

MÉTODO ESPECTRAL DA COLOCAÇÃO APLICADO PARA SIMULAR ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS E TURBULENTOS

Milton Biage

Faculdade de Engenharia Mecânica-FEMEC
Universidade Federal de Uberlândia-UFU
mbiage@mecanica.ufu.br

Paulo Lopes da Silva Junior

Faculdade de Engenharia Mecânica-FEMEC
Universidade Federal de Uberlândia
plopes@mecanica.ufu.br

Cassius Ricardo Nascimento Ferreira

Faculdade de Engenharia Mecânica-FEMEC
Universidade Federal de Uberlândia
Cassius@mecanica.ufu.br

Resumo: Este trabalho constituiu num estudo de desenvolvimento da técnica de elementos espectrais, no qual pretendeu verificar a eficiência da técnica para simular escoamentos compressíveis turbulentos. Para tanto, foram desenvolvidos estudos de simulação de escoamentos unidimensionais e bidimensionais, envolvendo a propagação de descontinuidades e flutuações de grandes escalas. Em particular, os estudos propostos permitiram verificar os níveis de dissipação e de precisão da técnica. Para tanto, escolheu-se simular escoamentos compressíveis unidimensionais sobre propagação de ondas quadradas e escoamentos em tubos de choques, como classicamente é realizado para calibrar o nível de dissipação de técnica numérica. Também, escolheu-se simular escoamentos de camadas de misturas bidimensionais, em desenvolvimentos espaciais e temporais. Este problema constitui um escoamento com comportamentos diferenciado ao longo do domínio, caracterizado por regiões múltiplas, onde se encontram regiões dominadas pelos efeitos hiperbólicos ou por efeitos elípticos, ou por uma mistura destes dois efeitos. A convergência monótona para uma solução na região hiperbólica exige altos níveis de dissipações numéricas, ocorrendo, assim, a necessidade da introdução de um fluxo numérico artificial. No caso da técnica espectral, utiliza-se filtro digital no tempo ou em frequência, com a vantagem, de que as frequências de cortes podem ser variadas de elementos para elementos. A técnica de elementos espectrais utilizada nessa formulação considera que as superfícies entre os elementos espectrais sejam conhecidas. Desenvolveu-se uma formulação completamente original para equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia para as interfaces entre os elementos que compõem o domínio. A importância desta formulação encontra-se no fato de permitir obter soluções para problemas com interfaces móveis e no fato de que as equações de conservação para a interface permitem a propagação de fenômenos descontínuos, como choques e ignições em escoamentos compressíveis, reativos ou não. Os resultados obtidos mostraram que a técnica da colocação de elementos espectrais mostrou-se bastante eficiente para simular escoamentos complexos, com presença de fortes descontinuidades e preservação de estruturas coerentes de grande escala, constituindo, assim, uma ferramenta bastante promissora para simular escoamento em dinâmica dos fluidos.

Palavras chaves. Método da colocação espectral, tubos de choque, propagação de ondas, camada de mistura temporal.

1 Introdução

Durante muito tempo os pesquisadores têm tentado simular com precisão alguns fenômenos complexos em escoamentos de fluidos, tais como: transição de escoamentos de laminares para turbulentos, turbulência em escoamentos compressíveis, escoamentos em geometrias irregulares, escoamentos com presença de choques, etc. Entre os vários segmentos de estudos que permitem melhorar a performance dos resultados, pode-se citar o desenvolvimento e/ou o aperfeiçoamento de técnicas de soluções analíticas e numéricas. Entretanto, à medida que se aumenta a complexidade do problema, o seu equacionamento matemático torna-se cada vez mais complicado, aumentando o grau de dificuldade de solução, mesmo se utilizar os computadores mais avançados existentes na atualidade. Portanto, desenvolver ferramentas matemáticas mais eficientes e mais precisas, tornando possível a solução de problemas complexos constitui um campo de pesquisa importante e amplo (Jameson, Schmidt and Turkel, 1981.).

Este trabalho constitui basicamente num estudo de desenvolvimento da técnica de elementos espectrais, no qual pretendeu verificar a eficiência da técnica para simular escoamentos compressíveis turbulentos. Para tanto, foram desenvolvidos estudos de simulação de escoamentos unidimensionais envolvendo a propagação de descontinuidades e captura de choques e de escoamentos bidimensionais, os quais permitem observar a evolução no tempo ou no espaço do

comportamento das flutuações de grandes e pequenas escalas. Em particular, os estudos propostos permitem verificar os níveis de dissipação e de precisão da técnica numérica. Para tanto, escolheu-se simular propagação de ondas quadradas e escoamentos compressíveis unidimensionais em tubos de choques, como classicamente é realizado para calibrar o nível de dissipação da técnica. Também, escolheu-se simular escoamentos de camadas de misturas bidimensionais, em desenvolvimentos espaciais e temporais. Estes escoamentos são dominados por vórtices de grandes escalas, os quais são submetidos aos mecanismos de emparelhamento e rotação e a um processo de coalescência, seguidamente comprovados nos estudos experimentais. Este problema constitui um escoamento com comportamentos diferenciados ao longo do domínio, caracterizados por regiões múltiplas, onde se encontram regiões dominadas pelos efeitos hiperbólicos ou por efeitos elípticos, ou por uma mistura destes dois efeitos. Geralmente, uma convergência monótona para uma solução na região hiperbólica exige altos níveis de dissipações numéricas, a fim de eliminar as imprecisões impostas pela técnica. Essas imprecisões crescem rapidamente em amplitudes, por falta de dissipação viscosa, o que exige a introdução de um fluxo numérico artificial. Portanto, considerando-se que estes escoamentos apresentam regiões múltiplas, com níveis de dissipação viscosas diferentes ao longo do domínio, níveis diferenciados de dissipação numérica devem ser introduzidos no escoamento (Sweby, 1984).

Uma importante vantagem do método de elementos espectrais da colocação é a facilidade de controle da dissipação numérica. Nessa técnica, a dissipação numérica é introduzida no escoamento por meio de filtros numéricos que permitem níveis diferenciados de filtragem, além de permitir filtragem localizadas (Canuto et al., 1988). A técnica de elementos espectrais da colocação detém todas as vantagens da técnica espectral da colocação clássica, contudo, ela apresenta uma característica adicional importante que constitui no fato de ser possível realizar refinamentos localizados da malha, possibilitando obter melhores resultados, em regiões de escoamentos com estruturas mais complexas. Entretanto, o fato mais importante da formulação apresentada neste estudo constitui o desenvolvimento de equações de conservação a serem aplicadas nas fronteiras dos elementos, as quais permitem descrever com precisão as mudanças bruscas de propriedades do fluido e do escoamento em regiões de descontinuidades, como encontradas em escoamentos reativos e em escoamentos compressíveis com a presença de choques.

A aplicação e a teoria dos métodos espectrais desenvolvidas até o momento têm sido direcionadas para soluções de problemas, cujo domínio é único. Recentemente, têm-se realizado estudos, a fim de tornar a técnica espectral viável para solução de problemas com geometria variável. A idéia básica tem sido aquela de subdividir o domínio em vários subdomínios. A subdivisão do domínio em subdomínios permite adequar o posicionamento dos pontos de colocação e com isso melhora a precisão da solução do problema. Além disso, a subdivisão do domínio em subdomínio, com já enfatizado, torna possível realizar refinamentos localizados da malha, possibilitando obter melhores resultados, em regiões de escoamentos com estruturas mais complexas. Nesse estudo, a subdivisão do domínio em subdomínio e localização de refinamento da malha constituiu o principal fator de inovação da técnica numérica implementada.

2. Discretização, utilizando expansões em Polinômios de Chebyshev

O método espectral da colocação constitui uma das aproximações mais simples dos métodos dos pesos residuais. Em todos os métodos dos pesos residuais utiliza-se um procedimento de integração no tempo ou no espaço, das equações diferenciais governantes do problema, multiplicadas por funções tentativa e testes. No caso do método espectral da colocação, utilizam-se vários tipos de funções tentativas e funções testes (Chebyshev, Legendre, Laguere, etc.). A única particularidade dessa técnica é que todas estas funções tentativas são funções ortogonais. Neste estudo, utilizam-se os polinômios ortogonais de Chebyshev para expansão em série das variáveis dependentes do problema, os quais apresentam a vantagem de serem facilmente implementados computacionalmente (Canuto et al., 1988). Esses polinômios, denominados de $\{T_k(x); k = 0, 1, \dots, \infty\}$, são auto-funções de um problema singular de Sturm-Liouville, onde k representa a ordem da série de expansão. Se k é par, então $[k/2] = k/2$ e se k é ímpar, $[k/2] = (k-1)/2$. Pode-se chegar a uma relação de recorrência para calcular $T_k(x)$, onde $T_{k+1} = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x)$.

A expansão de Chebyshev de uma função $f \in L_w^2(-1,1)$ (onde L_w^2 é o espaço complexo de Hilbert, definido pelas funções quadráticas integráveis), é feito por meio dos coeficientes de Chebyshev, \hat{f}_k . Em outras palavras, \hat{f}_k é a função f transformada para o espaço Chebyshev. Nessa técnica numérica interessa-se pelas séries discretas finitas de Chebyshev. A distribuição de pontos da quadratura de Gauss-Lobatto é a mais usada, devido ao erro de *aliasing*, advindos da interpolação assumir uma forma de distribuição muito simples, facilitando a sua eliminação (Canuto et al., 1989). Essa distribuição é representada por $x_j = \cos(\pi j/N)$, com $j = 1, 2, \dots, N$.

A função transformada discreta no espaço de Chebyshev para uma dada distribuição de pontos de quadratura de Gauss-Lobatt, na forma matricial, pode ser escrita pela seguinte fórmula simplificada (Fernandes, 1998):

$$\hat{f}_k = \sum_{j=0}^N C_{kj} f(x_j), \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

onde

$$C_{kj} = \frac{2}{N\bar{c}_j\bar{c}_k} \cos \frac{\pi jk}{N}, \quad \bar{c}_j = \begin{cases} 2 & ; j = 0, N \\ 1 & ; 1 \leq j \leq N-1 \end{cases} \quad \text{e} \quad \bar{c}_k = \begin{cases} 2 & \text{se } k = 0 \\ 1 & \text{se } k \geq 1 \end{cases} \quad (2,3)$$

A inversa da Eq. (1) permite obter a função f , escrita na forma matricial como segue:

$$f(x_k) = \sum_{j=0}^N (C^{-1})_{kj} \hat{f}_j \quad \text{e} \quad (C^{-1})_{kj} = \cos \frac{\pi jk}{N} \quad (4,5)$$

A derivada de uma função f expandida em série de polinômios de Chebyshev pode ser formalmente escrita como segue:

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{f}_k^{(1)} T_k(x_j), \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

onde $\hat{f}_k^{(1)}$ são os coeficientes de expansão da primeira derivada da função f no espaço Chebyshev, os quais podem ser obtidos através de operações matemáticas com os coeficientes de expansão \hat{f}_k , dados pela Eq. (1). Em outras palavras, $\hat{f}_k^{(1)}$ é a diferenciação de \hat{f}_k . Isso pode ser calculado pela seguinte expressão:

$$\hat{f}_k^{(1)} = \frac{2}{c_k} \sum_{\substack{p=k+1 \\ p+k \text{ impar}}}^{\infty} p \hat{f}_p \quad (7)$$

A Eq. (7) foi demonstrada por Fernandes (1998). Também pode-se demonstrar uma equação recursiva que permite obter $\hat{f}_k^{(1)}$, a partir de \hat{f}_k , usando as propriedades dos polinômios de Chebyshev. Esta relação na forma recursiva é escrita a seguir:

$$\hat{f}_k^{(1)} = (\hat{f}_{k+2}^{(1)} + 2(k+1)\hat{f}_{k+1}) / c_k, \quad \text{se } 0 \leq k \leq N-1 \quad \text{e} \quad \hat{f}_k^{(1)} = 0, \quad \text{se } k \geq N \quad (8)$$

A diferenciação de uma função pode ser obtida, usando-se tanto a Eq. (7) quanto a Eq. (8). Esses procedimentos constituem uma maneira eficiente de obter rapidamente as derivadas das funções, quando se utiliza um código de Transformada Rápida de Chebyshev (TRC). Neste algoritmo, realiza-se uma TRC direta, onde se obtém os coeficientes discretos da expansão em série de Chebyshev, \hat{f}_k , como caracterizado pela Eq. (1). Posteriormente, aplica-se a Eq. (7) ou a Eq. (8), obtendo-se, assim, os coeficientes discretos da expansão em série de Chebyshev da derivada da função f . Em seguida, aplica-se uma TRC inversa, obtendo-se a derivada da função f , no espaço físico. O algoritmo usado para calcular a TRC é baseado no algoritmo da FFT, neste caso, o número total de operações para obter-se tal resultado é da ordem de $(5 \log_2 N + 8 + 2q)N$ (Canuto *et al.*, 1988), onde q é a ordem da derivada.

As equações (1) e (4) são, respectivamente, as transformadas discretas de Chebyshev direta e inversa, para quaisquer pontos de colocação. Supondo-se que deseja computar a transformada de Chebyshev para dois conjuntos reais de dados f_j^1 e f_j^2 , então define-se a seguinte função complexa, g_j , por (Fernandes, 1998):

$$g_j = \begin{cases} f_j^1 + if_j^2 & ; j = 0, 1, \dots, N \\ g_{2N-j} & ; j = N+1, N+2, \dots, 2N-1 \end{cases} \quad (9)$$

O resultado da Eq. (9) é uma função complexa e periódica, com período em $2N$. Desta forma pode-se aplicar o algoritmo de FFT complexa sobre esse resultado e obter \hat{g}_j (os coeficientes complexos da g_j) no espaço Fourier (Fernandes, 1998). Os coeficientes das funções reais f_j^1 e f_j^2 , retornarão, respectivamente, na parte real e imaginária de \hat{g}_j . Para converter estes coeficientes do espaço Fourier para o espaço Chebyshev, aplica-se a seguinte equação:

$$\hat{G}_j = \frac{1}{Nc_j} \hat{g}_j \quad ; j = 0, 1, \dots, N \quad (10)$$

Assim, aplica-se a Eq. (7) ou (8) nas partes real e imaginária de \hat{G}_j separadamente e obtém-se os coeficientes $\hat{f}_j^{(1)1}$ e $\hat{f}_j^{(1)2}$ das derivadas de f_j^1 e f_j^2 . Em seguida aplica-se a FFT inversa, obtendo a G_j complexa no espaço físico, onde nas partes real e imaginária estão os valores reais das derivadas de f_j^1 e f_j^2 , respectivamente. Uma outra maneira de calcular as derivadas no Método da Colocação de Chebyshev é usando o método de multiplicação de matriz, baseado na técnica de interpolação de Lagrange (Canuto et al., 1989). Uma comparação entre a performance dessas duas técnicas de cálculo de derivadas, em termos de precisão e de velocidade de cálculo, foi efetuado por Fernandes (1998). O autor conclui que algoritmo da TRC, Eq. (10), mostrou ser a técnica mais rápida para o cálculo das derivadas no código computacional elaborado. Em termos de precisão, as duas técnicas são similares.

3. formulação matemática

3.1 Obtenção as equações locais instantâneas no volume de controle e na fronteira

Para que a técnica Espectral seja aplicada em um volume finito, torna-se necessário obter equações locais instantâneas, tanto para o volume de controle, como para a fronteira do volume. Isto é obtido, considerando-se um volume geométrico material ou não, cujo volume de controle é $v^*(t^*)$ e a interface entre os dois volumes é $A_1^*(t^*)$, que pode ser móvel ou não. O volume de controle é subdividido, respectivamente, em dois sub volumes $v_1^*(t^*)$ e $v_2^*(t^*)$, limitados pelas superfícies $A_1^*(t)$ e $A_2^*(t^*)$ (veja Fig. (1)).

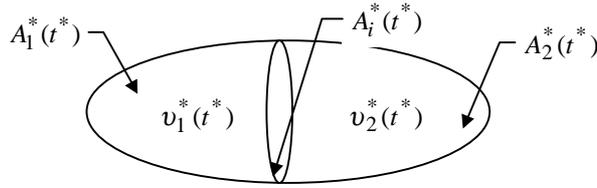


Figura 1. Procedimento de subdivisão do domínio $v^*(t^*)$ em subdomínios $v_1^*(t^*)$ e $v_2^*(t^*)$.

Aplicando-se o balanço integral de conservação de massa, do momento Linear, de energia e de entropia, obtém-se o seguinte balanço integral generalizado (Delhaye et al., 1981):

$$\sum_{k=1}^2 \frac{d}{dt^*} \int_{v_k^*(t^*)} \rho_k^* \psi_k^* d\vartheta_k^* = - \sum_{k=1}^2 \int_{A_k^*(t^*)} \rho_k^* \psi_k^* (\vec{V}_k^* \cdot \vec{n}_k) dA_k^* + \sum_{k=1}^2 \int_{v_k^*(t^*)} \rho_k^* \phi_k^* d\vartheta_k^* + \sum_{k=1}^2 \int_{A_k^*(t^*)} (\vec{n}_k^* \cdot \vec{J}_k^*) dA_k^* + \int_{A_i^*(t^*)} \phi_i^* dA^* \quad (11)$$

onde \vec{n}_k é o vetor unitário normal a área considerada, direcionado para fora, \vec{V}_k^* é o vetor velocidade no elemento, ρ_k^* é a densidade do fluido, A_k^* é a área que envolve o elemento k, v_k^* é o volume e A_i^* é a área adjacente aos elementos considerados (k representa o elemento considerado e o sobrescrito * representa variáveis dimensionais). Para cada lei de conservação, os valores de ψ_k^* , J_k^* , ϕ_k^* e ϕ_i^* são dados na tabela abaixo.

Tabela 1. Valores de ψ_k^* , J_k^* , ϕ_k^* e ϕ_i^* para cada lei de conservação.

Balanço	ψ_k^*	J_k^*	ϕ_k^*	ϕ_i^*
Massa	1	0	0	0
Momento Linear	\vec{V}_k^*	$-(T_{ij})_k^*$	\vec{F}_k^*	0
Energia total	$U_k^* + \vec{V}_k^* /2$	$\vec{q}_k^* - (T_{ij})_k^* \cdot \vec{V}_k^*$	$\vec{F}_k^* \cdot \vec{V}_k^*$	0
Entropia	S_k^*	$(1/\theta_k^*) \vec{J}_k^*$	$(1/\rho_k^*) \Delta_k^*$	Δ_i^*

onde \vec{V}_k^* é o vetor velocidade no volume k, S_k^* é a entropia por unidade de massa, Δ_k^* é a fonte local de entropia por unidade de volume, Δ_i^* é termo fonte de entropia local por unidade de área, θ_k^* é a temperatura absoluta, \vec{F}_k^* é o vetor

força de corpo, \vec{q}_k^* e $(T_{ij})_k^*$ são, respectivamente, o vetor fluxo de calor por unidade de área e o tensor tensão molecular, definidos como:

$$(T_{ij})_k^* = -p\delta_{ij} + (\tau_{ij})_k^*, \quad (\tau_{ij})_k^* = \mu^* \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} + \frac{\partial u_j^*}{\partial x_i^*} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k^*}{\partial x_k^*} \delta_{ij} \right) \quad \text{com } (i, j, k = 1, 2, 3) \text{ e } \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (12,13,14)$$

onde δ_{ij} é a função delta de Kronecker, $(\tau_{ij})_k^*$ representa o tensor tensão, μ^* é a viscosidade dinâmica, u_i^* , com $i = 1, 2, 3$ são as componentes do vetor velocidade no elemento considerado, nas direções x_i^* , com $i = 1, 2, 3$ representando as direções x^* , y^* e z^* . As demais variáveis existentes nas equações acima são o vetor fluxo de calor por unidade de área e o vetor força de corpo, definidos, respectivamente, pelas Eqs. (23) e (24):

$$\vec{q}_k^* = K^* \vec{\nabla} \theta_k^* \quad \text{e} \quad \vec{F}_k^* = \rho_k^* \vec{g}^* \quad (15,16)$$

onde K^* é o coeficiente de condutividade térmica do fluido e \vec{g}^* é a força gravitacional local.

Aplicando-se a regra de Leibnitz no primeiro termo do lado esquerdo da igualdade da Eq. (11) e o teorema de Gauss no primeiro e terceiro termo, também, do lado direito da igualdade da Eq. (11), obtêm-se as equações de conservação locais instantâneas aplicadas a cada volume e as condições de salto instantâneas nas interfaces entre os volumes, a quais são escritas, respectivamente, a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_k^* \psi_k^*) + (\vec{\nabla} \cdot \rho_k^* \psi_k^*) \vec{V}_k^* + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_k^* - \rho_k^* \phi_k^* = 0, \quad \sum_{k=1}^2 (\dot{m}_k^* \psi_k^* + J_k^* \cdot \vec{n}_k + \phi_i) = 0 \quad \text{e} \quad \dot{m}_k^* = \rho_k^* (\vec{V}_k^* - \vec{V}_A^*) \cdot \vec{n}_k \quad (17,17,19)$$

3.1. O vetor normal e velocidade de deslocamento da superfície do elemento.

Para as equações de interface é necessário conhecer o vetor normal à superfície do elemento que pode ser definido como segue:

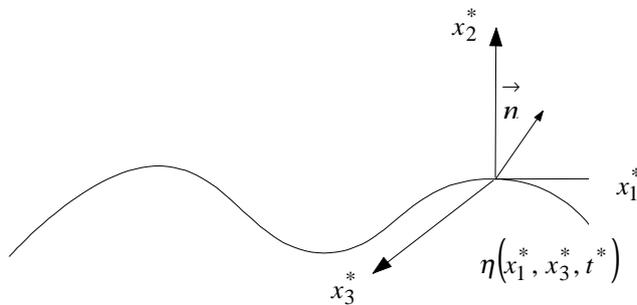


Figura 2. Posição do vetor normal \vec{n} na superfície η .

Na Fig. (2), \vec{n} é o vetor unitário normal à superfície do volume, x_i^* , com $i = 1, 2, 3$, representa um sistema de eixos que posiciona de tal forma que a coordenada x_2^* é sempre normal a superfície do volume considerada, $\eta(x_1^*, x_2^*, x_3^*, t^*)$ representa a interface entre os volume que pode assumir uma forma qualquer generalizado (Delhaye et al., 1981). Assim, a superfície do volume é definida como se segue:

$$f(x_1^*, x_2^*, x_3^*, t^*) = \eta(x_1^*, x_2^*, x_3^*, t^*) - x_2^* \quad (20)$$

O vetor unitário normal à Interface $f(x_1^*, x_2^*, x_3^*, t^*)$ é definido como $\vec{n} = \frac{\vec{\nabla} f}{|\vec{\nabla} f|}$. Assim, usando a Eq. (33), obtém-se:

se:

$$\vec{n} = \frac{\vec{\nabla}f}{|\vec{\nabla}f|} = \frac{1}{A} \frac{\partial \eta}{\partial x_1^*} \vec{i} - \frac{1}{A} \vec{j} + \frac{1}{A} \frac{\partial \eta}{\partial x_3^*} \vec{k} \quad \text{e} \quad A = |\vec{\nabla}f| = \left[\left(\frac{\partial \eta}{\partial x_1^*} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial x_3^*} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (21,22)$$

Considerando-se que o método proposto permite aplicá-lo para uma superfície de forma qualquer e móvel ao longo do tempo. Assim pode-se definir a velocidade da superfície como segue:

$$\vec{v}_A \cdot \vec{n} = \frac{\partial f / \partial t^*}{|\vec{\nabla}f|} \quad \text{e} \quad \vec{v}_A \cdot \vec{n} = \frac{\partial f / \partial t^*}{A} \quad (23,24)$$

onde \vec{v}_A é o vetor que representa a velocidade da superfície.

A técnica numérica utilizada para resolver o problema definido nesta formulação deverá considerar que a superfície η seja conhecida. A importância desta formulação encontra-se em dois fatores: (i) a formulação permite obter soluções para problemas com interfaces moveis, e (ii) as equações de conservação para a interface permitem a propagação de fenômenos descontínuos, como choques e ignições em escoamentos compressíveis, reativos ou não.

4. Aspectos Físicos dos problemas estudados

Quando se utiliza um esquema numérico para obter soluções de campos de escoamentos com descontinuidades bruscas nas propriedades (como ondas de choque presentes em um tubo de choque), os resultados discretos apresentam oscilações espúrias nos valores das propriedades, nas vizinhanças das descontinuidades, as quais são de origens provenientes de erros numéricos. Técnicas de eliminação destas oscilações espúrias têm sido pesquisadas ao longo de muitas décadas, principalmente, para serem aplicadas nos métodos de diferenças finitas e volumes finitas. Geralmente, um esquema numérico ideal deve satisfazer a condição de Minimização da Variação Total, TDV, *Total Variation Diminishing*, (Jameson, Schmidt e Turkel, 1981). Contudo, os esquemas numéricos que apresentam oscilações nas regiões próximas de descontinuidades não satisfazem a condição TDV.

Existe uma diferença clássica entre a concepção de um esquema TDV e o conceito de viscosidade artificial, largamente usada em esquemas numéricos, envolvendo as técnicas de diferenças finitas e de volumes finitos. Quando uma técnica numérica incorpora as características TDV, as oscilações induzidas por erros numéricos não ocorrem, devido a natural capacidade de prevenção da técnica. De forma contrária, os esquemas imbuídos de viscosidade artificial permitem que as oscilações induzidas por erros numéricos ocorram na solução, mas, a viscosidade artificial introduzida no esquema elimina parcialmente estas oscilações, exercendo a função de um filtro.

Por esses fatos, a simulação numérica de propagação de ondas quadradas, com fortes descontinuidades, descrita pela equação clássica da onda e estudos de simulação de escoamentos unidimensionais em tubos de choques constituem maneiras de qualificar o comportamento de técnicas numéricas, com relação à sua capacidade de dissipação das oscilações espúrias. O sucesso de uma técnica numérica para simular esses tipos de problemas, possivelmente, simulará com sucesso escoamentos compressíveis em presença de descontinuidades. Uma técnica numérica eficiente deve representar com precisão as propriedades do escoamento nos pontos de descontinuidades, sem excessivos alisamentos e totalmente livre de oscilações espúrias numéricas.

Outro problema típico que permite qualificar o comportamento de métodos numéricos é escoamento de camadas de mistura desenvolvendo-se espacialmente ou temporalmente. Uma completa revisão bibliográfica sobre camadas de mistura é apresentada em Fernandes (1998). Uma camada de mistura é caracterizada por uma região intensamente turbulenta, formada no limite entre dois escoamentos paralelos, com velocidades diferentes. A camada de mistura de um fluido newtoniano, não reativo e compressível, praticamente, é um dos escoamentos turbulentos mais simples. Contudo, este escoamento apresenta em sua estrutura um comportamento bastante complexo, possuindo todos os fenômenos característicos da turbulência. Os aspectos da camada de mistura dependem da condição inicial (estrutura do escoamento no estado inicial), da condição limite (geometria do escoamento), do número de Reynolds e do número de Mach. Contudo, o princípio de equilíbrio dinâmico sugere que a estrutura do escoamento na camada deveria progressivamente alcançar a independência da condição inicial. Entretanto, este fato não tem sido constatado com frequência nos estudos de simulação numérica de escoamentos de camadas de mistura, havendo significativa influência das condições iniciais.

A análise de instabilidade da camada de mistura desenvolvendo temporalmente é mais fácil de ser estudada em simulações numéricas. A evolução temporal da camada de mistura, também, pode ser simulada mais facilmente em altos números de Reynolds, envolvendo malhas mais compactas (dimensões menores do domínio), causando uma melhor resolução do que em simulação de escoamentos desenvolvendo espacialmente, assim, possibilitando o estudo de camada de misturas em computadores com menos recursos. Uma análise detalhada do comportamento de camadas de mistura desenvolvendo temporalmente pode conduzir a importantes conclusões, similares às existentes no caso da evolução da

camada de mistura desenvolvendo espacialmente. Assim, pode-se afirmar que a simulação deste tipo de escoamento é bastante apropriada para calibrar o comportamento de técnicas numéricas.

4.1. Aproximação numérica

No presente trabalho, as EDPs governantes dos problemas estudados, descritos pelas Eqs. (31) e (32), não serão apresentadas, portanto, qualquer detalhe sobre as formulações dos problemas sugere consultar Silva Jr. (1998). As EDPs governantes desses problemas foram discretizadas no espaço, utilizando-se a técnica de Elemento Espectral, usando os polinômio de Chebyshev aplicados sobre uma distribuição de pontos de quadratura de Gauss-Lobatto para cada elemento. Esta discretização pode ser feita de forma semi-implícita ou explícita. Nesse estudo, para a solução da Equação da Onda e a solução de um escoamento unidimensional em um tubo de choque foram aplicadas tanto à técnica semi-implícita, como a técnica explícita. Entretanto, nos cálculos envolvendo a solução de camada de mistura bidimensional foi utilizada somente a técnica explícita.

De uma forma geral, para resolver o sistema de equações e obter uma solução estacionária estável, separa-se completamente as discretizações no tempo e no espaço para cada elemento. Em seguida, resolve-se o problema para cada elemento no espaço, em um determinado tempo e posteriormente, calculam-se os campos resultantes para o domínio, unindo os campos para cada elemento, utilizando-se as equações de conservação para as interfaces entre os elementos que compõem o domínio, conforme descritas pelas Eq. (31).

Em ambos procedimentos utilizados (discretização semi-implícita e explícita), primeiro discretiza-se os termos espaciais por elemento, obtendo-se equações diferenciais ordinárias lineares (EDOL) aplicadas ao elemento, tendo como variável independente o tempo. Posteriormente, discretiza-se o sistema de EDOL resultante no tempo para o elemento. Assim, considerando as equações adimensionais de conservação, na forma vetorial, pode-se escrever o seguinte sistema EDOL, cuja variáveis encontram-se na forma adimensional (Cockburn e Shu, 1989):

$$\frac{\partial U}{\partial t} = P(U_e), \quad \text{com} \quad P(U_e) = -\frac{L_x^*}{(\Delta_x^*)_e} \frac{\partial E}{\partial x} - \frac{L_y^*}{(\Delta_y^*)_e} \frac{\partial F}{\partial y} - \frac{L_z^*}{(\Delta_z^*)_e} \frac{\partial G}{\partial z} \quad (25, 26)$$

onde $P(U_e)$ representa uma matriz obtida pelos cálculos discretos dos termos lado direito da Eq. (34), utilizando-se a técnica dos elementos espectrais da colocação, $2L_x^*$, $2L_y^*$ e $2L_z^*$ são as dimensões do domínio nas direções x, y e z, respectivamente. Da mesma forma, $2(\Delta_x^*)_e$, $2(\Delta_y^*)_e$ e $2(\Delta_z^*)_e$ são as dimensões dos elementos que compõem o domínio nas direções x, y e z, respectivamente e os termos E, F e G são os termos fluxos, envolvendo tanto os termos convectivos como os termos dissipativos, respectivamente, nas direções x, y e z.

A solução da Eq. (35) é obtida, aplicando-se o método explícito de Runge-Kutta de ordem 5 (cinco), proposto por Jameson, Schmidt e Turkel (1981), onde a discretização no tempo é obtida por passo de tempo dividido em estágios.

5. Resultados, análise e conclusão

A técnica numérica empregada neste estudo foi o Método Espectral da Colocação aplicado para cada Elemento, que se caracteriza na expansão em séries discretas das derivadas espaciais de primeira e segunda ordem, utilizando-se os polinômios ortogonais de Chebyshev. Estes polinômios apresentam as vantagens de não exigir periodicidade nas condições limites (como no caso de expansões utilizando as séries de Fourier), responder bem a descontinuidades e de ser fáceis de serem implementados computacionalmente.

Simulações numéricas obtidas, utilizando somente termo dissipativo molecular, sem a introdução dos termos dissipativos turbulentos, são chamadas de simulações numéricas diretas. Nas simulações numéricas diretas, a escala de corte, representada por uma escala de corte do filtro característico da malha, deve igualar-se a escala dissipação bidimensional [Arpaci e Larsen, 1984]. Este fato induz que uma simulação direta, devido a limitações computacional, só é possível quando se utiliza pequeno número de Reynolds, pois a escala de dissipação viscosa diminui quando o número de Reynolds aumenta.

Devido a esta limitação imposta pela escala de dissipação viscosa, realizou-se neste estudo simulações de grandes escalas em altos números de Reynolds, sem utilizar uma parametrização para a escala de submalha, ou um modelo de turbulência. Contudo, de forma semelhante ao utilizado em Fernandes (1998), utilizou-se um filtro para estabilizar o código numérico. As filtragens ou alisamentos visaram eliminar os pequenos comprimentos de onda, constituídos tanto pelas pequenas escalas representativas de fenômenos físicos, quanto os ruídos introduzidos por erros numéricos.

Mesmo em simulações de grandes escalas, torna-se necessário utilizar uma malha de cálculo bem refinada, para que sejam minimizados os efeitos de se desprezar as tensões turbulentas. Para tanto, as malhas dos domínios computacionais utilizados nas simulações, tanto em escoamentos unidimensionais como em bidimensionais, são obtidas, fixando-se um determinado número de pontos por cada elemento, N_p , distribuídos de forma conveniente, seguindo a técnica da colocação de Chebyshev-Gauss-Lobatto. Neste trabalho, o número de pontos, N_p , foi fixado constante para todos elementos, e no caso de simulação de escoamentos bidimensionais, N_p foi mantido o mesmo para ambas direções; isto

é, para x e y , respectivamente. Contudo, o código computacional permite fixar número de elementos distintos para as direções x e y , respectivamente, denominados de Ne_x e Ne_y , e dimensões diferenciadas para cada elemento, permitindo refinar a malha em pontos estratégicos do escoamento (Fernandes, 1998).

Assumiu-se que as variáveis dependentes são conhecidas em cada ponto da malha, através da condição inicial, assim, um sistema de equações diferenciais ordinais é obtido separadamente para cada ponto. Os fluxos E e F , contidos na Eq. (39), envolvendo os termos convectivos e difusivos nas direções x e y , respectivamente, foram aproximados para cada ponto de colocação, utilizando-se as propriedades no tempo $(t-1)$, ou seja, no tempo anterior. As estimativas numéricas dos fluxos E e F , portanto, necessitam de uma aproximação da primeira derivada parcial da velocidade e temperatura para avaliar as componentes do tensor tensão e fluxo de calor. Usou-se a técnica de TRC (Transformada Rápida de Chebyshev) para determinar as derivadas. Este procedimento constitui uma maneira precisa e rápida de obter as derivadas de primeira ordem. Da mesma forma, usou-se este procedimento para calcular as derivadas dos fluxos E e F .

Os resultados a serem apresentados são os referentes às simulações unidimensionais, envolvendo a simulação da Equação da Onda e escoamentos em tubos de choques fechados. Nesta primeira etapa do estudo, pretendeu-se levantar informações do potencial da técnica para simular descontinuidades e propagação de fenômenos envolvendo efeitos não-lineares, os quais são característicos de escoamentos compressíveis em alto número de Mach e em escoamentos reativos. Num segundo estágio foi realizada uma análise qualitativa dos resultados referentes às simulações de camadas de mistura temporal para vários números de Reynolds, contudo, nesse artigo apresentou-se somente um resultado ilustrativo sobre camada de mistura em desenvolvimento temporal, devido a limitação de espaço.

5.1. Simulações Unidimensionais: Equação da Onda e Escoamento em Tubo de Choque

A Equação da Onda representa um problema invíscido que caracteriza a convecção de ondas, bastante utilizada para verificar o comportamento de uma técnica numérica. Esta equação segue a lei de conservação hiperbólica, a qual serve de modelo para verificar a propagação de descontinuidades de contatos. Da mesma forma, a formulação de Euler para um tubo de choque unidimensional caracteriza uma típica formulação invíscida. No caso específico de tubos de choques unidimensionais, a formulação invíscida de Euler pode representar com significativa precisão certos fenômenos, como onda de choque, ondas de expansão e superfície de contato. Esses dois modelos servirão de base para verificar a precisão da técnica para simular descontinuidades e fenômenos de propagação, assim como, verificar a velocidade de cálculo do código numérico utilizado, em função do número de elementos, do número de pontos por elementos, e a influência do incremento de tempo sobre os níveis de flutuações espúrias introduzidas na solução. Também se pretende verificar a relação de velocidade e de precisão, entre as formulações implícitas e explícitas, caracterizando as vantagens e desvantagens de cada uma delas. Adicionalmente, pretendeu-se verificar a viabilidade de implementação das formulações implícitas e explícitas, na simulação de escoamentos complexos.

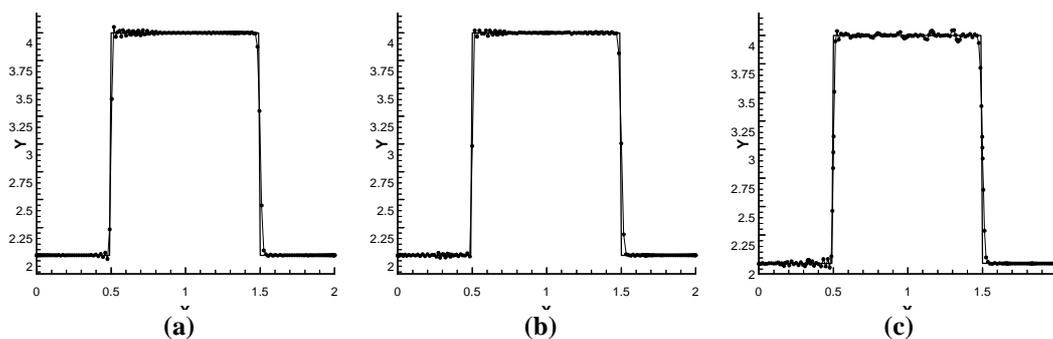
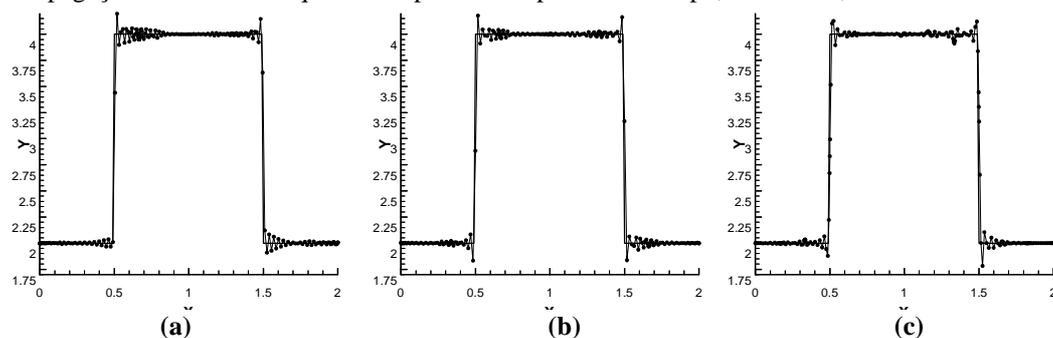


Figura 3. Propagação de uma onda quadrada após 15000 passos de tempo, com $\Delta t=0,0001$ e um total de 193 pontos



(técnica implícita). (a) $Ne_x=3$ e $Np=65$; (b) $Ne_x=6$ e $Np=33$ e (c) $Ne_x=12$ e $Np=17$.

Figura 4. Propagação de uma onda quadrada após 15000 passos de tempo, com $\Delta t=0,0001$ e um total de 193 pontos (técnica explícita). (a) $Ne_x=3$ e $Np=65$; (b) $Ne_x=6$ e $Np=33$ e (c) $Ne_x=12$ e $Np=17$.

A Fig. (3) mostra a propagação de uma onda quadrada para três combinações de número de elementos e número de pontos por elemento, utilizando-se a formulação implícita. A Fig. (4) mostra a propagação de uma onda quadrada para várias combinações de número de elementos e número de pontos por elemento, mas utilizando a formulação explícita. As condições de cálculo para essas duas figuras foram exatamente às mesmas. As soluções foram obtidas, sem utilizar qualquer processo de filtragem. O tempo total de processamento foi de 1,5 segundos. Observa-se nas Figs. (3) e (4) que os níveis de oscilações espúrias numéricas presentes nos resultados, obtidos com a formulação implícita, são insignificantes, e as soluções ajustam de forma satisfatória às descontinuidades, independente do número de pontos por elementos e do número de elementos. Mas, o aumento do número de elementos e diminuição do número de pontos por elementos, mantendo o número total de pontos constantes, não afeta de forma perceptível às descrições das descontinuidades e os níveis de ruídos numéricos presentes nas soluções. Um fator explorado no estudo, contudo, não foram incluídas figuras ilustrativas, e que se manifesta de forma nítida sobre a precisão dos resultados é o incremento de tempo. Observou-se que para baixo incremento de tempo, as descontinuidades são representadas com significativa precisão, contudo o nível de ruído numérico aumenta, sem, entretanto, descaracterizar a precisão dos resultados. Para maiores incrementos de tempo, as soluções sofrem um maior alisamento, introduzindo nos resultados uma maior perda de precisão nas descrições das descontinuidades. Ainda, se comparar as Figs. (3) e (4), obtidas para os mesmos parâmetros, diferenciando somente no procedimento de cálculo (implícito e explícito), constata-se que o nível de oscilações espúrias devido às imprecisões numéricas é mais significativo nos resultados obtidos com a formulação explícita que nos resultados obtidos nas simulações implícitas.

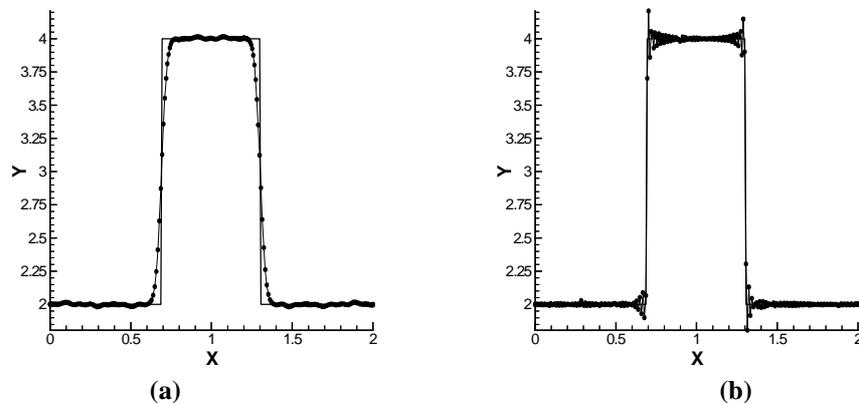


Figura 5. Propagação de uma onda quadrada, 80000 passos de tempo e $\Delta t=0,0001$ (um total de 193 pontos, $N_{e_x}=3$ e $N_p=65$). (a) Formulação Implícita; (b) Formulação Explícita.

A Fig. (5) mostra a propagação de uma onda quadrada, com 80.000 passos de tempo e $\Delta t=0,0001$, o que corresponde a um tempo total de 8 segundos, utilizando-se um total de 193 pontos, $N_{e_x}=3$ e $N_p=65$. A Fig. (5.a) representa os resultados obtidos pela formulação implícita e a Fig. (5.b) representa os resultados obtidos pela formulação explícita. A melhor situação para simular a propagação de uma onda constituiu em utilizar um maior número de elementos possível e um número de pontos mínimo por elementos. Entretanto, objetivo dos resultados apresentados na Fig. (5) foi o de simular a propagação de uma onda quadrada por um longo período, a fim de verificar a preservação da integridade da onda. Por isto, procurou-se simular a propagação da onda, na situação mais adversa possível, o que constitui em utilizar um pequeno número de elementos e um grande número de pontos por elementos. Observa-se sobre os resultados apresentados na Fig. (5.a), que mesmo para um longo período de simulação, a onda quadrada é descrita com relativa precisão, apresentado um pequeno alisamento nos pontos de descontinuidades, e sem qualquer nível significativo de ruído numérico. Resultados bem melhores poderão ser obtidos, diminuindo consideravelmente o alisamento nas descontinuidades, se utilizado maior número de elementos e um número mínimo de pontos por elementos, mantendo o número total de pontos. Observa-se na Fig. (5.b) que a solução explícita representa com grande precisão as descontinuidades (mesmo utilizando um pequeno número de elementos e um grande número de pontos por elementos), contudo, o nível de ruído numérico é muito mais intenso que para o caso implícito, não sendo, entretanto, um fator crítico quando se simula modelos lineares, como é o caso da simulação da Equação da Onda neste estudo.

Considerando os fatos evidenciados pelas soluções, usando as formulações implícitas e explícitas mostram que existem importantes diferenças entre estas aproximações. Na aproximação explícita, para que a técnica seja totalmente estável, é necessário estabelecer uma relação entre o incremento de tempo e o incremento de pontos na malha. A estabilidade da técnica é relacionada com este fato, contudo, neste estudo não foi realizado este tipo análise, o que será feito em estudos posteriores. Em alguns casos, esta relação entre o incremento de tempo e o incremento da malha exige incrementos de tempo excessivamente pequenos, de forma que a velocidade de processamento do código torna muito lenta. Com relação a técnica implícita a instabilidade da solução é mantida com muito mais facilidade e mesmo utilizando grandes incrementos de tempo é possível, com esta aproximação seguir com precisão soluções transientes, mas, a medida que o passo de tempo aumenta ocorre uma perda de precisão. Normalmente, a solução implícita é menos precisa que a solução explícita [Anderson, 1995]. Considerando, assim, estes fatos, pode-se concluir que a estabilidade

da técnica aplicada encontra-se relacionada, principalmente, com o número de elementos do que com o número de pontos total.

Em conclusão pode-se dizer que existem dois importantes aspectos apresentados pelo método de elementos espectrais da colocação na solução deste problema, usando a técnica explícita. Primeiro, oscilações espúrias devido a imprecisões numéricas aparecem próximas das descontinuidades e segundo, a solução explícita obtida pelo método de elementos espectrais ilustra de forma evidente que a onda quadrada foi transportada com uma velocidade perfeitamente correta, mesmo depois de transcorrido um tempo excessivamente grande. A combinação destes dois fatos, com características contraditórias, serve como uma evidência de que as informações físicas são contidas nas oscilações de mais altas ordens e que os esquemas de ordem superior retêm mais informação que os esquemas de baixa ordem.

Por outro lado, as soluções implícitas deste problema, usando a técnica de elementos espectrais, mostram que nenhum tipo de oscilações espúrias significativas apareceu nestes problemas, contudo, um pequeno alisamento ocorre próxima das descontinuidades. Portanto, na aproximação implícita, o ajustamento de um maior número de elementos e de um menor incremento de tempo pode trazer significativas melhorias no comportamento da técnica, e na aproximação explícita, uso de filtros com um adequado sensor pode eliminar os efeitos de oscilações espúrias e melhorar sensivelmente o comportamento da técnica.

5.2. Escoamentos em Tubos de Choque

A propagação de uma onda utilizada para qualificar a técnica numérica constitui um problema escalar linear, para a qual verificou-se que a técnica de elementos espectrais funcionou satisfatoriamente, se considerar a capacidade da técnica de preservar a propagação de descontinuidades e a inserção de ruídos numéricos nos resultados. Continuando esse processo de qualificação da técnica de elementos espectrais serão apresentados alguns resultados envolvendo formulação de Euler, para um tubo de choque fechado unidimensional, o qual constitui um modelo não-linear que permite verificar as influências da não linearidade sobre os resultados obtidos, tanto em simulações implícitas, como em simulações explícitas.

Os resultados obtidos com as aproximações implícitas e explícitas tiveram as mesmas condições iniciais fixadas para o problema; isto é, o campo de velocidade inicial igual a zero, o campo de pressão adimensional inicial igual a 1,0 para a seção de alta pressão e 0,1 para a seção de baixa pressão, o campo de densidade adimensional inicial igual a 1,0 para seção de alta pressão e 0,1 para seção de baixa pressão. Os campos de temperatura e de energia foram calculados pela equação de estado.

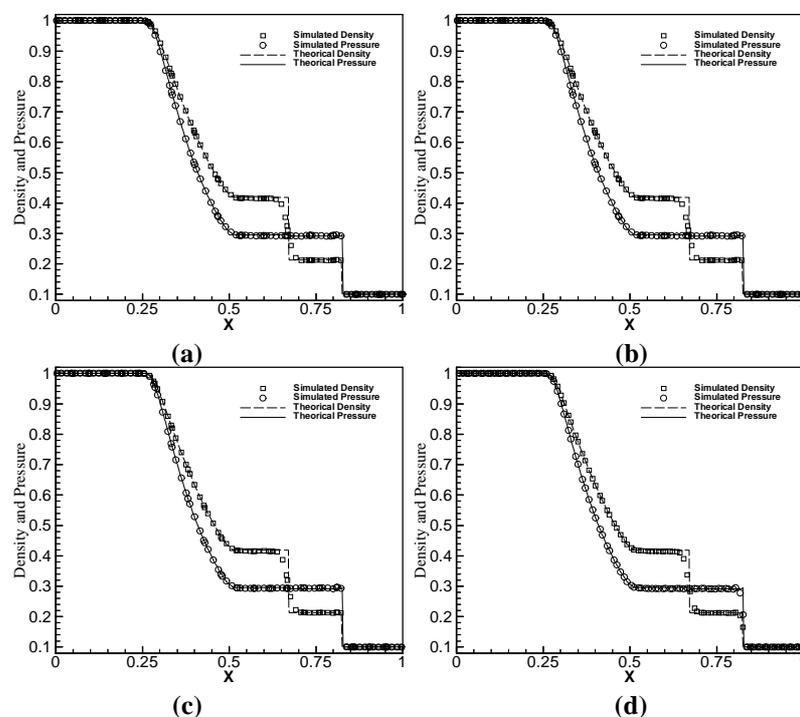


Figura 6. Distribuição dos campos de densidade e pressão para um escoamento unidimensional em um tubo de choque fechado, utilizando a técnica implícita, com um total de 496 pontos (100.000 passos de tempo e $\Delta t=1 \times 10^{-5}$). (a) $Ne_x=15$ e $Np=34$, (b) $Ne_x=21$ e $Np=24$, (c) $Ne_x=33$ e $Np=16$, (d) $Ne_x=55$ e $Np=10$.

Diferentemente dos resultados apresentados para as simulações da Equação da Onda, a qual constitui um modelo linear, seguindo a lei hiperbólica, onde nenhum processo de filtragem foi realizado, na simulação de um escoamento unidimensional invíscido em um tubo de choque fechado foi utilizado processos de filtragens, tanto para a aproximação implícita, quanto para a aproximação explícita. Contudo, devido a crescimento mais acentuado das oscilações espúrias nas soluções envolvendo as aproximações explícitas, devidas a erros numéricos, a filtragem foi mais intensa.

O objetivo desse estudo foi o de verificar a precisão da técnica para simular escoamentos em modelos não-lineares, envolvendo a presença de descontinuidades e verificar as relações de velocidade de processamento utilizadas pelas aproximações implícita e explícita. Com relação às velocidades de processamento pode-se comentar que os resultados obtidos, contudo, não apresentados, permitiram concluir que a velocidade de processamento decai exponencialmente, quando é aumentado o número de elementos e diminuído o número de pontos por elementos, mantendo-se constante o número total de pontos. Os tempos de processamento consumidos em problemas similares são bem menores na solução explícita do que na solução implícita. Estes resultados foram obtidos na mesma máquina, numa “workstation” digital DEC300. Contudo, a evolução de decréscimo do tempo de processamento em função do número de elementos para as simulações explícita segue o mesmo comportamento daquela correspondente à solução implícita.

A Fig. (6) mostra a distribuição dos campos de densidade e pressão, para um escoamento unidimensional em um tubo de choque fechado, utilizando-se a técnica explícita, com um total de 496 pontos (100.000 passos de tempo e $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$). Observa-se nessa figura que a técnica explícita representa com grande precisão as descontinuidades, sem amortecimentos significativos. Observa-se também nessa figura que a introdução de um maior número de elementos, conseqüentemente, diminuindo o número de pontos por elementos não causa significativas melhorias na qualidade dos resultados, sendo, portanto, o ganho de velocidade de processamento o fator consideravelmente influenciado quando se aumenta o número de elementos. Esta técnica, com certeza será de extrema eficiência em códigos elaborados para processamento paralelo. Conclui-se que o número de elementos nesta técnica exerce um efeito estabilizador da solução, inibindo a formação de flutuações espúrias, com isso, exigindo menos filtragem ao longo dos cálculos. A qualidade apresentada nas soluções utilizando a aproximação implícita não mostrou significativas diferenças com relação às soluções utilizando a aproximação implícita.

5.3. Escoamentos em camada de mistura em desenvolvimento temporal

Os resultados referentes às simulações de camada de mistura temporal estão representados nas Figs. (7) e (8), os quais foram simulados em um domínio computacional suficientemente grande de forma a permitir quatro emparelhamentos completos ($m_x=8$ e $m_y=4$). A Fig. (9) ilustra o campo de energia interna de uma camada de mistura em desenvolvimento temporal, com número de Reynolds $Re_\infty = 1007$, com uma taxa de velocidade, $\eta_v = U^*/\bar{U}^* = \infty$, uma taxa de temperatura, $\eta_T = \theta^*/\bar{\theta}^* = 0,2$, um número de Mach, $M_\infty = 0,26$ e um número de Prandtl, $Pr_\infty = 0,72$. Essa figura ilustra uma clara evidência de estruturas de grandes escalas. Em cada tomada de tempo constata-se uma forte coerência dos vórtices, os quais estão regularmente distribuídos no espaço, caracterizando que os vórtices nos diferentes campos estão perfeitamente acoplados. Esta simulação foi executada sob as seguintes condições: na parte superior contém um fluido (no caso o ar) deslocando com uma velocidade de $U_1^* = 100 \text{ m/s}$ e na parte inferior um fluido (também ar) deslocando com uma velocidade de $U_2^* = -100 \text{ m/s}$, gerando um perfil inflexional. Também foi imposto neste escoamento um efeito de estratificação, estando o fluido da parte superior a uma temperatura de $300K$ e o fluido da parte inferior em uma temperatura de $350K$.

Na Fig. (7) observa-se a evolução da estrutura da camada de mistura temporal. Essa estrutura inicia-se pela formação de vórtices de Kelvin-Helmholtz. Contudo, a partir desta estrutura inicial, os vórtices fundamentais evoluem através dos mecanismos de emparelhamento e de rotação que possibilita o crescimento da região de mistura, devido ao processo de coalescência dos vórtices emparelhados.

Na seqüência de quadros dispostos nas Fig. (7), observa-se de forma evidente um processo natural de penetração de fluidos nas duas camadas, induzidos pelo evolução de estruturas iniciadas por pequenas instabilidades, conforme descrito em estudos experimentais existente na literatura (por exemplo, Brown e Roshko (1974)). O processo de emparelhamentos ocorre inicialmente entre os vórtices adjacentes e, simultaneamente, ocorre o processo de rotação. Contudo, os mecanismos de emparelhamento e rotação podem ocorrer defasados entre os pares de vórtices distintos. Este aspecto da camada de mistura está muita bem evidenciada na Fig. (7). Quando este mecanismo de rotação completa o seu ciclo, ocorre a coalescência entre os vórtices emparelhados, passando os vórtices resultantes a ter um comprimento de onda de $2\lambda_a$, sendo também, o espaçamento entre os vórtices resultantes, igual a $2\lambda_a$, onde λ_a é o comprimento de onda fundamental. Os novos vórtices resultantes, os quais reduziram à metade, inicia-se, também, novos ciclos de emparelhamentos e rotação entre os vórtices adjacentes, colidindo com a coalescência dos pares de vórtices envolvidos neste processo. As estruturas resultantes passa a ter um comprimento de onda de $4\lambda_a$, sendo também, o espaçamento entre os vórtices resultantes, igual a $4\lambda_a$. Esta seqüência de processo repete-se até que a estrutura da camada de mistura reduz a um único vórtice. Este vórtice resultante continua a crescer até sofrer interferências dos limites do domínio, pois o escoamento médio injeta continuamente energia nos vórtices. A Fig. (8) ilustra o campo de velocidade transversal em

dois tempos diferentes para uma camada de mistura temporal, para as mesmas condições de escoamento que para a figura anterior. Essa figura ilustra de forma evidente as características das estruturas coerentes para dois tempos de evoluções diferentes, conforme já caracterizado pela Fig. (7).

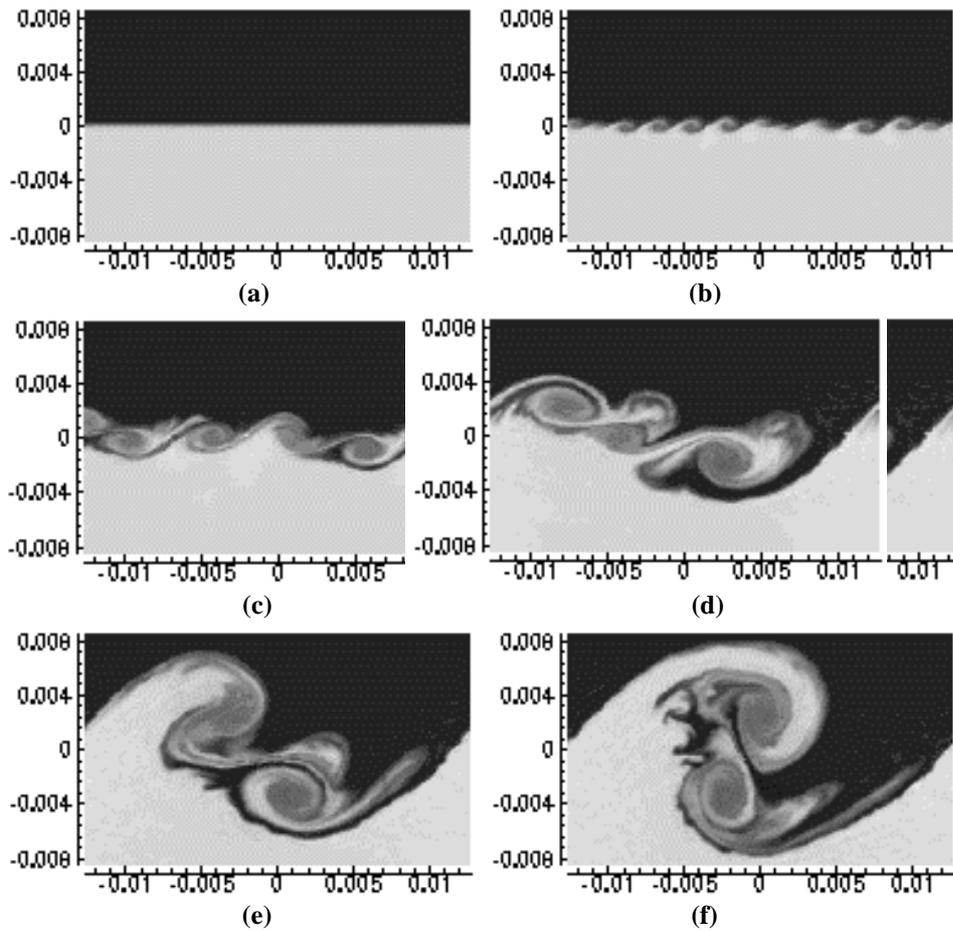


Figura 7. Evolução do campo de energia interna em camada de mistura temporal. ($Re_\infty = 1007$, $M_\infty = 0,26$, $Pr_\infty = 0,72$, $\eta_v = \infty$ e $\eta_T = 0,2$). (a) $t^* = 0,6389 \times 10^{-2}$ sec.; (b) $t^* = 1,277 \times 10^{-2}$ sec.; (c) $t^* = 2,549 \times 10^{-2}$ sec.; (d) $t^* = 3,827 \times 10^{-2}$ sec.; (e) $t^* = 4,466 \times 10^{-2}$ sec.; (f) $t^* = 5,088 \times 10^{-2}$ sec.

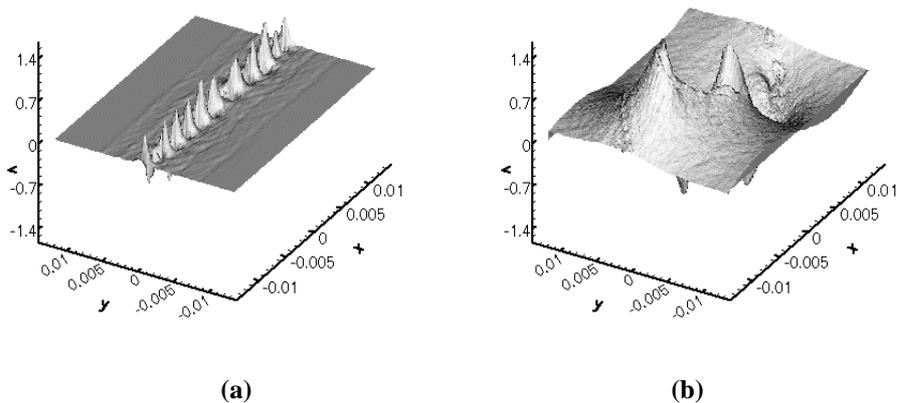


Figura 8. Distribuição espacial do campo de velocidade transversal em dois tempos diferentes, para uma camada de mistura temporal. ($Re_\infty = 1007$, $M_\infty = 0,26$ e $Pr_\infty = 0,72$, $\eta_v = \infty$ e $\eta_T = 0,2$). (a) $t^* = 0,6389 \times 10^{-2}$ sec.; (g) $t^* = 4,466 \times 10^{-2}$ sec.

6. Referências Bibliográficas

- Anderson, J. D. R., 1995, "Computational Fluid Dynamics", McGraw-Hill, New-York.
 Arpaci, S. V., Larsen, S. P., 1984, "Convection Heat Transfer", Prentice Hall, Inc, Englewood Cliffs, New Jersey.

- Cockburn, B. and Shu, C. W., 1989, "TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin Finit Element Method for Conservation Laws II: General Framework", Math. Comp., 52, No. 186, pp. 411-435.
- Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A. and Zang, T. A., 1998, "Spectral methods in fluid dynamics", Springer-Verlag, New York.
- Delhaye, J. M., Giot, M. and Riethmuller, M. L., 1981, "Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering", McGraw-Hill Book Company, London.
- Fernandes, M. S., 1998, "Simulação Numérica de Camadas de Mistura em Desenvolvimento Temporal e Espacial, Usando a Técnica Espectral da Colocação", Tese de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil.
- Jameson, A., Schmidt, H. and Turkel, E., 1981, "Numerical Solution of the Euler Equation by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time Steppin Schemes", AIAA Paper, pp. 81-1259.
- Sweby, P. K., 1984, "High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws", siam j. Numer. Anal., No. 21, pp. 995-1011.

Collocation Spectral Method applied to simulate the turbulent compressible turbulent flow

Milton Biage

School of Mechanical Engineering-FEMEC
Federal University of Uberlândia-UFU
mbiage@mecanica.ufu.br

Paulo Lopes da Silva Junior

School of Mechanical Engineering-FEMEC
Federal University of Uberlândia-UFU
plopes@mecanica.ufu.br

Cassius Ricardo Nascimento Ferreira

School of Mechanical Engineering-FEMEC
Federal University of Uberlândia-UFU
Cassius@mecanica.ufu.br

Abstract: *This work is a study of development of the collocation spectral elements technique, in which intended to verify the efficiency of the technique to simulate compressible turbulent flow. For such, studies of simulation for both one-dimensional and two-dimensional flows were developed, involving the discontinuity propagations and the large scale fluctuations. In particular, the proposed studies allowed to verify the dissipation levels and of precision of the technique. It was chosen to simulate as one-dimensional compressible flows the square wave's propagation and shock tubes flow, as classically it is accomplished to gauge the dissipation level of numerical techniques. Also, it was chosen to simulate two-dimensional mixing layers developing either temporarily or spatially. These problems constitute flows with behaviors differentiated along the domain, characterized by multiple zones, which are dominated either by the hyperbolic effects or for elliptic effects, or for a mixture of these two effects. The monotonous convergence for a solution in the hyperbolic flow zone demands high levels of numerical dissipation, having the need to introduce an artificial numerical dissipation. In the case of the collocation spectral element technique, digital filter is used in the time or in frequency, with the advantage that the cutoff frequencies can be varied of elements for elements. The collocation spectral element technique used in that formulation considers that the surfaces among the elements are known. A completely original equation formulation was developed for mass conservation, momentum and energy for the interfaces among the elements that compose the domain. The importance of these formulations is in the fact of allowing obtaining solutions for problems with moving interfaces and in the fact that the conservation equations for the interface allow the propagation of discontinuity phenomena, such as shocks in compressible flow and ignitions in reacting flow. The obtained results showed that the technique of the collocation spectral elements was shown quite efficient to simulate complex flows, with presence of strong discontinuities and preserving the coherent structures of large scale, constituting a quite promising tool to simulate flows in fluid dynamics.*

Key words: *Collocation spectral element method, shock tubes, propagation of waves, mixing layer developing temporarily.*