilizando $\delta = 18$. Com o refinamento apenas em z , os erros referentes à superfície livre são reduzidos substancialmente, enquanto que os erros referentes às velocidades são pouco alterados, até incrementando levemente estes erros. Com o refinamento em todas as direções, a variação dos erros possui comportamento muito semelhante do que quando se refina unicamente em z . Este comportamento mostra que, quando se tem um erro considerável na superfície livre, apenas o refinamento da direção normal a esta superfície já possui capacidade de melhorar os resultados de η .

Tabela 5.9: Valores médios temporais dos erros para diferentes discretizações.

Δx	Δy	Δz	\bar{u}_{erro}	\bar{v}_{erro}	\bar{w}_{erro}	$\bar{\eta}_{erro}$
91	91	271	$3,37 \times 10^{-2}$	$3,37 \times 10^{-2}$	$3,37 \times 10^{-2}$	$2,50 \times 10^{-3}$
91	91	541	$3,42 \times 10^{-2}$	$3,42 \times 10^{-2}$	$3,42 \times 10^{-2}$	$1,06 \times 10^{-3}$
181	181	541	$3,39 \times 10^{-2}$	$3,39 \times 10^{-2}$	$3,39 \times 10^{-2}$	$1,04 \times 10^{-3}$

5.3.2 ONDAS DE STOKES

Este caso consiste na propagação de ondas lineares e não lineares em um reservatório longo. Para isso, utiliza-se a teoria de ondas, e é verificada a capacidade do código de simular propagação de ondas e de aceitar a condição de contorno que cria estas ondas.

Diferente do caso anterior, a variação do desnível inicial é nula e as ondas são induzidas pela variação da velocidade, imposta na condição de contorno de entrada (condição de Dirichlet), à esquerda do domínio, efeito semelhante ao produzido por um batedor de ondas (figura 5.14). No final do reservatório é imposta uma condição de saída livre em conjunto com uma camada esponja, evitando-se assim a reflexão das ondas.

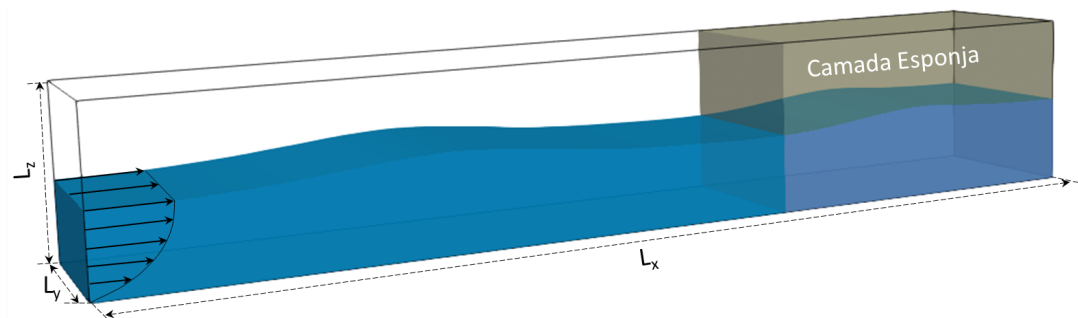


Figura 5.14: Domínio de simulação para o caso: ondas de Stokes, em que ondas de Stokes de diferentes ordens são produzidas no lado esquerdo do domínio

O domínio computacional possui $L_x = 12m$, $L_y = 2m$ e $L_z = 2m$, com discretização $\Delta_x = 8 \times 10^{-3}m$, $\Delta_y = 5,6 \times 10^{-2}m$ e $\Delta_z = 6,7 \times 10^{-3}m$. Foram simulados 10s com $\Delta t = 10^{-4}$.

Para impor as ondas ao domínio, uma condição de contorno do tipo Dirichlet é utilizada em $x = 0$, em que as velocidades são variadas de acordo com a onda que se tem interesse em simular. As equações são baseadas na própria Teoria de Ondas, e utilizou-se uma adaptação da implantação numérica proposta pelo trabalho de Higuera et al. (2013)[30], para evitar oscilações numéricas excessivas na superfície livre (Apêndice B). Os contornos laterais, inferior e superior são de deslizamento livre. Não se utilizou o efeito da tensão superficial para este caso. O parâmetro que controla a intensidade da hiperviscosidade ν_0/ν é de 30 para todos os testes deste caso. O alto valor de ν_0/ν foi utilizado para reduzir as oscilações numéricas presentes no ar, na região da condição de contorno $x = 0$.

Foram simuladas ondas com $T = 2,5s$ e $h = 1m$ de dois tipos: para Stokes I considerou-se

que $a = 0,02$ e $\lambda = 6,69m$; já para Stokes II, considerou-se que $a = 0,1$ e $\lambda = 6,99m$.

VERIFICAÇÃO DE HODÓGRADAS

Foram obtidas hodógrafas de sondas posicionadas em três diferentes profundidades da interseção dos planos $x = 6m$ e $y = 1m$. Os resultados gerados pelo código são comparados com os resultados teóricos obtidos pela própria Teoria de Ondas (figura 5.15), a mesma utilizada para criar a onda na condição de contorno.

O erro médio das hodógrafas, $erro_m = \sqrt{\bar{u}_{erro}^2 + \bar{w}_{erro}^2}$, assim como o erro médio normalizado $erro_{mn} = \sqrt{(\bar{u}_{erro}/u_{a,max})^2 + (\bar{w}_{erro}/w_{a,max})^2}$ foram calculados (tabela 5.10). Os erros médios normalizados variam de 7% a 9%. Para as ondas de Stokes I, o erro decai para hodógrafas em pontos mais profundos. Já, para ondas de Stokes II, os erros não demonstraram relação direta com a profundidade do escoamento.

Tabela 5.10: Erros das hódografas simuladas em comparação com as analíticas.

Teoria de Onda	Profundidade (m)	$erro_m(m/s)$	$erro_{mn}(-)$
Stokes I	$z = 0,10$	0.002	0.070
	$z = 0,50$	0.003	0.075
	$z = 0,90$	0.005	0.090
Stokes II	$z = 0,10$	0.009	0.078
	$z = 0,50$	0.016	0.074
	$z = 0,85$	0.023	0.078

Com esta baixa diferença entre o equacionamento teórico de ondas e o numérico baseado nas equações da Navier Stokes, o *Incompact3d-LS* é considerado como válido para o caso de propagação de ondas, seja pelo efeito de seiche, ou pela indução de ondas pela condição de entrada. O código mostrou-se capaz de representar tanto a superfície livre quanto a distribuição de velocidades no corpo hídrico.

As diferenças entre os resultados se deram:

- por parte da teoria de ondas:
 - É considerado que a água é um fluido invíscido,
 - É representado um escoamento irrotacional,

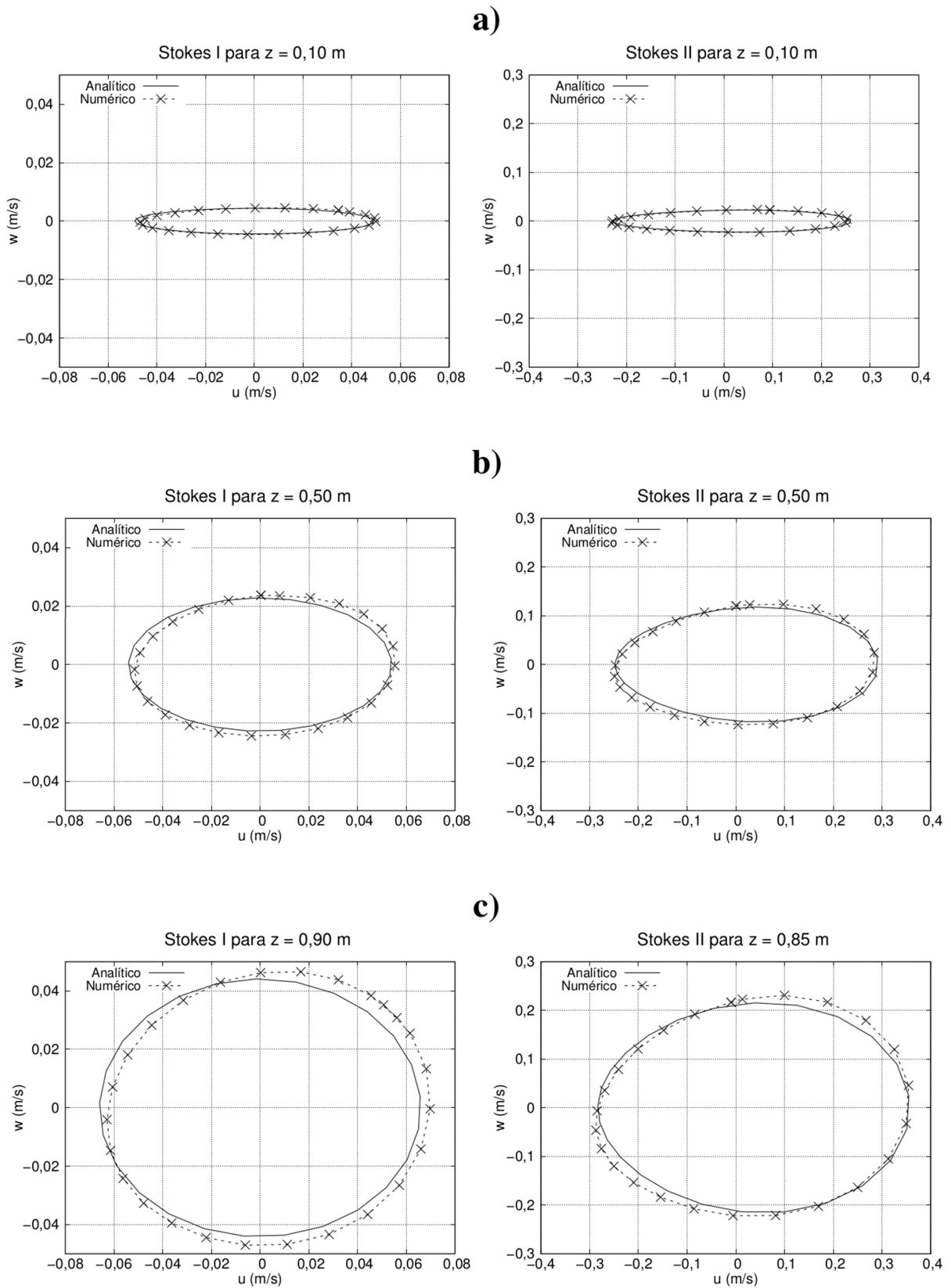


Figura 5.15: Hodógrafas da simulação e analítica para Stokes I (esquerda) e Stokes II (direita) a profundidade de a) $z = 0,10m$, b) $z = 0,50m$ e c) $z = 0,90m$.

- Os efeitos do ar não são relevados;
- por parte do *Incompact3d-LS*:
 - Erros provenientes da aproximação das derivadas, integrais e interpolações (muito baixo, visto que a verificação pelo MMS demonstrou que se trata de um código de quinta ordem de precisão),
 - É considerada uma interface espessa entre água e ar.

Nenhum dos casos de ondas (efeito de seiche e ondas de Stokes), expostos neste trabalho, apresentou aspectos relevantes de turbulência, mesmo no ar. Pequenos vórtices ocorrem próximos à condição de entrada do domínio (fig. 5.16 e 5.17), com isosuperfície de critério- q (Q) de $100s^{-1}$ (§ 2.3), gerados pela imposição da onda na condição de contorno, não são vistos em nenhuma outra parte do domínio. De qualquer forma, as estruturas geradas não possuem forma tridimensionais. Não se encontraram vórtices na água para nenhum dos casos, ao se analisar o $Q \leq 0,1s^{-1}$.

5.3.3 QUEDA DE GOTA

Em simulações numéricas diretas as menores escalas são de fundamental importância para a representatividade adequada da perda de energia no escoamento. Desta maneira, em um rio, existem muitos casos em que bolhas ou gotas são formadas no próprio leito. Em tratamento de água e esgoto, a presença de bolhas de gases, seja por formação espontânea ou inserção, ocorrem com bastante frequência.

Manzello e Yang (2002)[52] apresentam um caso experimental de queda de gotas em recipientes (figura 5.18). Embora os autores apresentem diferentes líquidos, o presente trabalho irá se ater somente ao caso da gota de água caindo em um recipiente com água. Para este caso em particular, a massa específica e a viscosidade dinâmica da água são $996,9kg/m^3$ e $8,9 \times 10^{-4}Ns/m^2$, respectivamente, como definidos no trabalho experimental. A tensão superficial será variada para sua verificação, em que no experimento é considerada como $0,072N/m$. As demais características computacionais são apresentadas na tabela 5.11. As condições de contorno são todas de deslizamento livre, exceto no fundo da lâmina de água ($z = 0$) e no topo do domínio ($z = L_z$)

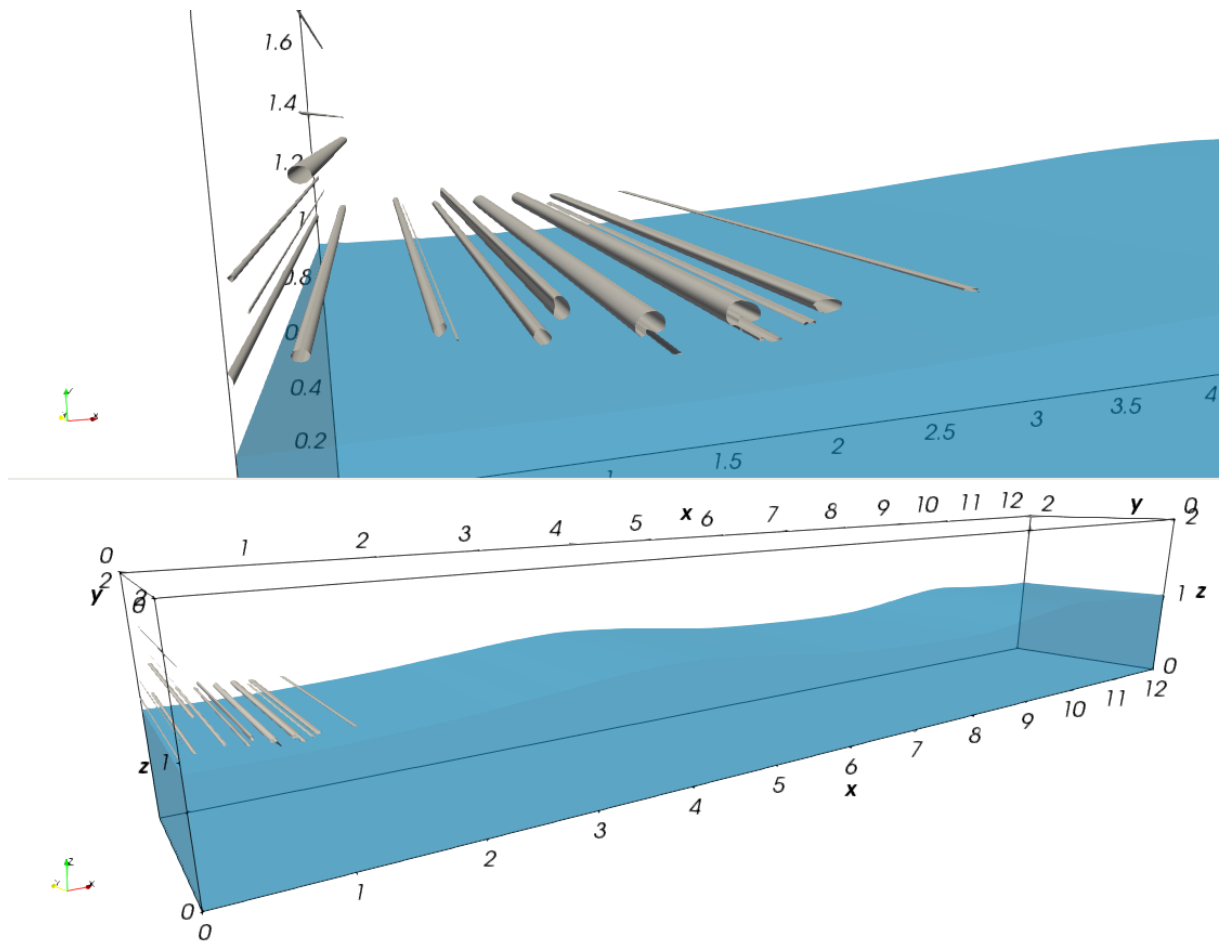


Figura 5.16: Isosuperfície de $Q = 100s^{-1}$ para caso de Stokes II em $t = 7s$, com detalhes da interface.

que se utilizou a condição de não deslizamento.

Para este caso, como se trata de um caso de escalas muito pequenas, decidiu-se utilizar o esquema de hiperviscosidade de apenas 1 ponto, dado pelas equações 4.10 e 4.11, não simulando um possível esquema de LES implícito, e sim aplicando a hiperviscosidade apenas para reduzir as oscilações numéricas inerentes ao código. Neste caso, $n = 10$, em que $k''\Delta x^2 = n\pi^2$.

Para validar o termo de tensão superficial do código *Incompact3d-LS*, utilizou-se o caso com profundidade de líquido (h_l) de $7mm$. O domínio de cálculo da simulação é de $L_x = L_y = 50mm$ e $L_z = 0,15mm$ utilizando a discretização referente à Malha 2, descrita na tabela 5.11. Para analisar o efeito da tensão superficial, escolheu-se um passo de tempo de $55ms$ em que uma estrutura de fácil identificação e medição é criada. Assim, mediu-se o diâmetro desta estrutura, antes que o seu formato apresentasse uma maior declividade (fig. 5.19). Identificou-se que, utilizando uma tensão superficial $\sigma = 0,052N/m$, a estrutura analisada gerada pela simulação

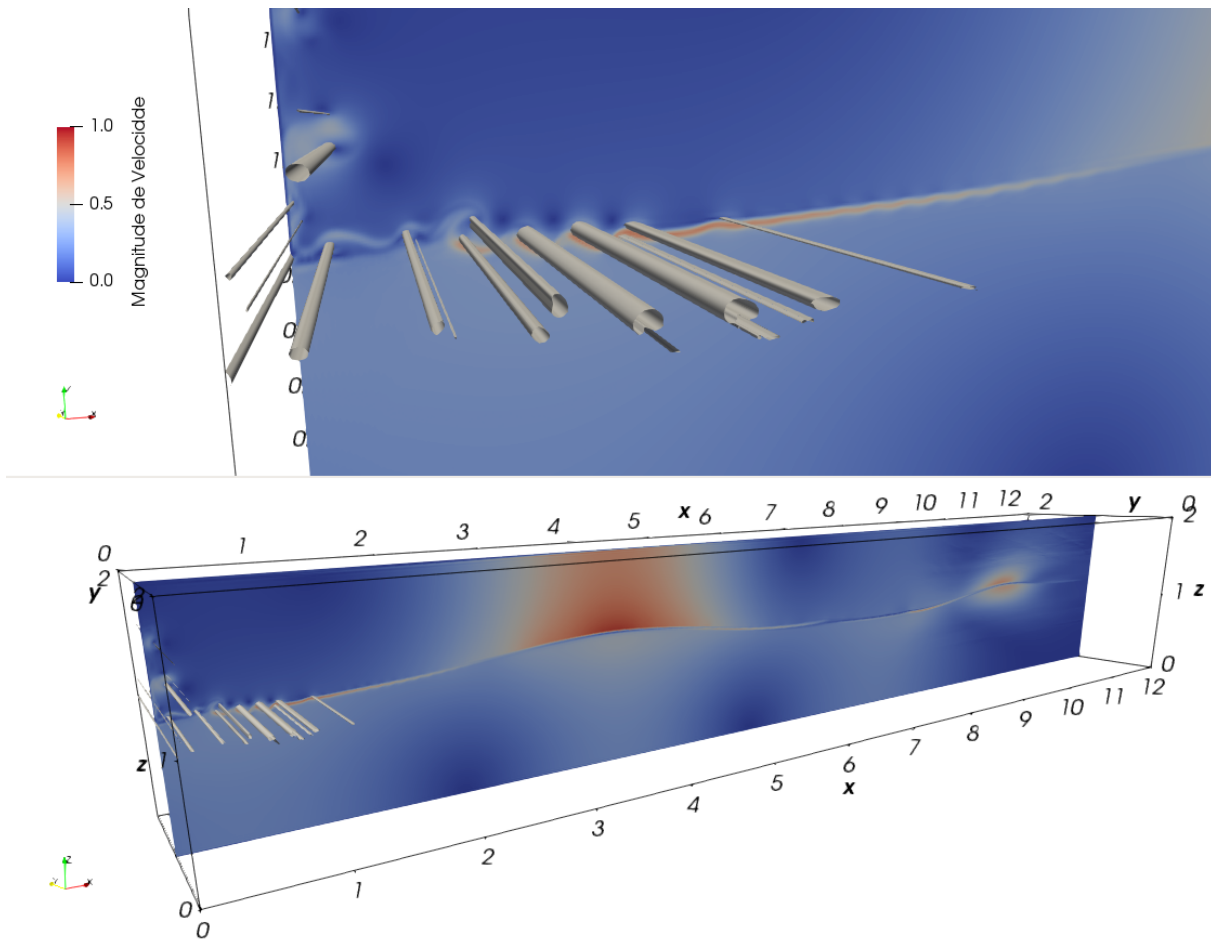


Figura 5.17: Isosuperfície de $Q = 100s^{-1}$ para caso de Stokes II em $t = 7s$, com detalhes de velocidade.

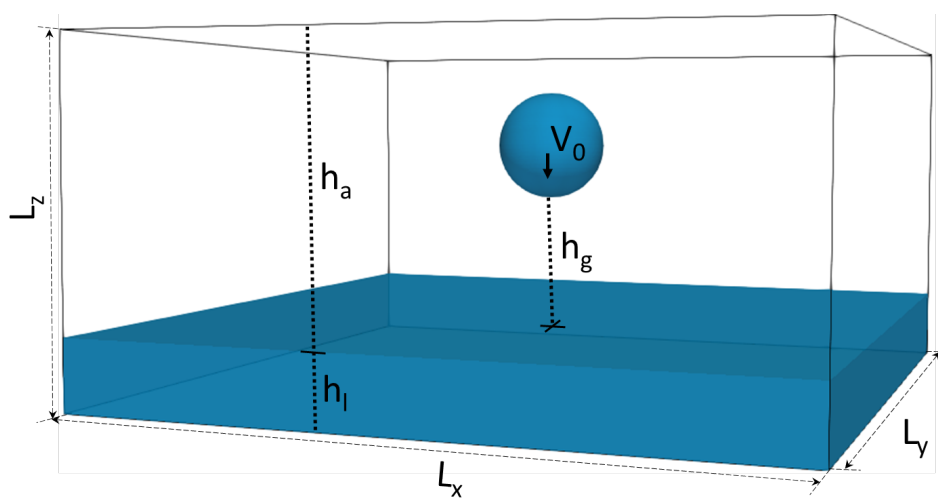


Figura 5.18: Domínio de simulação e condição inicial para o caso: queda de gota

Tabela 5.11: Características computacionais do MMS.

Características Gerais	$L_x = L_y$	25 ou 50mm
	L_z	$h_l + h_a$
	h_l	2 ou 7mm
	h_a	8mm
	h_g	5mm
	ts	25 ou 90ms
	δ	18
	V_0	1,69m/s
	Nº de Weber	123
	diâmetro	3,1mm
Malha 1 (2mm)	$n_x = n_y = 577$	$n_z = 481, \Delta t = 5 \times 10^{-7} s$
Malha 2 (7mm)	$n_x = n_y = 401$	$n_z = 241, \Delta t = 1 \times 10^{-6} s$
Malha 3 (7mm)	$n_x = n_y = 601$	$n_z = 361, \Delta t = 5 \times 10^{-7} s$

numérica se aproxima mais do caso experimental, tanto na medição de seu diâmetro, quanto no seu formato. Assim, este será o valor de σ utilizado para as próximas simulações deste trabalho.

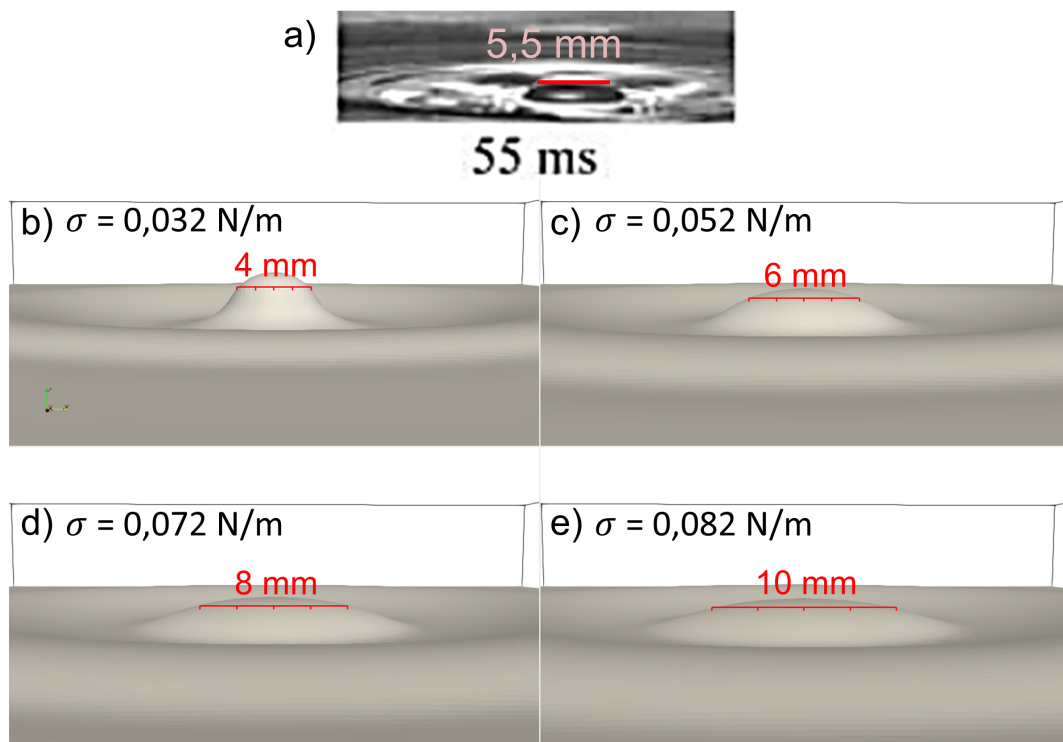


Figura 5.19: Caso da queda de gota com $h_l = 7 \text{ mm}$. Comparação entre a estrutura formada no tempo $t = 55 \text{ ms}$; a) caso experimental [52]; b) $\sigma = 0,032 \text{ N/m}$; c) $\sigma = 0,052 \text{ N/m}$; d) $\sigma = 0,072 \text{ N/m}$ e e) $\sigma = 0,082 \text{ N/m}$.

Numa segunda avaliação deste caso, duas profundidades diferentes de água no recipiente,

com $h_l = 2\text{mm}$ (Malha 1), e com 7mm (Malha 3) são simuladas. As visualizações numéricas foram comparadas com as experimentais (figura 5.20). Para o caso de 2mm , a formação da coroa, criada após a gota impactar na água do recipiente, representou adequadamente a altura e o diâmetro da formação do caso experimental, porém não representou adequadamente sua quebra, presente nos dois tempos posteriores a 6ms . Já, para o caso de 7mm , inclusive para os tempos mais avançados. Para 35ms , a estrutura formada no experimento apresenta uma altura bastante esbelta, a qual o código não conseguiu representar adequadamente.

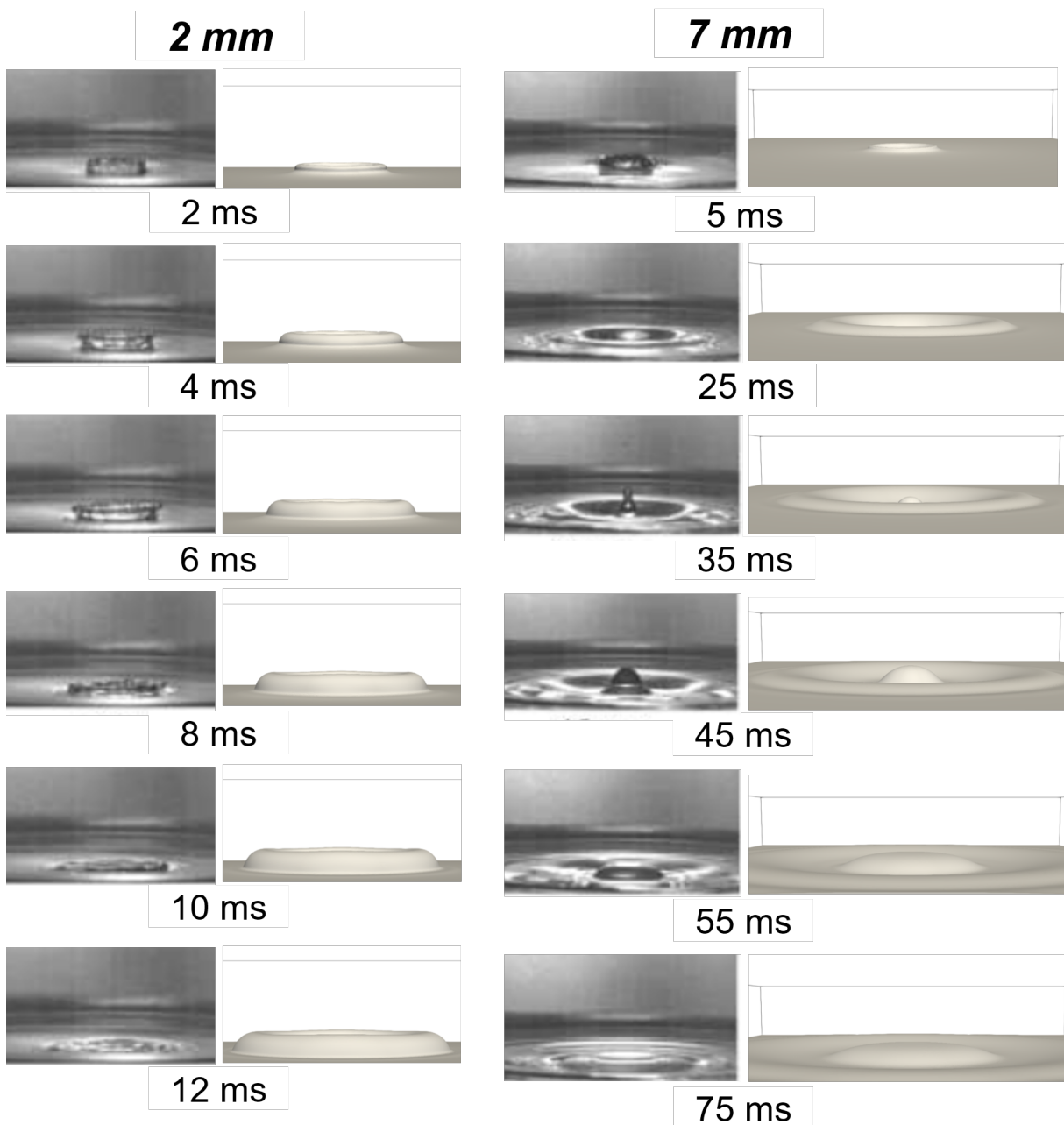


Figura 5.20: Resultados experimentais [52] e numéricos para a lâmina de 2mm (esquerda) e 7mm (direita).

As análises mostraram que o código é adequado para representar a queda de gota em recipientes, e é mais adequado para espessuras da lâminas de água maiores do que o diâmetro da gota. A falta de representatividade encontrada para $2mm$ proveio, principalmente, da incapacidade do código em representar estruturas com alta curvatura. A interface se deformou em curvaturas de aproximadamente $\kappa \approx 4.000m^{-1}$. Para representar esta curvatura, pela equação 5.7, encontra-se uma malha de tamanho máximo de $4,9 \times 10^{-2}mm$, enquanto que na simulação se utilizou uma malha de tamanho máximo de $4,3 \times 10^{-2}mm$, um valor muito próximo ao limiar definido. Assim, pela dificuldade de representar maiores curvaturas, o código deforma a superfície livre indevidamente criando estruturas não realísticas.

Afim de analisar as estruturas turbulentas do escoamento, foi utilizado o critério Q (§ 2.3). No caso da queda de gota no recipiente de espessura de lâmina de $7mm$, existe diferença das estruturas turbulentas criadas no ar e na água, em que certamente são mais energéticas no ar devido a sua maior velocidade (figuras 5.21 e 5.22). Enquanto que no ar a estrutura turbulenta se assemelha a um cogumelo (como visto em explosões), na água se forma um medusóide invertido, onde aparece claramente o disco e os tentáculos. Ambas as estruturas se desenvolvem até o encontro da condição de contorno do topo e do fundo, respectivamente. Próximo da superfície livre, no ar, formam-se aros que se espalham ao longo da superfície livre até o encontro dos contornos laterais do domínio.

Os resultados apresentados para o caso da queda da gota permitem inferir que outras aplicações do mesmo tipo, envolvendo gotas e bolhas, também podem ser aplicadas, esperando-se bons resultados, quando respeitados os limites do código.

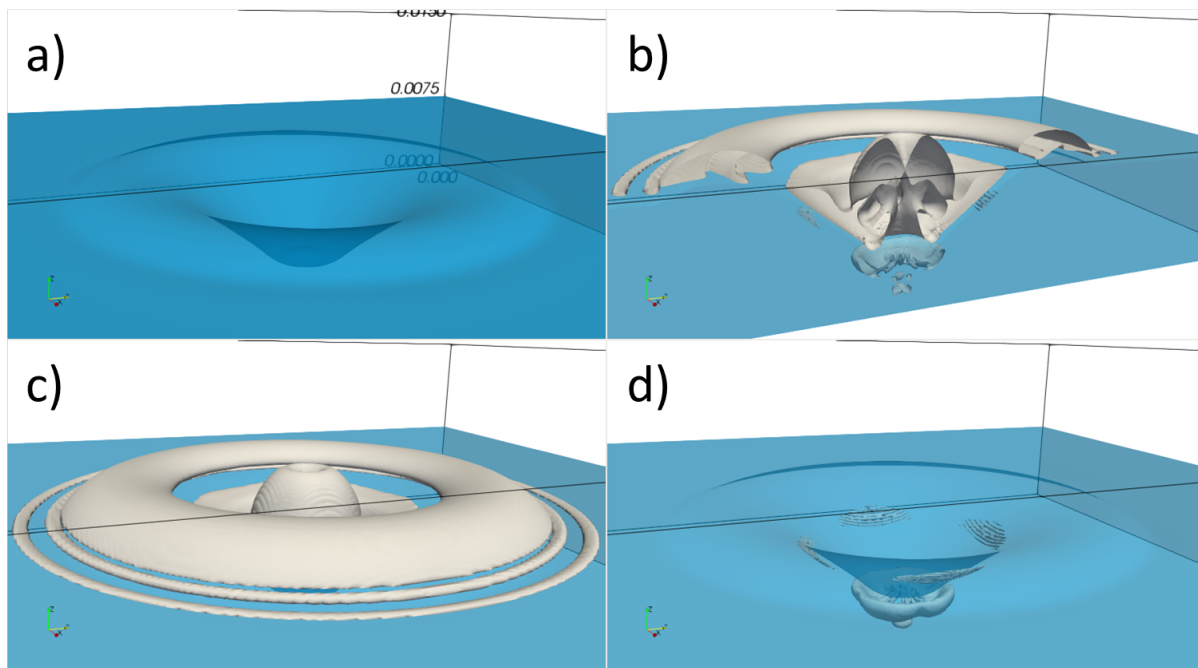


Figura 5.21: Isosuperfície de $Q = 1.000s^{-1}$ para o caso de queda de gota no recipiente de $7mm$ de espessura de lâmina em $t = 25ms$. Representação: a) unicamente a superfície livre; b) do corte em $x = 25mm$ da superfície livre e da isosuperfície de Q ; c) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente no ar e d) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente na água.

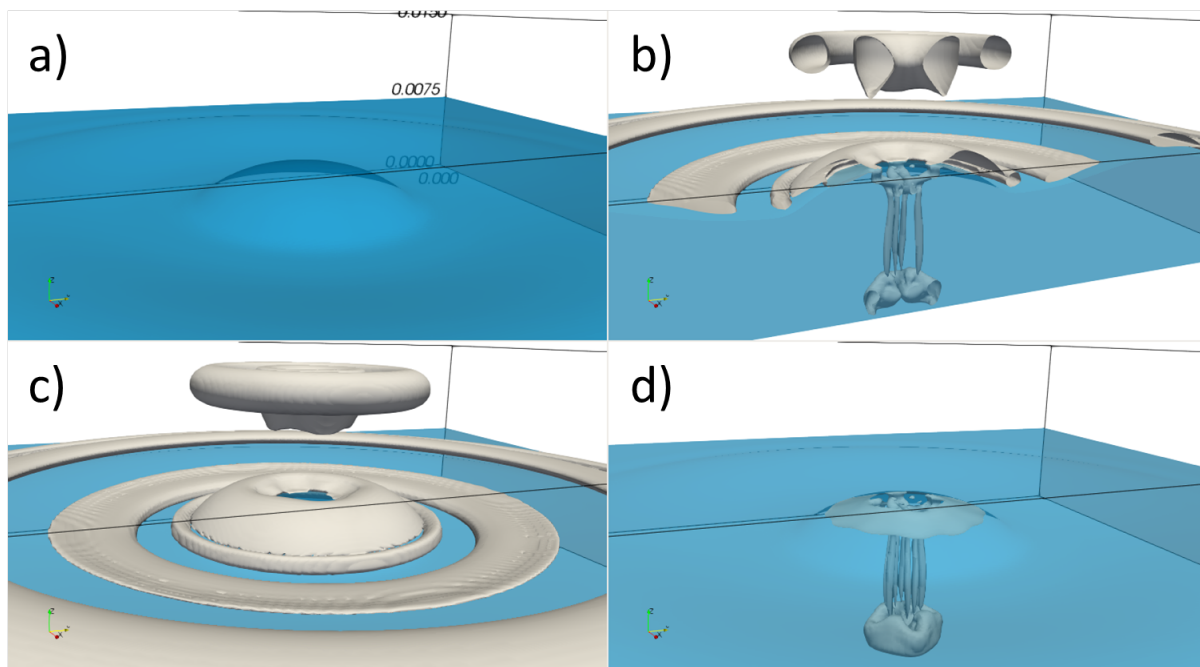


Figura 5.22: Isosuperfície de $Q = 1.000s^{-1}$ para o caso de queda de gota no recipiente de $7mm$ de espessura de lâmina em $t = 55ms$. Representação: a) unicamente a superfície livre; b) do corte em $x = 25mm$ da superfície livre e da isosuperfície de Q ; c) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente no ar e d) da superfície livre e isosuperfície de Q unicamente na água.

5.3.4 QUEBRA DE BARRAGEM

Martin e Moyce (1952)[53] realizaram um experimento de escoamento proveniente de quebra de barragem, utilizando um tanque comprido (fig. 5.23). Este experimento é amplamente utilizado na comunidade científica para validar códigos ([102], [35], [73]).

O domínio computacional proposto no presente trabalho para representar o experimento possui $L_x = 5a$, $L_y = a$ e $L_z = 2,5a$, em que $a = 0,05715m$. No presente trabalho, a altura do domínio em z é o dobro dos outros estudos numéricos, pois o choque de água na parede gera grandes vórtices, que se estiverem confinados, podem facilmente fazer divergir os cálculos. A comparação com os dados experimentais se limitam ao tempo $0,2s$, em que a frente da corrente não encontra a parede L_x ainda não ocorreu, já que no experimento [53] o domínio é aberto na fronteira de saída $x = L_x$ e também na fronteira superior $z = L_z$.

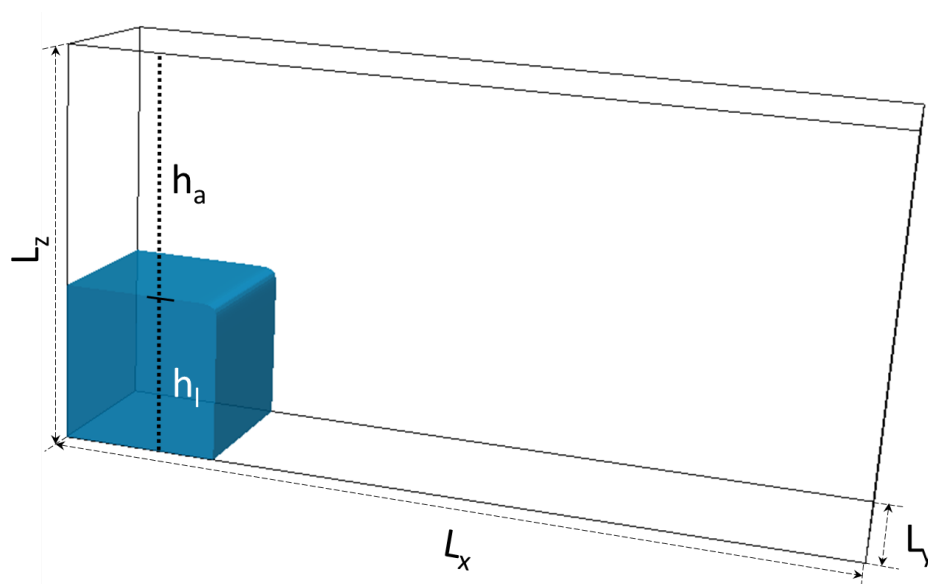


Figura 5.23: Domínio de simulação para o caso: quebra de barragem

A condição de deslizamento livre foi aplicada ao contorno de todo o domínio computacional. A função distância inicial é representada como uma superfície cilíndrica, da forma

$$\phi^0 = (x^m + z^m)^{1/m} + a, \quad (5.18)$$

em que $m = 30$, e se $m \rightarrow \infty$ tem-se uma superfície prismática. Assim, o escoamento simulado consiste em um volume de água cúbico com lado a que é liberado instantaneamente,

representando-se o fenômeno de escoamento provocado por uma quebra completa de barragem. Duas discretizações numéricas foram consideradas, descritas na tabela 5.12.

Tabela 5.12: Características computacionais do caso Quebra de Barragem.

Características Gerais	h_l	a
	h_a	$L_z - a$
	ts	0,2 e 1s
	ν_0/ν	10
	σ	0,052N/m
	δ	18
Malha 1	$\Delta t = 1 \times 10^{-5}s$	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = a/50$
Malha 2	$\Delta t = 5 \times 10^{-6}s$	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = a/96$
Malha 3	$\Delta t = 2 \times 10^{-6}s$	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = a/168$
Malha 4	$\Delta t = 1 \times 10^{-6}s$	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = a/192$

São analisadas a posição da frente da corrente e a altura da coluna de água. A posição da frente do escoamento, ao longo de 0,2s para as duas discretizações é comparada com o resultado experimental (figura 5.24). É perceptível que o caso com malha mais refinada se adéqua mais ao caso experimental. Inicialmente, tem-se uma superestimativa da posição da frente, para todas as malhas, e para os tempos mais avançados se tem uma subestimativa, principalmente para malhas menos refinadas. A melhora devida ao refinamento da malha proveem principalmente da espessura da interface considerada, que se torna menor em comprimento quando mais refinada é a malha, já que o número de pontos para representá-la é fixo ($\delta = 18$).

Também se validou a posição da coluna de água no eixo $(x, y) = (0, a/2)$ (figura 5.25). Os resultados não se mostraram sensíveis ao refinamento da malha e o código representou bem esta característica, não ocorrendo o problema encontrado anteriormente causado pela espessura da interface. A simulação apresentada até o tempo 0,2s não apresenta estruturas tridimensionais, mesmo ao se utilizar uma DNS tridimensional para representá-lo.

Apenas as características de posição da frente e da coluna de água foram apresentadas no experimento de Martin e Moyce (1952)[53]. Como estas são características muito gerais, códigos com modelos RANS já fornecem bons resultados, não havendo necessidade de fazer DNS, caso o interesse seja apenas a análise destas grandezas.

De qualquer forma, a DNS tem a capacidade de fornecer resultados com maior detalhe nas pequenas escalas, diferente das metodologias que utilizam um modelo de turbulência. Neste

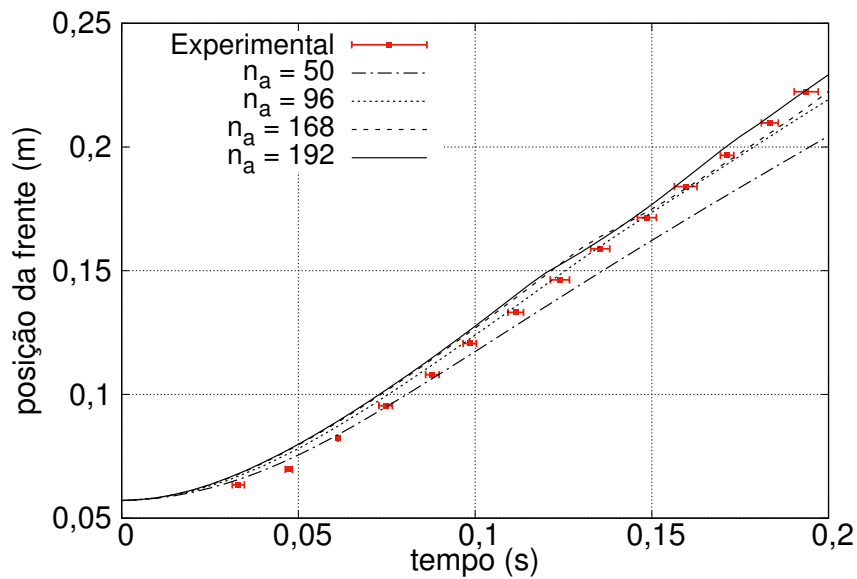


Figura 5.24: Comparação entre a posição da frente ao longo do tempo do experimento [53] com os casos numéricos para diferentes discretizações: $n_a = 50$, $n_a = 96$, $n_a = 168$ e $n_a = 192$.

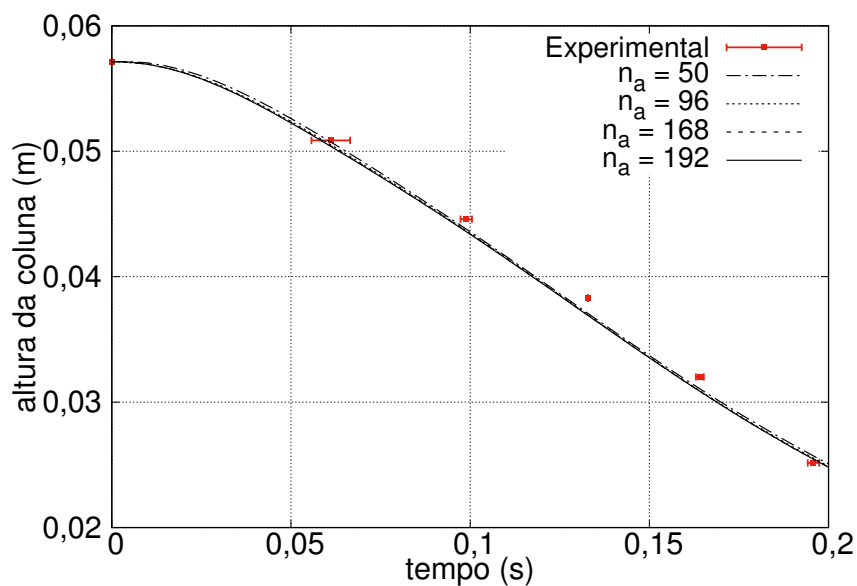


Figura 5.25: Comparação entre a altura da coluna de água no eixo $(x, y) = (0, a/2)$ ao longo do tempo do experimento [53] com os casos numéricos para diferentes discretizações: $n_a = 50$, $n_a = 96$, $n_a = 168$ e $n_a = 192$.

âmbito, utilizando a discretização proveniente da Malha 1 ($n_d = 50$), analisaram-se as estruturas turbulentas, principalmente no ar, no momento do impacto do escoamento com o contorno $x = L_x$. Observa-se que, antes do momento do impacto em $x = L_x$, o escoamento possui comportamento bidimensional. Depois do impacto ocorre a geração de maiores vórtices, e se inicia o fenômeno de tridimensionalização das estruturas turbulentas (figuras 5.26).

Avaliaram-se diversas magnitudes de critério Q e identificou-se a formação dos menores vórtices tridimensionais. Este vórtices podem ser observados para um $Q \leq 1.000s^{-1}$ (figura 5.27) e inicia-se próximo ao tempo de $0,45s$ (figura 5.27b), em que pequenas estruturas tridimensionais, aparentemente insignificantes se desenvolvem. Para tempos mais avançados, estas estruturas menores evoluem para estruturas maiores, já da dimensão dos vórtices bidimensionais presentes (figura 5.27c). Com a ampliação destas estruturas, elas passam a influenciar uma região cada vez maior do domínio até afetar uma grande parte do domínio, transformando em 3D diversas estruturas antes 2D (figuras 5.27g e 5.27h).

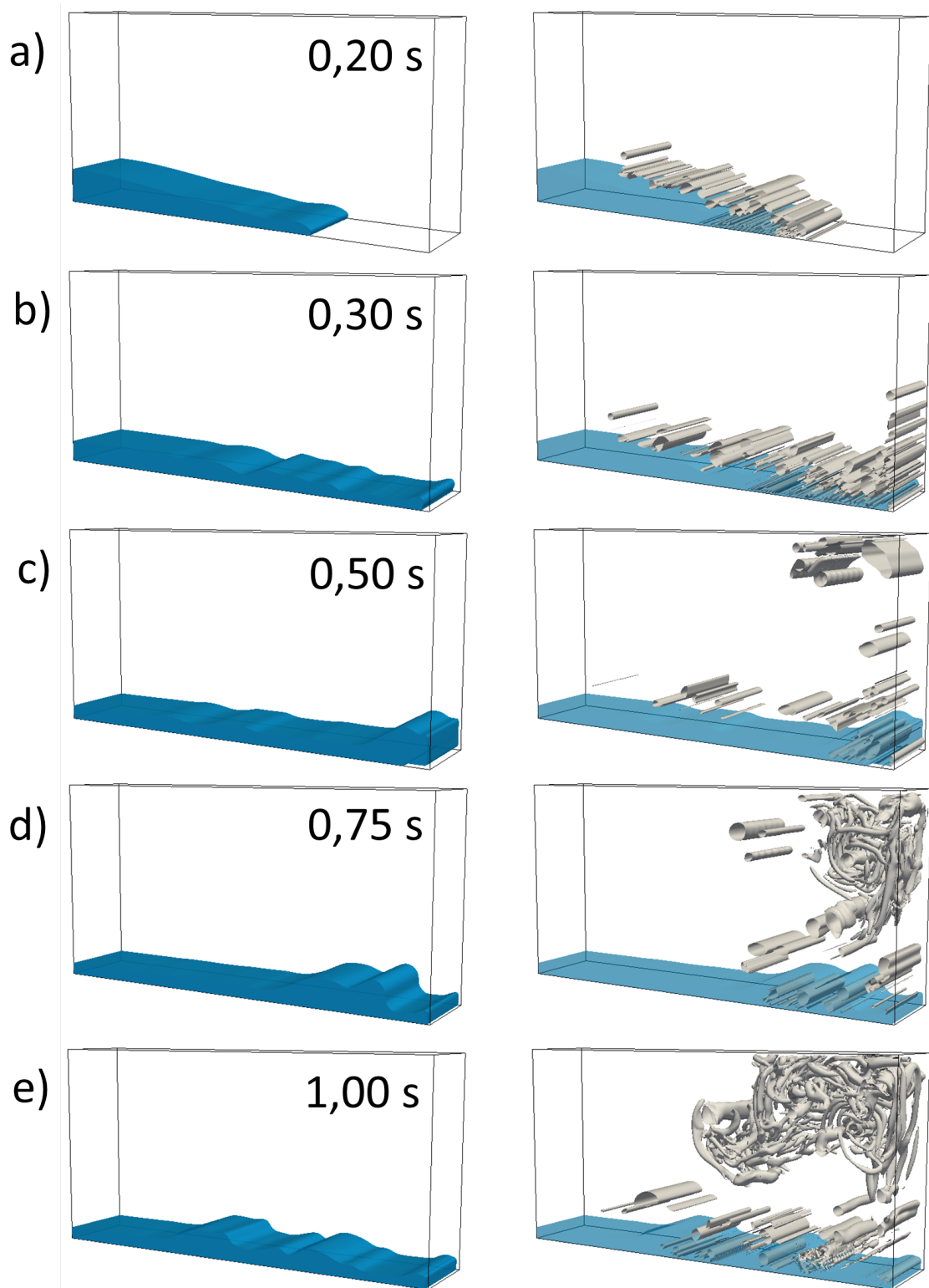


Figura 5.26: Representação da variação da superfície livre (esquerda) e representação da superfície livre com isosuperfícies de critério $Q = 5.000s^{-1}$, para os tempos: a) 0,20s, b) 0,30s, c) 0,50s, d) 0,75s e e) 1,00s.

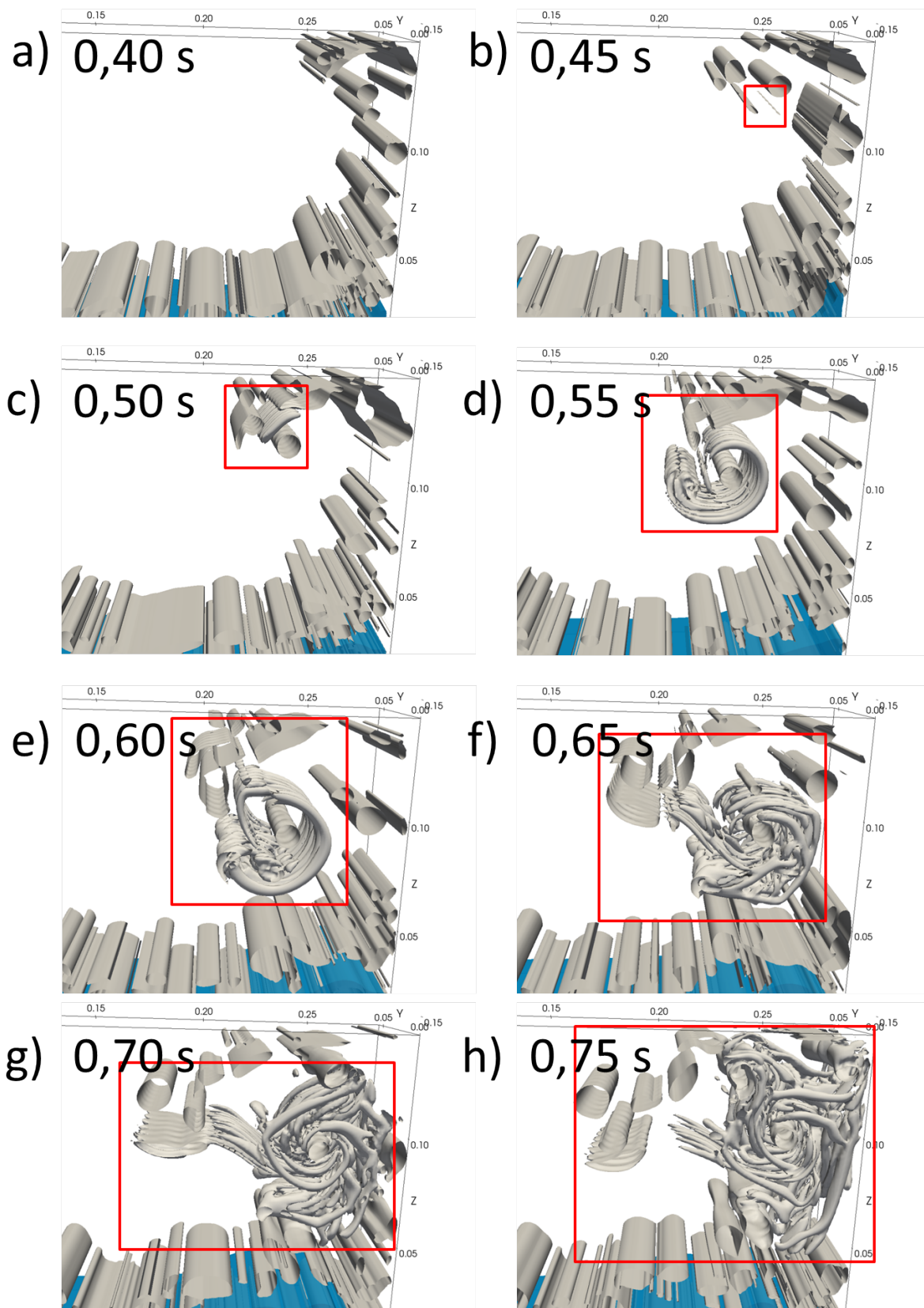


Figura 5.27: Aproximação visual do domínio na região próxima ao contorno $x = L_x$. Representação da superfície livre com isosuperfícies de critério $Q = 1.000s^{-1}$ para os tempos: a) 0,40s, b) 0,45s, c) 0,50s, d) 0,55s, e) 0,60s, f) 0,65s, g) 0,70s e h) 0,75s.

6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O presente trabalho teve como objetivo propor uma formulação de alta precisão para escoamentos bifásicos. Foi apresentado o código de alta ordem *Incompact3d-LS*, uma modificação do código *Incompact3d*, para simulação numérica de escoamentos bifásicos, focando-se nos fluidos água e ar. Diversas modificações no código *Incompact3d* foram necessárias para a implementação da condição de interface entre os fluidos.

Além de pequenas modificações nas equações de Navier-Stokes, como a adição do termo de gravidade, a segregação do termo de difusividade pela necessidade de se representar uma viscosidade cinemática variável, adicionou-se também um termo referente à força de tensão superficial.

Destaca-se a nova consideração do termo de pressão. Optou-se em segregar a pressão em duas parcelas: pressão não hidrostática e pressão hidrostática, em que a segunda foi calculada por na integração vertical. O termo de pressão não hidrostática sofreu uma decomposição de sua derivada para poder considerar a massa específica variável. Parte deste termo foi tratada explicitamente, e outra parte foi considerada implicitamente, calculando-a, como usualmente, com uma equação de Poisson, que é necessária pela proposição do Método da Projeção. Agregar este termo torna o código instável, e para o tornar estável se adotou uma nova técnica denominada de "consideração de pressão sobreimplícita".

Para se considerar a condição de interface entre dois fluidos, utilizou-se uma modificação do Método *Level Set*. A nova proposta de sua resolução foi formulada, utilizando esquemas compactos de alta ordem em conjunto com a ferramenta de hiperviscosidade, utilizada para reduzir as oscilações numéricas de alta frequência.

Foram realizados testes de verificação unicamente com o Método *Level Set* e sua nova formulação que permite a utilização de esquema compactos centrados. Como destaque, observou-se a rapidez de cálculo e precisão que esta nova formulação permite. Entretanto, notou-se que

existe um limite de utilização desta metodologia, referente à curvatura da interface. A hiperviscosidade não foi capaz de proporcionar aos esquemas compactos a possibilidade de simular completamente o caso chamado "Teste do Vórtice Único". Isto ocorreu porque para grandes curvaturas, as estruturas de esqueletos formadas na função distância foram muito expressivas causando instabilidades, que, mesmo com o auxílio da hiperviscosidade, não foi possível controlar.

Posteriormente, verificou-se o código *Incompact3d-LS* pelo Método da Solução Manufaturada (MMS), em que foi possível identificar a ordem de precisão do código. Originalmente, no código *Incompact3d* os esquemas centrados utilizados são de sexta ordem, porém a condição de contorno do tipo Dirichlet são de terceira ordem de precisão. O MMS demonstrou que o erro na fase líquida é de quinta ordem de precisão.

Diversos testes foram realizados com base no caso de validação de seiche 3D. A espessura da interface (δ) foi variada de 6 a 27 pontos. Espessuras menores do que 6 provocaram a divergência da solução. Para valores de $\delta < 18$, observaram-se oscilações numéricas, principalmente no ar, sendo que para $\delta = 15$ ocorrem oscilações no ar que não afetam diretamente a massa de água, e para $\delta = 18$ não ocorrem oscilações numéricas. Mesmo com oscilações numéricas, o desnível que mais se assemelha à solução teórica é o que possui menor δ . Também se analisou o efeito da Consideração Sobreimplícita de Pressão, modificando o parâmetro m , que representa a quantidade de termos precedentes considerados no método. Identificou-se uma pequena variação do erro provocado por este método para um valor de m maior. Ainda para este caso, avaliou-se o erro referente à discretização de malha, onde se identificou que refinar a malha unicamente em z reduz os erros, enquanto que refinando a malha em x e y não produziu melhoras.

Para o caso de criação de ondas de Stokes, adicionou-se, por meio de uma condição de Dirichlet, um gerador de onda na entrada do domínio ($x = 0$). Para evitar a reflexão das ondas, uma camada esponja foi considerada em conjunto com uma condição de contorno de saída livre. Avaliaram-se hodógrafas para ondas de Stokes I e II e a diferença entre os resultados da simulação e da formulação teórica variaram de 7% a 9%. Para o caso de ondas de Stokes I, os erros aumentaram com a profundidade, já para o caso de ondas de Stokes II, os erros

foram insensíveis à profundidade. Observaram-se, ainda, vórtices bidimensionais unicamente na condição de contorno de entrada, a qual foram geradas pela proximidade da própria condição de contorno, verificando-se a inexistência de turbulência referente à propagação destas ondas.

O penúltimo caso, referente à queda de uma gota, possui uma dimensão bastante inferior (na ordem de milímetros), se comparada com os casos anteriores. O seu domínio computacional tem tamanho na ordem de dezenas de milímetros e a gota simulada conta com $3,1\text{mm}$. Para uma escala tão pequena as forças de tensão superficial são relevantes. Neste âmbito, verificou-se a influência de diversos coeficientes de tensão superficial, para identificar qual resulta numa melhor comparação entre o caso simulado e o caso experimental. Foi encontrado que um fator de correção de σ de aproximadamente -30% ($\sigma = 0.052\text{N/m}$) foi necessário para se obter os melhores resultados. Diferentes profundidades de água no recipiente, no qual a gota cai, foram simuladas e comparadas com casos experimentais. Mostrou-se uma boa coerência de forma geral, mas ainda com uma ressalva com relação a curvatura máxima aceitável, imposta pelo método *Level Set* com esquemas compactos utilizado para a simulação.

No caso de escoamento proveniente de quebra de barragem, apresentou-se comparação entre a frente de propagação e a altura da coluna de água com um caso experimental se variando o refinamento da malha. Ambos os teste foram bem sucedidos em que, para a frente de propagação o refinamento da malha aproxima consideravelmente o resultado da solução numérica com o resultado do experimento. Já, para a coluna de água, o resultado não teve grande sensibilidade com o refinamento da malha, se mostrando adequado já para a malha mais grosseira. Ainda, avaliaram-se as estruturas turbulentas visíveis como isolinhas do critério Q , em que uma tridimensionalização espontânea ocorre após o choque do escoamento com a parede.

CONSIDERAÇÕES

A utilização da hiperviscosidade para reduzir as oscilações espúrias foi de crucial importância para a representação de uma variação da massa específica da proporção necessária para casos água-ar. Com o seu auxílio foi possível utilizar 36 (2δ) pontos para representar a variação entre as massas específicas, sem a geração de *wiggles*. Para espessuras menores, o código é estável e pode fornecer bons resultados, porém existe a geração de *wiggles*.

A consideração de pressão sobreimplícita se mostrou eficiente no quesito de estabilização do código relacionada ao termo de pressão explícito. A utilização de diversos termos (testado até $m = 6$), não provocou o acréscimo de erros significativos nos resultados.

O método Level Set com esquemas compactos se mostrou eficiente quando se utiliza curvaturas pequenas. Entretanto, para casos mais complexos, onde pequenas estruturas podem ser formadas (levando a grandes curvaturas), o método ainda necessita ser aperfeiçoado para utilização adequada.

O coeficiente de tensão superficial teve o seu valor alterado para representar mais adequadamente uma tensão superficial real, provavelmente por causa da espessura virtual da interface necessária para evitar o surgimento oscilações espúrias.

RECOMENDAÇÕES

O código ainda possui diversas limitações que podem ser eliminadas ou minimizadas, além de que novos métodos podem ser inseridos para representar novos fenômenos. A seguir, são apresentadas recomendações pontuais para o prosseguimento dos estudos:

- adaptar o Método de Fronteiras Imersas no código multifásico, adicionando-se assim a fase sólida ao código;
- adicionar a simulação de sedimentos, ou outros escalares, para representar situações de corrente de densidade com superfície livre;
- permitir a representação de espessuras virtuais da interface mais finas. Enfatiza-se a necessidade de desenvolvimento técnico-científico relevante para atingir tal objetivo;
- aperfeiçoar o código *CompactLSM* para que curvaturas maiores sejam representadas sem distorções.
- implementar a técnica de *stretching* da malha, para que seja possível de refinar a malha unicamente nas proximidades da interface.

A DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL - WENO

Métodos ENO (*essentially non oscillatory*) foram desenvolvidos, a partir de 1983, por Harten [27] e são utilizados para resolver equações puramente hiperbólicas, evitando problemas de oscilações espúrias, especialmente próximo de descontinuidades. A ideia principal por trás dos métodos ENO é a escolha de um *stencil* de pontos em que a solução varia de forma suave, evitando a introdução de oscilações.

O esquema numérico WENO (*weighted essentially non oscillatory*) [48] é utilizado para realizar a advecção (eq. 4.47), a reinicialização (eq. 4.48) e a correção do volume (eq. 4.49) da função distância ϕ . O WENO é um esquema amplamente utilizado para resolver as equações propostas pelo método *Level Set*, pois é de 5ª ordem de precisão, para os cálculos realizados longe de condições de contorno e descontinuidades, e de 3ª ordem de precisão para os cálculos realizados na vizinhança de condições de contorno e descontinuidades.

A essência deste método, baseado no método ENO, é identificar qual é a suavidade de um conjunto de derivadas numéricas da função em um ponto; para tal, cria-se um indicador de suavidade para cada derivada. O método pondera as derivadas analisadas de acordo com o indicador de suavidade e, então, calcula a derivada efetiva a partir da média ponderada destas derivadas, fornecendo um peso maior para as derivadas mais suaves.

A aplicação deste esquema se assemelha muito à aplicação de um esquema *upwind*, e se tem um esquema de derivação deslocada para a esquerda ϕ_x^- e um esquema de derivação deslocada para a direita ϕ_x^+ . Serão apresentados alguns termos repetidamente por questão de organização. Calcula-se a derivada ϕ_x^- , com o conjunto de expressões

$$\phi_1^- = \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\Delta x}, \quad \phi_2^- = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}, \quad \phi_3^- = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}, \quad \phi_4^- = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \quad \phi_5^- = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}, \quad (\text{A.1})$$

e ϕ'_x com

$$\phi'_1{}^{\pm} = \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\Delta x}, \quad \phi'_2{}^{\pm} = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}, \quad \phi'_3{}^{\pm} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}, \quad \phi'_4{}^{\pm} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}, \quad \phi'_5{}^{\pm} = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}. \quad (\text{A.2})$$

Em seguida, são calculados os indicadores de suavidade (IS), da forma:

$$\begin{aligned} IS_1^{\pm} &= \frac{13}{12} (\phi'_1{}^{\pm} - 2\phi'_2{}^{\pm} + \phi'_3{}^{\pm})^2 + \frac{1}{4} (\phi'_1{}^{\pm} - 4\phi'_2{}^{\pm} + 3\phi'_3{}^{\pm})^2, \\ IS_2^{\pm} &= \frac{13}{12} (\phi'_2{}^{\pm} - 2\phi'_3{}^{\pm} + \phi'_4{}^{\pm})^2 + \frac{1}{4} (\phi'_2{}^{\pm} - \phi'_4{}^{\pm})^2, \\ IS_3^{\pm} &= \frac{13}{12} (\phi'_3{}^{\pm} - 2\phi'_4{}^{\pm} + \phi'_5{}^{\pm})^2 + \frac{1}{4} (3\phi'_3{}^{\pm} - 4\phi'_4{}^{\pm} + \phi'_5{}^{\pm})^2, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

e os pesos

$$\alpha_m^{\pm} = \frac{d_m}{(\epsilon + IS_m^{\pm})^2}, \quad \omega_m^{\pm} = \frac{\alpha_m^{\pm}}{\alpha_1^{\pm} + \alpha_2^{\pm} + \alpha_3^{\pm}}, \quad m = 1, 2, 3. \quad (\text{A.4})$$

onde α , ω e d são coeficientes de ponderação em que, normalmente, são fixados em $d_1 = 0,1$, $d_2 = 0,6$ e $d_3 = 0,3$ e o coeficiente de erro $\epsilon = 10^{-6}$ que tem por finalidade evitar que o denominador de (A.4) se anule. Por fim, a derivada é calculada como

$$\phi'_x{}^{\pm} = \omega_1^{\pm} \left(\frac{\phi'_1{}^{\pm}}{3} - \frac{7\phi'_2{}^{\pm}}{6} + \frac{11\phi'_3{}^{\pm}}{6} \right) + \omega_2^{\pm} \left(-\frac{\phi'_2{}^{\pm}}{6} + \frac{5\phi'_3{}^{\pm}}{6} + \frac{\phi'_4{}^{\pm}}{3} \right) + \omega_3^{\pm} \left(\frac{\phi'_3{}^{\pm}}{3} + \frac{5\phi'_4{}^{\pm}}{6} - \frac{\phi'_5{}^{\pm}}{6} \right). \quad (\text{A.5})$$

Cada termo multiplicado pelo termo ponderador ω representa uma derivada de 3ª ordem, ao desenvolve-los pela série de Taylor. Este procedimento é aplicado analogamente nas outras direções.

Os valores encontrados das derivadas de ϕ são utilizados para calcular a convecção pura, e os procedimentos de reinicialização e de correção de volume, efetivando o Método *Level Set*.

1.1 CONVECÇÃO PURA

Os termos que envolvem a derivada espacial ($\vec{u} \cdot \nabla \phi$) na equação de advecção (eq. 3.26) são calculados de forma semelhante a esquemas do tipo *upwind*, da forma

$$u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \max(u_i, 0) \frac{\partial \phi^-}{\partial x_i} - \min(u_i, 0) \frac{\partial \phi^+}{\partial x_i}. \quad (\text{A.6})$$

1.2 REINICIALIZAÇÃO E CORREÇÃO DE VOLUME

O módulo do gradiente de ϕ , $|\nabla\phi|$, utilizado na reinicialização (eq. 3.30) e na correção de volume (eq. 3.32) é calculado levando em consideração as derivadas como

$$\frac{\partial\phi}{\partial x_i} = \begin{cases} \max\left\{-\min\left(\frac{\partial\phi^+}{\partial x_i}, 0\right), \max\left(\frac{\partial\phi^-}{\partial x_i}, 0\right)\right\} & \text{se } \phi > 0, \\ \max\left\{\max\left(\frac{\partial\phi^+}{\partial x_i}, 0\right), -\min\left(\frac{\partial\phi^-}{\partial x_i}, 0\right)\right\} & \text{se } \phi < 0, \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

calculando-se o módulo do gradiente da função distância por

$$|\nabla\phi|^2 = \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}. \quad (\text{A.8})$$

A função sinal é determinada por

$$\text{sgn}(\phi_0) \approx S(\phi_0) = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + \left(\left|\frac{\partial\phi}{\partial x_i} \frac{\partial\phi}{\partial x_i}\right|\right)^2 \Delta_c^2}}. \quad (\text{A.9})$$

O volume de fluido que respeita a conservação de massa V_{v0} é considerado como o volume de fluido calculado no tempo inicial de simulação $t = 0$. Caso exista algum volume sendo adicionado ou removido do domínio, este valor deve ser atualizado. O volume V_v será o calculado no tempo decorrente da simulação, e toma a forma

$$V_v = \sum (1 - I_{i,j,k}) \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (\text{A.10})$$

em que $I_{i,j,k}$ é a função Heaviside (eq. 3.27) aplicada a cada ponto do domínio.

B ONDAS DE STOKES E CAMADA ESPONJA

Neste apêndice são apresentadas o equacionamento para a imposição na condição de contorno dos três tipos de onda, além do equacionamento da camada esponja.

2.1 ONDAS DE STOKES I E STOKES II

Para se inserir ondas de Stokes I e II, na condição de contorno deve ser imposta uma condição de contorno do tipo Dirichlet com o seguinte equacionamento:

- caso $\phi \geq -16\Delta_c$ e se quer uma onda de Stokes I, então

$$u = \frac{H}{2} \omega \frac{\cosh(kz)}{\sinh(kh)} \cos(kx - \omega t) \tanh\left(\frac{t\pi}{T}\right) \tanh\left(\pi \frac{16\Delta_c + \phi}{6\Delta_c}\right), \quad (\text{B.1})$$

$$w = \frac{H}{2} \omega \frac{\sinh(kz)}{\sinh(kh)} \sin(kx - \omega t) \tanh\left(\frac{t\pi}{T}\right) \tanh\left(\pi \frac{16\Delta_c + \phi}{6\Delta_c}\right), \quad (\text{B.2})$$

- caso $\phi \geq -16\Delta_c$ e se quer uma onda de Stokes II, então

$$u = \left[\frac{H}{2} \omega \frac{\cosh(kz)}{\sinh(kh)} \cos(kx - \omega t) + \frac{3}{4} \frac{H^2 \omega k \cosh(2kz)}{4 \sinh^4(kh)} \cos(2kx - 2\omega t) \right] \tanh\left(\frac{t\pi}{T}\right) \tanh\left(\pi \frac{16\Delta_c + \phi}{6\Delta_c}\right), \quad (\text{B.3})$$

$$w = \left[\frac{H}{2} \omega \frac{\sinh(kz)}{\sinh(kh)} \sin(kx - \omega t) + \frac{3}{4} \frac{H^2 \omega k \sinh(2kz)}{4 \sinh^4(kh)} \sin(2kx - 2\omega t) \right] \tanh\left(\frac{t\pi}{T}\right) \tanh\left(\pi \frac{16\Delta_c + \phi}{6\Delta_c}\right), \quad (\text{B.4})$$

- para as outras condições, $u = w = 0$,

em que H é a altura da onda, h é a altura do escoamento, ω é a frequência angular, k é o número de onda e T é o período da onda. O penúltimo termo, $\tanh\left(\frac{t\pi}{T}\right)$, é inserido para que haja uma inserção suave da condição de contorno ao longo do primeiro semiperíodo de tempo. O último

termo irá criar uma condição suave entre o ar e a água. A velocidade na direção y é nula na condição de contorno e não é adicionada uma condição de contorno específica para função distância ϕ na presente metodologia.

Os parâmetros da onda são: $k = 2\pi/L$, $\omega = 2\pi/T$, $c = L/T$, $L_0 = gT^2/(2\pi)$ e $L = gT^2 \tanh(2\pi h/L) / (2\pi)$.

2.2 CAMADA ESPONJA

Para considerar saída livre das ondas do domínio se optou em utilizar uma camada esponja. A camada esponja dissipa a onda, para que a condição de saída livre consiga ser representada adequadamente e não ocorra a reflexão desta onda.

Park et al. (1993) [68] propuseram um equacionamento para representar a camada esponja, que foi adaptada para a metodologia aplicada no presente trabalho. Modificou-se o uso da camada esponja de modelos de rastreamento de interface para modelos de captura de interface, para que seja considerada a atenuação das velocidades tanto no ar quanto na água. A dissipação é calculada com o auxílio da condição

$$\xi_{i,j,k} = \begin{cases} \zeta \left(\frac{x_i - x_{esp}}{l_{esp}} \right)^2 \frac{z_k}{z_{sup:i,j,k}} & \text{se } \phi_{i,j,k} > 0, \\ \zeta \left(\frac{x_i - x_{esp}}{l_{esp}} \right)^2 \left(\frac{z_k - L_z}{z_{sup:i,j,k} - L_z} \right) & \text{se } \phi_{i,j,k} < 0, \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

em que ξ é o coeficiente dissipativo da camada esponja, ζ é a constante de amortecimento, x_{esp} é a posição inicial da camada esponja no domínio, l_{esp} é o comprimento da camada esponja e z_{sup} é a profundidade de água. O coeficiente dissipativo é adicionado ao lado esquerdo unicamente na equação de Navier-Stokes 3.35 da direção z , com o termo $\xi(w - w_a)$, em que w_a representa a velocidade alvo que se tem interesse a atingir, que no presente trabalho é 0.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Fundamentals of the kraken code. Technical Report UCIR-760, LLNL, 1974.
- [2] Cfx 5.6 basic solver capability theory. Technical report, Ansys Canada Ltda, 2003.
- [3] Openfoam, the open source cfd toolbox. User Guide Version 2.3.1, OpenFOAM Foundation, 2014.
- [4] BAYON, A., VALERO, D., GARCÍA-BARTUAL, R., VALLÉS-MORÁN, F. J., AND LÓPEZ-JIMÉNEZ, P. A. Performance assessment of openfoam and flow-3d in the numerical modeling of a low reynolds number hydraulic jump. *Environmental Modelling & Software* **80** (2016), 322–335.
- [5] BRIDSON, R. *Fluid Simulation for Computer Graphics*. A. K. Peters, Massachusetts, USA, 2008.
- [6] CASULLI, V. A semi-implicit finite difference method for non-hydrostatic, free-surface flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **30, n.4** (1999), 425–440.
- [7] CHOPP, D. L. Computing minimal surfaces via level set curvature flow. *J. Comp. Phys.* **106** (1993), 77–91.
- [8] CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation* **22**, 104 (1968), 745–762.
- [9] CHRISTENSEN, E. D., AND DEIGAARD, R. Large eddy simulation of breaking waves. *Coastal Engineering* **42**, 1 (2001), 53 – 86.
- [10] DA VINCI & VINCENT VAN GOGH, L. O dilúvio & a noite estrelada. Disponível em: <pt.wahooart.com. Acesso em:, Mar. 2018.

- [11] DAIRAY, T., LAMBALLAIS, E., LAIZET, S., AND VASSILICOS, J. C. Numerical dissipation vs. subgrid-scale modelling for large eddy simulation. *Journal of Computational Physics* 337 (2017), 252–274.
- [12] DAIRAY, T., AND VASSILICOS, J. Direct numerical simulation of a turbulent wake: the non-equilibrium dissipation law. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 62 (2016), 68–74.
- [13] DE JESUS, W. C., ROMA, A. M., PIVELLO, M. R., VILLAR, M. M., AND DA SILVEIRA-NETO, A. A 3d front-tracking approach for simulation of a two-phase fluid with insoluble surfactant. *Journal of Computational Physics* 281 (2015), 403–420.
- [14] DINGMAN, S. L. *Fluvial hydraulics*. Oxford University Press, 2009.
- [15] FERZIGER, J. H., AND PERIC, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [16] FRANCISCO, E. P., ESPATH, L. F. R., LAIZET, S., AND SILVESTRINI, J. H. Reynolds number and settling velocity influence for finite-release particle-laden gravity currents in a basin. *Computers & Geosciences* 110 (2018), 1–9.
- [17] FREMLIN, D. Skeletons and central sets. *Proceedings of the London Mathematical Society* 74, 3 (1997), 701–720.
- [18] FUJITA, M., KOIKE, O., AND YAMAGUCHI, Y. Direct simulation of drying colloidal suspension on substrate using immersed free surface model. *Journal of Computational Physics* 281 (2015), 421–448.
- [19] FUNKE, S. W., PAIN, C. C., KRAMER, S. C., AND PIGGOTT, M. D. A wetting and drying algorithm with a combined pressure/free-surface formulation for non-hydrostatic models. *Advances in Water Resources* 34 (2011), 1483–1495.
- [20] GARDE, R. J. *Turbulent Flow*. New Age Science, Kent, UK, 2010.
- [21] GENG, Y., AND WANG, Z. A coastal ocean model of semi-implicit finite volume unstructured grid. *China Ocean Eng.* 26-2 (2012), 277–290.

- [22] GIBOU, F., FEDKIW, R., AND OSHER, S. A review of level-set methods and some recent applications. *Journal of Computational Physics* (2018).
- [23] GOTTLIEB, S., AND SHU, C.-W. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Mathematics of computation of the American Mathematical Society* 67, 221 (1998), 73–85.
- [24] GRUNAU, D., CHEN, S., AND EGGERT, K. A lattice boltzmann model for multiphase fluid flows. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 5, 10 (1993), 2557–2562.
- [25] HAMZA, S. B., HABLI, S., SAÏD, N. M., BOURNOT, H., AND LE PALEC, G. Numerical simulation of wave-structure interaction around an obstacle. In *Design and Modeling of Mechanical Systems-II*. Springer, 2015, pp. 683–691.
- [26] HARLOW, F. H., AND WELCH, J. W. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The Physics of Fluids* 8-12 (1965), 2182–2189.
- [27] HARTEN, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of computational physics* 49, 3 (1983), 357–393.
- [28] HARTEN, A., ENGQUIST, B., OSHER, S., AND CHAKRAVARTHY, S. R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, iii. *Journal of computational physics* 71, 2 (1987), 231–303.
- [29] HE, X., CHEN, S., AND ZHANG, R. A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh–taylor instability. *Journal of Computational Physics* 152, 2 (1999), 642–663.
- [30] HIGUERA, P., LARA, J. L., AND LOSADA, I. J. Realistic wave generation and active wave absorption for navier–stokes models: Application to openfoam®. *Coastal Engineering* 71 (2013), 102–118.
- [31] HIRT, C. W., AND NICHOLS, B. D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics* 39 (1981), 201–225.
- [32] HIRT, C. W., AND NICHOLS, B. D. Flow-3d users manual. Technical report, 1988.

- [33] HUNT, J. C., WRAY, A. A., AND MOIN, P. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows.
- [34] JACQMIN, D. Calculation of two-phase navier–stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics* **155**, 1 (1999), 96–127.
- [35] JAHANBAKHS, E., PANAHI, R., AND SEIF, M. Numerical simulation of three-dimensional interfacial flows. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* **17**, 4 (2007), 384–404.
- [36] KANARSKA, Y., AND MADERICH, V. A non-hydrostatic numerical model for calculating free-surface stratified flows. *Ocean Dynamics* **53** (2003), 178–185.
- [37] KANG, M., FEDKIW, R. P., AND LIU, X. D. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing* **15** N.3 (2000), 323–360.
- [38] KANG, S., AND SOTIROPOULOS, F. Numerical modeling of 3d turbulent free surface flow in natural waterways. *Advances in Water Resources* **40** (2012), 23–36.
- [39] KRAVCHENKO, A., AND MOIN, P. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *Journal of Computational Physics* **131**, 2 (1997), 310–322.
- [40] LABEUR, R. J., AND PIETRZAK, J. D. A fully three dimensional unstructured grid non-hydrostatic finite element coastal model. *Ocean Modelling* **10** (2005), 51–67.
- [41] LAIZET, S., AND LAMBALLAIS, E. High-order compact schemes for incompressible flows: A simple and efficient method with quasi-spectral accuracy. *Journal of Computational Physics* **228**, 16 (2009), 5989–6015.
- [42] LAIZET, S., AND LI, N. Incompact3d: A powerful tool to tackle turbulence problems with up to o (105) computational cores. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **67**, 11 (2011), 1735–1757.

- [43] LAMBALLAIS, E., FORTUNÉ, V., AND LAIZET, S. Straightforward high-order numerical dissipation via the viscous term for direct and large eddy simulation. *Journal of Computational Physics* **230** (2011), 3270–3275.
- [44] LEE, J., SUH, J., AND SUNG, H. J. Direct numerical simulation of turbulent open channel flow with froude number effect. In *TSFP DIGITAL LIBRARY ONLINE* (2011), Begel House Inc.
- [45] LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolutions. *Journal of Computational Physics* **103** (1992), 16–42.
- [46] LERVÅG, K. Y., MÜLLER, B., AND MUNKEJORD, S. T. Calculation of the interface curvature and normal vector with the level-set method. *Computers & Fluids* **84** (2013), 218–230.
- [47] LI, N., AND LAIZET, S. 2decomp & fft—a highly scalable 2d decomposition library and fft interface. In *Cray User Group 2010 conference* (2010), pp. 1–13.
- [48] LIU, X.-D., OSHER, S., AND CHAN, T. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of computational physics* **115**, 1 (1994), 200–212.
- [49] LUCY, L. B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *The astronomical journal* **82** (1977), 1013–1024.
- [50] LUI, T. G., KHOO, B. C., AND XIE, W. F. Isentropic one-fluid modelling of unsteady cavitating flow. *Journal of Computational Physics* **201** (2004), 80–108.
- [51] MAHMOOD, M. S., HOKR, M., AND LUKAČ, M. Combined higher order finite volume and finite element scheme for double porosity and non-linear adsorption of transport problem in porous media. *Journal of computational and applied mathematics* **235**, 14 (2011), 4221–4236.
- [52] MANZELLO, S. L., AND YANG, J. C. An experimental study of a water droplet impinging on a liquid surface. *Experiments in fluids* **32**, 5 (2002), 580–589.
- [53] MARTIN, J., AND MOYCE, W. Part v. an experimental study of the collapse of fluid columns on a rigid horizontal plane, in a medium of lower, but comparable, density. *Philosophical*

- Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 244, 882 (1952), 325–334.
- [54] MAZA, M., LARA, J. L., AND LOSADA, I. J. Tsunami wave interaction with mangrove forests: A 3-d numerical approach. *Coastal Engineering* **98** (1997), 33–54.
- [55] McNAMARA, G. R., AND ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical review letters* 61, 20 (1988), 2332.
- [56] MIRZAI, I., AND PASSANDIDEH-FARD, M. Modeling free surface flows in presence of an arbitrary moving object. *International Journal of Multiphase Flow* **39** (2012), 216–226.
- [57] MOGHADAM, A. M., SHAFIEEFAR, M., AND PANAHI, R. Development of a high-order level set method: Compact conservative level set (ccls). *Computers & Fluids* 129 (2016), 79–90.
- [58] MORTAZAVI, M., LE CHENADEC, V., MOIN, P., AND MANI, A. Direct numerical simulation of a turbulent hydraulic jump: turbulence statistics and air entrainment. *Journal of Fluid Mech.* **797** (2016), 60–94.
- [59] MÖLLER, S. V., AND SILVESTRINI, J. H. *Turbulência: Fundamentos*. 2004.
- [60] NAGARAJAN, S., LELE, S. K., AND FERZIGER, J. H. A robust high-order compact method for large eddy simulation. *Journal of Computational Physics* 191, 2 (2003), 392–419.
- [61] NAMIN, M. M., LIN, B., AND FALCONER, R. A. An implicit numerical algorithm for solving non-hydrostatic free-surface flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **35** (2001), 341–356.
- [62] NEZU, I., AND NAKAGAWA, H. *Turbulence in Open Channel Flows*. IAHR Monographs. Taylor & Francis, 1993.
- [63] NOH, W. F., AND WOODWARD, P. Simple line interface calculation. In *Fifth International Conference on Fluid Dynamics* (Berlin, 1976), p. 11.
- [64] OLSSON, E., AND KREISS, G. A conservative level set method for two phase flow. *Journal of computational physics* 210, 1 (2005), 225–246.

- [65] OSHER, S., AND FEDKIW, R. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, vol. 153. Springer Science & Business Media, 2006.
- [66] OSHER, S., AND SETHIAN, J. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics* **79** (1988), 12–49.
- [67] PANTON, R. L. *Incompressible Flow*. John Wiley and Sons, Inc, New Jersey, USA, 2013.
- [68] PARK, J., ZHU, M., AND MIYATA, H. On the accuracy of numerical wave making techniques. *The Society of Naval Architects of Japan* **173** (1993), 35–44.
- [69] POPE, S. B. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [70] PRANAV, C., DOMINIQUE, H., LAIZET, S., ET AL. A comparative study of les models under location uncertainty for flow over a cylinder. *S31-Turbulence* (2017).
- [71] PUHALES, F. S., DEMARCO, G., MARTINS, L. G. N., ACEVEDO, O. C., DEGRAZIA, G. A., WELTER, G. S., COSTA, F. D., FISCH, G. F., AND AVELAR, A. C. Estimates of turbulent kinetic energy dissipation rate for a stratified flow in a wind tunnel. *Physica A* **431** (2015), 175–187.
- [72] REYNOLDS, O. On the dynamical theory of incompressible viscous flows and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **186** (1894), 123–161.
- [73] REZENDE, R. V., ALMEIDA, R. A., DE SOUZA, A. A. U., AND SOUZA, S. M. G. U. A two-fluid model with a tensor closure model approach for free surface flow simulations. *Chemical Engineering Science* **122** (2015), 596–613.
- [74] ROACHE, P. J. Code verification by the method of manufactured solutions. *Transactions-American Society of Mechanical Engineers Journal of Fluids Engineering* **124**, 1 (2002), 4–10.

- [75] ROMALI, N. S., YUSOP, Z., AND ISMAIL, A. Z. Application of hec-ras and arcgis for flood-plain mapping in segamat town, malaysia. *International Journal of GEOMATE* 14, 43 (2018), 125–131.
- [76] SABELNIKOV, V., OVSYANNIKOV, A. Y., AND GOROKHOVSKI, M. Modified level set equation and its numerical assessment. *Journal of Computational Physics* 278 (2014), 1–30.
- [77] SAINT-VENANT, M. Théorie du mouvement non permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leur lit. *Comptes Rendus* 73 (1871), 147–154.
- [78] SAUREL, R., AND ABGRAL, R. A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation. *Journal of Fluids Mechanics* 431 (2001), 239–271.
- [79] SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics* 31 (1999), 567–603.
- [80] SCHLICHTING, H., AND GERSTEN, K. *Boundary-layer theory*. Springer Science & Business Media, 2003.
- [81] SHAO, C., LUO, K., AND FAN, J. Detailed numerical simulation of unsteady drag coefficient of deformable droplet. *Chemical Engineering Journal* 308 (2017), 619–631.
- [82] SILVESTRINI, J. H. Simulação numérica direta e de grandes escalas de escoamentos transicionais e turbulentos. In *Coleção cadernos de turbulência: Turbulência, ABCM* (2003), vol. 2, pp. 1–81.
- [83] SON, G. A numerical method for bubble motion with phase change. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals* 39, 5 (2001), 509–523.
- [84] STROTOS, G., MALGARINOS, I., NIKOLOPOULOS, N., AND GAVAISES, M. Numerical investigation of aerodynamic droplet breakup in a high temperature gas environment. *Fuel* 181 (2016), 450–462.

- [85] SUN, T., SUN, J., ANG, X., LI, S., AND SU, X. A three-dimensional numerical study on dynamics behavior of a rising vapor bubble in uniformly superheated liquid by lattice boltzmann method. *International Journal of Heat and Fluid Flow* **62**, Pages = 362-374 (2016).
- [86] SUSSMAN, M., FATEMI, E., SMEREKA, P., AND OSHER, S. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids* **27** (1998), 663–680.
- [87] SUSSMAN, M., AND PUCKETT, E. G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics* **162**, 2 (2000), 301–337.
- [88] SUSSMAN, M., SMEREKA, P., AND OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Communications in Computational Physics* **114** (1994), 146–159.
- [89] TAKEWAKI, H., NISHIGUCHI, A., AND YABE, T. Cubic interpolated pseudo-particle method (cip) for solving hyperbolic-type equations. *Journal of Computational Physics* **61** (1985), 261–268.
- [90] TANGUY, S., MÉNARD, T., AND BERLEMONT, A. A level set method for vaporizing two-phase flows. *Journal of Computational Physics* **221**, 2 (2007), 837–853.
- [91] TENNEKES, H., AND LUMLEY, J. L. *A First Course in Turbulence*. MIT Press, Massachusetts, EUA, 1972.
- [92] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAUBER, W., HAN, J., NAS, S., AND JAN, Y.-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Communications in Computational Physics* **169** (2001), 708–759.
- [93] TRYGGVASON, G., SCARDOVELLI, R., AND ZALESKI, S. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. Cambridge University Press, New York, USA, 2011.
- [94] UNVERDI, S. O., AND TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics* **100** (1992), 25–37.

- [95] WANG, C., AND MITRA, A. K. Estimates of surface normal and curvature, reconstruction of continuum surface force model, and elimination of spurious currents. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 75, 5 (2014), 313–343.
- [96] WANG, K., JIN, S., AND LIU, G. Numerical modelling of free-surface flows with bottom and surface-layer pressure treatment. *Journal of Hydrodynamics* 21(3) (2009), 352–359.
- [97] WANG, T., HE, Y., TANG, T., AND ZHAO, Y. Numerical investigation on particle behavior in a bubbling fluidized bed with non-spherical particles using discrete hard sphere method. *Powder Technology* 301 (2016), 927–939.
- [98] WU, Z., LAURENCE, D., IACOVIDES, H., AND AFGAN, I. Direct simulation of conjugate heat transfer of jet in channel crossflow. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 110 (2017), 193–208.
- [99] XIE, Z., LIN, B., AND FALCONER, R. A. Turbulence characteristics in free-surface flow over two-dimensional dunes. *Journal of Hydro-environment Research* (2014), 1–10.
- [100] YOON, H. S., JEON, C. H., JUNG, J. H., KOO, B., CHOI, C., AND SHIN, S. C. Simulation of two-phase flow–body interaction problems using direct forcing/fictitious domain–level set method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 73, 3 (2013), 250–265.
- [101] YOUNGS, D. L. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Academic Press., New York, 1982, ch. Time dependent multimaterial flow with large fluid distortion, pp. 27–39.
- [102] YUE, W., LIN, C.-L., AND PATEL, V. C. Numerical simulation of unsteady multidimensional free surface motions by level set method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 42, 8 (2003), 853–884.
- [103] ZASPEL, P., AND GRIEBEL, M. Solving incompressible two-phase flows on multi-gpu clusters. *Computers & Fluids* 80 (2013), 356–364.

- [104] ZHANG, Y., LU, M., SHANG, W., XIA, Z., ZENG, L., AND LI, P. Numerical simulation of bubble free rise after sudden contraction using the front-tracking method. *International Journal of Photoenergy 2017* (2017).
- [105] ZHANG, Y., ZOU, Q., AND GREAVES, D. Numerical simulation of free-surface flow using the level-set method with global mass correction. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **63** (2010), 651–680.