

### 3 Metodologia numérica

Neste capítulo é apresentada a formulação matemática do problema estudado, bem como a metodologia numérica empregada para a simulação do escoamento, em situações quimicamente inerte e reativa.

O objetivo desta modelagem computacional é comparar os resultados obtidos usando quatro modelos de turbulência e dois modelos de combustão com os experimentais disponíveis na literatura [6]. As comparações feitas serviram como base para a escolha das condições de contorno e dos modelos empregados. Para modelagem do presente experimento o desenvolvimento do estudo passa pela avaliação da influência da escolha dos modelos de turbulência dos modelos de combustão empregados e do grau de refinamento da malha computacional, sobre o resultado obtido. Devido a limitação do tempo disponível, esta avaliação não será realizada neste trabalho.

Neste capítulo serão descritas as modelagens matemáticas do problema seguido para a definição das características da malha computacional. Também são especificadas as condições iniciais e de contorno assumidas. Uma breve descrição do método numérico de resolução é feita.

#### 3.1. Formulação matemática do problema

##### 3.1.1. Equações de transporte

Nesta seção são descritas brevemente as equações usadas para a modelagem do escoamento nas situações quimicamente inerte e reativa. Admite-se que os escoamentos estudados são transientes, compressíveis e turbulentos e que o gás se comporta como gás perfeito governado pelas equações de conservação de massa e energia de Navier-Stokes, que sob a forma diferencial podem ser escritas como [41,42]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}, \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h_s) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h_s) &= \dot{\omega}_T + \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) \\ + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde  $f_{k,j}$  é a força volumétrica na direção  $j$  que age sobre a  $k$ -ésima espécie química.  $\dot{Q}$  é o termo fonte do calor (devido a uma faísca elétrica, um laser ou à radiação).  $\rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}$  é a produção de potência por a força volumétrica  $f_{k,j}$  e

$\dot{\omega}_T = -\sum \Delta h_{f,k} \dot{\omega}_k$  no qual  $\dot{\omega}_k$  é a taxa de produção da espécie  $k$ .

Nas equações 3.1, 3.2 e 3.3,  $\rho$ ,  $u$ ,  $\tau_{ij}$ ,  $q_i$ , e  $p$  são a densidade, a velocidade, o tensor de tensões viscosas, o fluxo de calor e a pressão estática do escoamento, respectivamente. A entalpia total específica,  $h_t$ , pode ser expressa como função da entalpia estática  $h_s$  e da velocidade

$$h_t = h_s + \frac{u_i u_i}{2}. \quad (3.4)$$

O sistema de equações acima não é um sistema fechado, pois existem mais incógnitas do que equações. Portanto, estas necessitam de um conjunto de relações constitutivas que permitam fechar o problema. Uma das relações constitutivas a ser considerada é a equação de estado para o fluido analisado, neste caso, a equação de gases perfeitos [42]:

$$p = \rho R_g T. \quad (3.5)$$

O fluxo de calor,  $q_i$ , é representado por:

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_k \Gamma_k h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.6)$$

onde  $\lambda$  é a condutividade térmica,  $\Gamma_k$  é o coeficiente de difusão,  $h_k$  é a entalpia estática e  $Y_k$  é a fração mássica da  $k$ -ésima espécie.

Admite-se que o fluido de trabalho comporta-se como fluido Newtoniano. Assim, os componentes do tensor de tensões viscosas são dados por [42]:

$$\tau_{ij} = \mu \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right], \quad (3.7)$$

onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker e  $\mu$  é a viscosidade dinâmica.

A estas equações deve ser adicionado um tratamento da turbulência e do processo de reação química.

### 3.1.2. Equações básicas para modelagem da turbulência

O escoamento turbulento é governado pelas mesmas equações que o escoamento laminar, sendo que, rigorosamente falando, este é sempre tridimensional e transiente e é caracterizado por uma distribuição contínua de escalas de flutuações. A técnica usual para tratar a turbulência consiste em decompor as propriedades do escoamento,  $\phi$ , valor médio  $\bar{\phi}$  e um componente flutuante  $\phi'$ , onde [42]

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt, \quad (3.8)$$

e  $\Delta t$  é um intervalo de tempo suficientemente grande quanto comparado com a escala de tempo do movimento turbulento.

Este processo de média temporal, conhecido como média de Reynolds, leva às equações de Navier-Stokes com média de Reynolds, RANS “Reynolds Averaged Navier-Stokes”. As propriedades do escoamento,  $\phi$ , são expandidas em uma parte correspondente ao escoamento médio e outra à porção flutuante:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'. \quad (3.9)$$

Em escoamentos em que a densidade flutua sob efeito da turbulência é usual utilizar a média volumétrica, também conhecida como média de Favre,

$$\tilde{\phi} = \frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\rho \phi}, \quad (3.10)$$

onde  $\bar{\rho}$  é a média de Reynolds da densidade. A decomposição de Favre é:

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi''; \quad \tilde{\phi}'' = 0. \quad (3.11)$$

Mediante a utilização destas médias é possível transformar as equações (3.1), (3.2) e (3.3), em termos das grandezas médias,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) = 0, \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s) = \bar{\omega}_r + \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' h_s''} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \\ - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}} \right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Nestas equações, os termos abertos que requerem fechamento são:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} \rightarrow \text{Tensão de Reynolds}, \quad (3.15)$$

$$\overline{\rho u_j'' h_s''} \rightarrow \text{Fluxo de energia}, \quad (3.16)$$

$$\bar{\omega}_k \rightarrow \text{Taxa de reação química}. \quad (3.17)$$

Para fechar estes termos duas abordagens são normalmente empregadas:

- Modelos de viscosidade turbulenta
- Equações de transporte para as tensões turbulentas e fluxos turbulentos.

Os modelos de turbulência empregados neste trabalho envolvem abordagem da viscosidade turbulenta. Os modelos de viscosidade turbulenta são baseados no conceito de viscosidade turbulenta introduzido por Boussinesq em 1877. Boussinesq propõe uma analogia entre as tensões turbulentas e as tensões existentes no regime laminar,

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \kappa. \quad (3.18)$$

Nesta abordagem, o objetivo da modelagem é determinar a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ . Para este fim, três principais abordagens são conhecidas: expressões algébricas, modelos de uma equação e modelos de duas equações. A seguir são descritos os modelos para a viscosidade turbulenta, ou modelos de turbulência, utilizados neste trabalho. Estes modelos diferem entre si na forma através da qual os valores característicos da escala turbulenta são determinados. Estes modelos são o  $\kappa - \varepsilon$ , RNG  $\kappa - \varepsilon$ ,  $\kappa - \omega$ , SST (Shear stress transport) [42]

Neste trabalho o fluxo de energia é fechado pela utilização da hipótese de gradiente, que estabelece correspondência entre o fluxo de energia turbulenta e o gradiente de entalpia estática média:

$$-\overline{\rho u_j'' h''} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}, \quad (3.19)$$

onde  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento, e  $\mu_t$  viscosidade turbulenta.

O esforço viscoso que representa o efeito médio da difusão molecular modelado como

$$\frac{\partial u_i'' \tau_{ij}''}{\partial x_j} \approx \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \tilde{\kappa}}{\partial x_j} \right), \quad (3.20)$$

onde  $\kappa$  é a energia cinética turbulenta.

### 3.1.3. Modelo de turbulência $\kappa$ - $\varepsilon$

Este modelo introduz duas propriedades para caracterizar o movimento turbulento,  $\kappa = \frac{1}{2} \overline{(u_j' u_j')}$ , a energia cinética do movimento turbulento e

$\varepsilon = \mu \overline{\left( \frac{\partial u_j'}{\partial x_j} \right)^2}$ , a taxa de dissipação de energia cinética do movimento turbulento

[41,42].

Com estas duas propriedades do escoamento, defina-se a viscosidade turbulenta

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon}, \quad (3.21)$$

onde  $C_\mu$  é a constante do modelo de turbulência  $\kappa$ - $\varepsilon$ . Os valores de  $\kappa$  e  $\varepsilon$  são calculados por equações de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \kappa) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \kappa) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right] + P_\kappa - \bar{\rho} \varepsilon, \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\kappa}, \quad (3.23)$$

as constantes do modelo padrão são

$$C_\mu = 0.09 ; \quad \sigma_\kappa = 1.0 ; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3 ; \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44 ; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92 . \quad (3.24)$$

O termo de produção  $P_\kappa$  é determinado por:

$$P_\kappa = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (3.25)$$

onde o tensor de Reynolds é determinado utilizando-se a hipótese de Boussinesq. [eq. (3.18)].

### 3.1.4. Modelo de turbulência RNG $K-\mathcal{E}$

Neste modelo, proposto por Orszag et al.[43] , diferentemente da versão tradicional, é derivado utilizando uma técnica estatística rigorosa chamada de “teoria do grupo de renormalização“ (Renormalization Group Theory-RNG). Os resultados da derivação analítica levam a um modelo com constantes diferentes do modelo  $\kappa - \varepsilon$  padrão, além de termos e funções adicionais nas equações de transporte de  $\kappa$  e  $\varepsilon$ . No entanto, a forma final do modelo é bastante semelhante à do modelo padrão.

A viscosidade efetiva é obtida, pela teoria RNG, através de um processo de eliminação de escala resultando na seguinte equação diferencial para a viscosidade turbulenta

$$d\left(\frac{\rho^2 \kappa}{\sqrt{\varepsilon \mu}}\right) = 1,72 \frac{\hat{\nu}}{\sqrt{\hat{\nu}^3 - 1 + C_\nu}} d\hat{\nu}, \quad (3.26)$$

onde

$$\hat{\nu} = \frac{\mu_{ef}}{\mu} \quad \text{e} \quad C_\nu \approx 100. \quad (3.27)$$

A integração da Eq. (3.26) permite obter uma descrição mais precisa da variação do transporte turbulento com o número de Reynolds efetivo. Isto permite melhor descrever o escoamento de baixo número de Reynolds e escoamentos próximos às paredes.

Para altos números de Reynolds, a equação acima resulta em

$$\mu_{ef} = \frac{c_\mu \rho K^2}{\varepsilon}, \quad (3.28)$$

onde o valor de  $c_\mu$  0,0845 é determinado pela teoria RNG.

Para baixos números de Reynolds, a viscosidade turbulenta se torna

$$\mu_{ef} = \mu \left( 1 + \sqrt{\frac{c_\mu}{\mu} \rho \frac{\kappa}{\varepsilon}} \right)^2. \quad (3.29)$$

Orszag et al. [43] afirmam existir sérias razões para questionar a validade da hipótese de isotropia local em escoamentos turbulentos fortemente cisalhados, propondo a introdução de um termo adicional no lado direito da Eq. (3.23)

$$R = 2\mu S_{ij} \frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j} ; \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.30)$$

Ainda utilizando a Teoria do Grupo de Renormalização Orszag et al. [43] propõem um modelo para este termo, baseado na escala de expansão,  $\eta$ , a qual é definida como a razão entre a freqüência da turbulência e a escala de deformação média

$$\eta = S\kappa/\varepsilon, \text{ onde } S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}. \quad (3.31)$$

Assim o novo termo de  $R$  é escrito como

$$R = \frac{c_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^3}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} ; \quad \beta = 0,012 ; \quad \eta_0 = 4,38. \quad (3.32)$$

A equação proposta para a taxa de dissipação da energia cinética da turbulência torna-se

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_{ef}}{\sigma} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - c_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} - R \quad (3.33)$$

Se este novo termo for incluído na “constante”  $c_{2\varepsilon}$  da equação da dissipação, as equações de  $\kappa$  e  $\varepsilon$  guardam a mesma forma das equações de transporte do modelo  $\kappa$  e  $\varepsilon$  tradicional

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \kappa) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_{ef}}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + P_\kappa - \rho\varepsilon, \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_{ef}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - c_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon}{\kappa}, \quad (3.35)$$

$$c_\mu = 0,085 ; \quad c_{1\varepsilon} = 1,42 ; \quad c_{2\varepsilon} = 1,68 + R_\varepsilon^* ; \quad \beta = 0,012 ; \quad \sigma_\varepsilon = \sigma_\kappa = 0,7179$$

$$R_\varepsilon^* = \frac{c_\mu \rho \eta^3 [1 - (\eta/\eta_0)]}{1 + \beta \eta^3}. \quad (3.36)$$

Comparando-se os valores das “constantes” para os modelos, verifica-se que nas regiões de pequenas taxas de tensão turbulenta ( $\eta < 4,38$ ), o termo  $R_\varepsilon^*$  fornece uma contribuição positiva e  $c_{2\varepsilon}^*$  torna-se maior que  $c_{2\varepsilon}$ . Uma maior

destruição de  $\varepsilon$  tende a diminuir  $\varepsilon$ , e aumentar  $\kappa$  tendendo assim a aumentar a viscosidade turbulenta. Contudo, nas regiões de grandes taxas de tensão turbulenta ( $\eta > 4,38$ ), o sinal de  $R_\varepsilon^*$  é invertido e a viscosidade turbulenta diminui mais neste modelo quando comparado ao modelo tradicional.

### 3.1.5. Modelo de turbulência $K-\omega$

O modelo  $\kappa-\omega$  padrão é um modelo empírico, baseado no transporte da vorticidade turbulenta,  $\omega(\omega = \kappa l^{-2})$ [44], a qual também pode ser considerada como taxa de dissipação específica, ou razão entre  $\varepsilon$  e  $\kappa$ .

O modelo original foi modificado pela adição de termos nas equações de  $\kappa$  e  $\omega$ , o que resultou em um modelo com melhor precisão para prever escoamento cisalhante livres.

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{u}_j\kappa) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + P_\kappa - Y_\kappa, \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{u}_j\omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega, \quad (3.38)$$

onde  $\sigma_\kappa = 2,0$  e  $\sigma_\omega = 2,0$  são os números de Prandtl turbulentos correspondentes a  $\kappa$  e  $\omega$ , e a viscosidade turbulenta é

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho\kappa}{\omega}. \quad (3.39)$$

O coeficiente  $\alpha^*$  amortece a viscosidade turbulenta, resultando em uma correção para baixos números de Reynolds

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left( \frac{\alpha_0^* + \text{Re}_t / R_\kappa}{1 + \text{Re}_t / R_\kappa} \right), \quad (3.40)$$

onde

$$\text{Re}_t = \frac{\rho\kappa}{\mu\omega}; \quad R_\kappa = 6; \quad \alpha_0^* = \beta_i / 3; \quad \beta_i = 0,072; \quad \alpha_\infty^* = 1.$$

Para altos números de Reynolds,  $\alpha^* = \alpha_\infty^* = 1$ .

O termo de produção de  $\kappa$ ,  $P_\kappa$ , é dado pela Eq. (3.25).

A taxa de produção de  $\omega$ ,  $G_\omega$ , é definida por

$$G_\omega = \alpha \frac{\omega}{\kappa} P_\kappa \quad (3.41)$$

e o coeficiente  $\alpha$  é

$$\alpha = \frac{\alpha_\infty}{\alpha^*} \left( \frac{\alpha_0 + \text{Re}_t / R_\omega}{1 + \text{Re}_t / R_\omega} \right), \quad (3.42)$$

onde

$$R_\omega = 2,95 ; \quad \alpha_0 = 1/9 ; \quad \alpha_\infty = 0,52 .$$

A taxa de destruição de  $\kappa$  é dada por

$$Y_\kappa = \rho \beta^* f_{\beta^*} \kappa \omega, \quad (3.43)$$

onde

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \chi_\kappa \leq 0 \\ \frac{1 + 680 \chi_\kappa^2}{1 + 400 \chi_\kappa^2} & \chi_\kappa > 0 \end{cases} ; \quad \chi_\kappa = \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (3.44)$$

$$e \quad \beta^* = \beta_i^* [1 + \zeta^* F(M_t)] ; \quad \beta_i^* = \beta_\infty^* \left( \frac{4/5 + (\text{Re}_t / R_\beta)^4}{1 + (\text{Re}_t / R_\beta)^4} \right) \quad (3.45)$$

$$\zeta^* = 1,5 ; \quad R_\beta = 8 ; \quad \beta_\infty^* = 0,09$$

O termo  $F(M_t)$  é a função de compressibilidade, sendo dada por

$$F(M_t) = \begin{cases} 0 & M_t \leq M_{t0} \\ M_t^2 - M_{t0}^2 & M_t > M_{t0} \end{cases} \quad (3.46)$$

$$\text{onde} \quad M_t^2 = \frac{2\kappa}{a^2} ; \quad M_{t0} = 0,25 ; \quad a = \sqrt{\gamma RT} \quad (3.47)$$

A destruição de  $\omega$  é dada por:

$$Y_\omega = \rho \beta f_\beta \omega^3 \quad (3.48)$$

$$f_\beta = \frac{1 + 70 \chi_\omega}{1 + 80 \chi_\omega} ; \quad \chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij} \Omega_{jk} S_{ki}}{(\beta_\infty^* \omega)} \right| \quad (3.49)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad ; \quad \beta = \beta_i \left[ 1 - \frac{\beta_i^*}{\beta_i} \zeta^* F(M_t) \right] \quad (3.50)$$

No caso de escoamentos com baixos Reynolds, o modelo  $\kappa - \varepsilon$  requer uma resolução próxima à parede de  $y^+ < 0,2$ , enquanto que no modelo  $\kappa - \omega$  esta pode ser de  $y^+ < 2$ , o que é uma vantagem considerável, em termos de resolução da malha computacional. A distância adimensional da parede ao primeiro nó da malha computacional é

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau \Delta y}{\mu}, \quad (3.51)$$

$$u_\tau = \left( \frac{\tau_\omega}{\rho} \right)^{1/2}, \quad (3.52)$$

$u_\tau$  : Velocidade de fricção,

$\tau_\omega$  : Tensor cisalhante na parede,

$\Delta y$  : Distância da parede ao nó inicial.

### 3.1.6. Modelo de turbulência de Transporte de Tensão Cisalhante-SST

Este modelo de turbulência é baseado em uma modificação do modelo  $\kappa - \omega$  [45] que procura aliar as vantagens deste com aquelas do modelo  $\kappa - \varepsilon$ . Para este fim, é resolvida uma equação de transporte conjunta para  $\varepsilon$  e  $\omega$ , constituindo, assim, na prática, um modelo com dois conjuntos de equações de transporte. Na aplicação do modelo, as equações de transporte para  $\kappa - \omega$  são utilizadas na região próxima à parede, enquanto as equações transformadas de transporte do modelo  $\kappa - \varepsilon$  são adotadas na região externa. A ponderação da contribuição de cada modelo é realizada através da função de mistura,

$$\Phi_3 = F_1 \Phi_1 + (1 - F_1) \Phi_2. \quad (3.53)$$

A função de mistura  $F_1$  vale 1 na parede, decaindo para o valor zero na região externa à camada limite. Os termos  $\Phi_i$  representam as contribuições de cada modelo. Para  $F_1=1$ , a equação resolvida perto da parede é a equação de

transporte de  $\kappa - \omega$ , e para  $F_1=0$  a equação que é resolvida no escoamento livre é a do modelo  $\kappa - \varepsilon$ .

Na eq (3.53), a função de mistura é definida por

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4), \quad (3.54)$$

sendo

$$\arg_1 = \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{\kappa}}{\beta_\kappa \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho\kappa}{CD_\omega \sigma_{\omega 2} y^2} \right], \quad (3.55)$$

$$CD_\omega = \max \left[ 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right], \quad (3.56)$$

onde “y” representa a distância em relação à parede,  $\nu$  é a viscosidade cinemática, e as constantes assumem os seguintes valores

$$\beta_\kappa = 9/100 \quad ; \quad \sigma_{\omega 2} = 1/0.856.$$

O modelo SST (“Shear Stress Transport”) inclui um limitador para o valor da viscosidade turbulenta:

$$\nu_t = \frac{\alpha\kappa}{\max(\alpha\omega, SF_2)}, \quad (3.57)$$

onde

$$\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}, \quad (3.58)$$

e onde S representa uma medida invariante da taxa de deformação,  $\alpha = 5/9$ , e  $F_2$  uma função de mistura, semelhante a  $F_1$ , dada por

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2), \quad (3.59)$$

com

$$\arg_2 = \max \left( \frac{2\sqrt{\kappa}}{\beta_\kappa \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right). \quad (3.60)$$

A concepção do modelo SST permite um adequado transporte das tensões cisalhantes, resultando, assim, em predições acuradas da separação sob condições de gradiente de pressão adverso.

### 3.1.7. Equações básicas para modelagem da combustão

Uma vez que turbulência é, por si só, um fenômeno bastante complexo, é esperado que a predição da interação entre combustão e turbulência envolva um grau de dificuldade ainda maior. No caso de escoamentos reativos, as técnicas de DNS (Simulação Numérica Direta) e LES (Simulação de Grandes Escalas) tem sua aplicação restrita a escoamentos com baixos valores do número de Reynolds, envolvendo configurações geométricas e misturas simples de gases perfeitos. Por este motivo, modelos que utilizam alguma forma de média temporal desempenham um papel essencial na predição de escoamentos reativos complexos, os quais são a maioria dos problemas de interesse prático. Para a descrição completa do escoamento turbulento reativo, é necessário aplicar este procedimento de média estatística ao conjunto de equações governantes. O procedimento de média de Favre, descrito pelas Eqs. (3.11) e (3.13), é aplicado às equações de transporte de massa das espécies químicas, resultando em equações médias de transporte das frações de massa,  $\tilde{Y}_k$ , as quais envolvem correlações associadas à turbulência, que necessitam modelagem. Os tensores de Reynolds presentes nas equações de quantidade de movimento linear são determinados mediante a utilização de modelos de turbulência. Embora o processo de combustão influencie o transporte de energia no meio reativo, será dada ênfase aqui apenas à modelagem da equação de transporte de massa das espécies químicas, pois nela residem alguns dos principais problemas de fechamento encontrados. As equações de transporte de massa das espécies químicas podem ser escritas aplicando-se a média de Reynolds como

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_k) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{v_{k,i}Y_k} + \overline{\rho u_i''Y_k''}) + \bar{\omega}_k, \quad k=1,\dots,N. \quad (3.61)$$

Nesta equação o termo  $\overline{\rho u_i''Y_k''}$ , conhecido como fluxo turbulento de Reynolds da k-ésima espécie química na direção i, é fechado usando a hipótese de gradiente.

$$\overline{\rho u_i''Y_k''} = -\frac{\mu_i}{Sc_{kt}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i}, \quad (3.62)$$

onde  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta, determinada pelo modelo de turbulência,  $Sc_{kt}$  é o número de Schmidt para a espécie  $k$ .

O termo de fluxo difusivo das espécies que é descrito por

$$\overline{V_{k,i} Y_k} = -\overline{\rho D_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \approx -\overline{\rho D_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i}. \quad (3.63)$$

O termo da taxa de reação média das espécies químicas,  $\overline{\dot{\omega}_k}$ , precisa ser modelado. A dificuldade de previsão deste termo está associada à forte dependência da taxa de reação com a temperatura que é característica da lei de Arrhenius. Isto acarreta, em particular, a impossibilidade de utilizar-se concentrações médias e temperaturas médias para o cálculo das taxas de produção média das espécies [2,3]. Para contornar esta dificuldade, diversos modelos foram desenvolvidos, alguns dos quais serão abordados a seguir.

### 3.1.8. Modelo de combustão EDM (Eddy Dissipation model)

O modelo EDM (Modelo de dissipação de turbilhão) é baseado no modelo “Eddy-Break-Up”, proposto por Spalding [46] e utiliza, para a análise da combustão turbulenta, a hipótese de altos números de Reynolds ( $Re \gg 1$ ) e Damköhler ( $Da \gg 1$ ). Onde o número de Reynolds é definido como  $Re(r) = u'(r)r/\nu$ , na qual,  $u'(r)$  é a velocidade característica do movimento de escala  $r$ , e  $\nu$  é a viscosidade cinemática, o número de Damköhler é definido como  $Da = \tau_t/\tau_c$ , na qual  $\tau_t$  é o tempo característico da turbulência e  $\tau_c$  é o tempo químico característico. A utilização destas hipóteses equivale a supor que o processo de transformação química não desempenha um papel explícito e que são os movimentos turbulentos que controlam a taxa de reação. A zona de reação é vista como uma coleção de frentes de chamas de espessura nula separando gases frescos e de queimados, os quais são transportados pelas estruturas turbulentas. Assim, a taxa de reação média é controlada pelo tempo característico turbulento da mistura,  $\tau_{EBU}$ , e pela variança da fração de mistura dos produtos de combustão,  $\overline{Y_p'^2}$ , isto é

$$\overline{\dot{\omega}_p} = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\sqrt{\overline{Y_p'^2}}}{\tau_{EBU}}, \quad (3.64)$$

onde  $C_{EBU}$  é a constante do modelo, da ordem da unidade. Usualmente o tempo turbulento,  $\tau_{EBU}$ , é estimado a partir da energia cinética turbulenta,  $\kappa$ , e a taxa de dissipação  $\varepsilon$  como:

$$\tau_{EBU} = \kappa / \varepsilon. \quad (3.65)$$

Este modelo foi modificado por Magnussen e Mjertager [47], que substitui o termo de  $\overline{Y_p'^2}$  por um termo simples de fração de massa média da espécie minoritária (combustível para combustão pobre e oxigênio para combustão rica). Este modelo corresponde à escolha do mínimo de três taxas, as quais são definidas como:

$$\overline{\omega_{F,O_2,P}} = \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{\kappa} A \min \left\{ \bar{Y}_F, \frac{\bar{Y}_{O_2}}{\nu}, \frac{B}{(1+\nu)} \bar{Y}_P \right\}, \quad (3.66)$$

onde A e B são constantes do modelo e  $\nu$  é o número de moles de oxidante necessários para queimar completamente 1 mol de combustível.

### 3.1.9. Modelo de elementos de chama (Flamelet)

O modelo de elementos de chama para escoamentos de gases não pré-misturados parte do pressuposto de que a chama turbulenta é um conjunto de elementos de chamas laminares continuamente transportados e estirados pelo escoamento. O efeito do aumento da taxa de estiramento sobre um elemento de chama laminar faz com que ocorra uma progressiva interpenetração dos reagentes. Esta interpenetração resulta na presença de combustível não queimado na região oxidante da chama, e vice-versa. Isto leva a uma diminuição progressiva da temperatura na chama, até o ponto em que não é mais possível manter combustão estacionária. Um aumento da taxa de estiramento leva então à extinção abrupta do processo de combustão. Neste caso, as propriedades do escoamento reativo  $(T, Y_i)$  são funções do escalar passivo  $Z$ , o qual é identificado com a fração de mistura, isto é, a razão entre vazão de massa de combustível e a vazão de massas total e da sua taxa de dissipação,  $\chi$ , definidas assim

$$Z = \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_F + \dot{m}_{Ox}}, \quad (3.67)$$

$$\chi = 2D|\nabla Z|^2, \quad (3.68)$$

onde  $D$  é o coeficiente de difusão binário do reagente minoritário na mistura. Esta dependência funcional permite a construção de bibliotecas de elementos de chama, nas quais  $(T, Y_i)$  são tabulados para diversos valores dos parâmetros  $(Z, \chi)$ . Estes modelos requerem a solução da equação de conservação para a fração de mistura média

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right\}, \quad (3.69)$$

e da equação de transporte da variância de  $\tilde{Z}$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z}''^2)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z}''^2)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_{z^2}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \right\} + \frac{2\mu_t}{\sigma_z} \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi}. \quad (3.70)$$

Nesta equação, o segundo termo do lado direito representa a produção e o terceiro a dissipação da variância das flutuações do escalar passivo. O modelo clássico de analogia entre flutuações do escalar passivo e flutuações de velocidade é empregado para descrever  $\tilde{\chi}$

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{K}} \tilde{Z}''^2, \quad (3.71)$$

os valores dos coeficientes nestas equações são

$$\sigma_z = 0,9 \quad ; \quad \sigma_{z^2} = 0,9 \quad ; \quad C_\chi = 2,0$$

A composição média  $(\tilde{Y}_i)$  do escoamento é calculada como uma função da fração de mistura média, a variância da fração de mistura e a taxa de dissipação escalar.

$$\tilde{Y}_i = \iint Y_i(Z, \chi) P(Z, \chi) dZ d\chi \quad (3.72)$$

onde  $P(Z, \chi)$  é a PDF da fração de mistura, parametrizada pelos valores locais de  $\tilde{Z}$  e  $\tilde{Z}''^2$ . O mecanismo detalhado de cinética química da combustão proposto por [48] é utilizado para gerar a biblioteca de elementos de chama  $Y_i(Z, \chi)$ . Este mecanismo contém 100 reações elementares envolvendo 28 espécies químicas.

A determinação da PDF conjunta de  $Z$  e de  $\chi$ ,  $P(Z, \chi)$ , é usualmente realizada partindo-se do princípio que a taxa de dissipação é ligada às pequenas escalas do escoamento, enquanto que o escalar passivo é influenciado pelas grandes escalas do movimento, o que implica em

$$P(Z, \chi) = P(Z)P(\chi), \quad (3.73)$$

que é conhecida como hipótese de independência estatística de Kolmogorov [49]. A PDF de  $Z$  depende do tipo de escoamento considerado, neste trabalho a formulação clássica da função  $\beta$  foi empregada. A PDF de  $\chi$  é arbitrada como sendo  $P(\chi) = \delta(\chi - \tilde{\chi}_{st})$ .

### 3.2. Domínios e malhas computacionais utilizados

O estudo numérico realizado pode ser dividido em duas partes. Na primeira parte são comparados os resultados obtidos na simulação com os dados experimentais de Schefer et al.[6]. Foram utilizados três tipos de malhas computacionais com a mesma configuração, porém com diferenças na forma da base inferior da malha, na quantidade de nós e no comprimento vertical da malha. Na segunda parte emprega-se uma malha com outra forma de base inferior, o que é necessário devido à configuração própria do queimador experimental desenvolvido neste trabalho. As características mais importantes da configuração experimental da literatura [6] são:

- Diâmetro e velocidade média do jato central de combustível,  $D_j=5.4$  mm e  $U_j=21$  m/s, respectivamente.
- Diâmetro do queimador tipo obstáculo  $D_B=50$  mm.
- Diâmetro e velocidade média do escoamento de ar anular,  $D_a=100$  mm e  $U_a=25$  m/s, respectivamente.

As características da configuração do experimento desenvolvido neste trabalho são as seguintes:

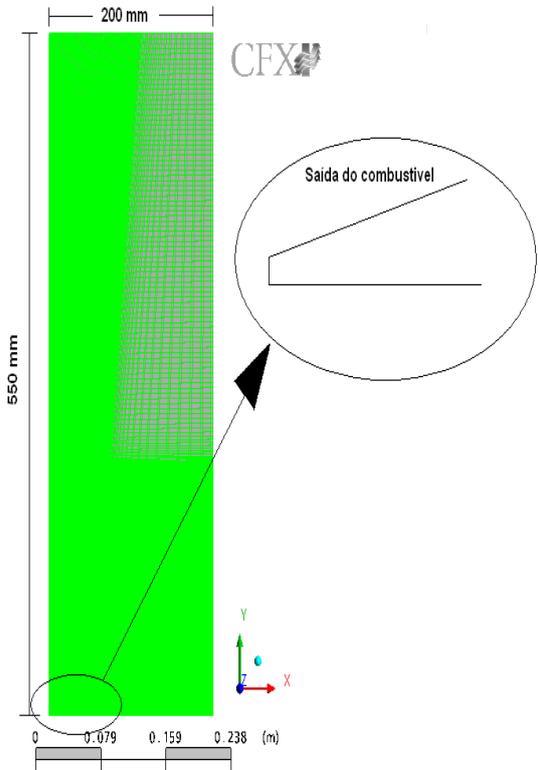
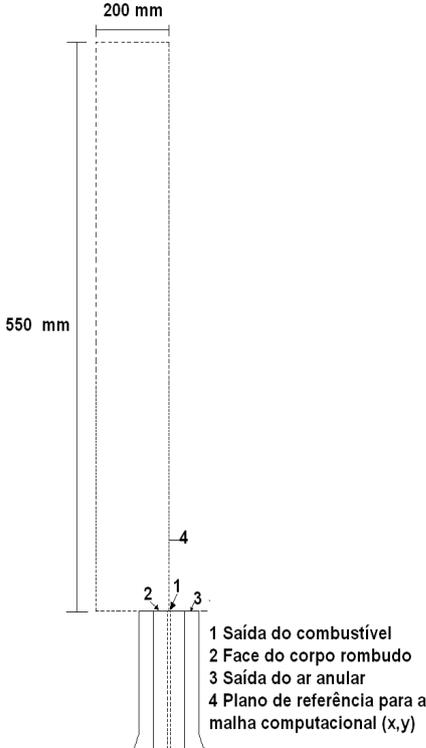
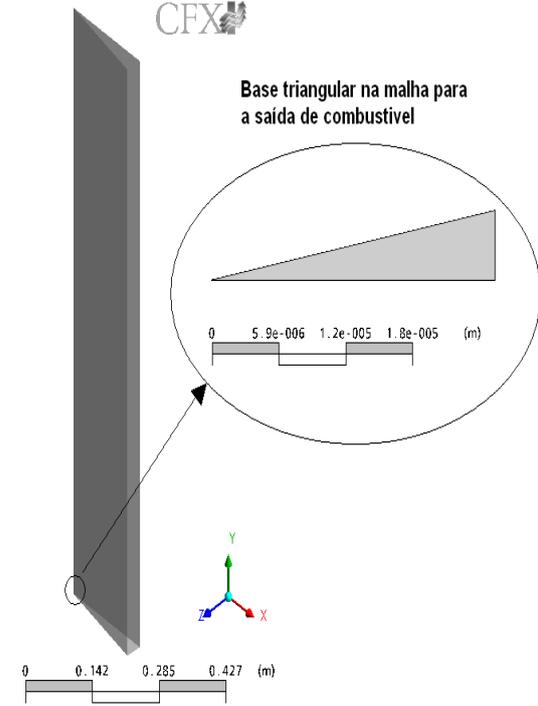
- Diâmetro e velocidade média do jato central de combustível,  $D_j=7.1$  mm e  $U_j= 1,31, 2,19, 2,92, 6,90$ m/s, respectivamente.
- Diâmetro do queimador tipo obstáculo  $D_B=60$  mm.
- Diâmetro e velocidade média do escoamento de ar anular,  $D_a=200$  mm e  $U_a=1,24, 6,6, 11,7$ m/s, em média.

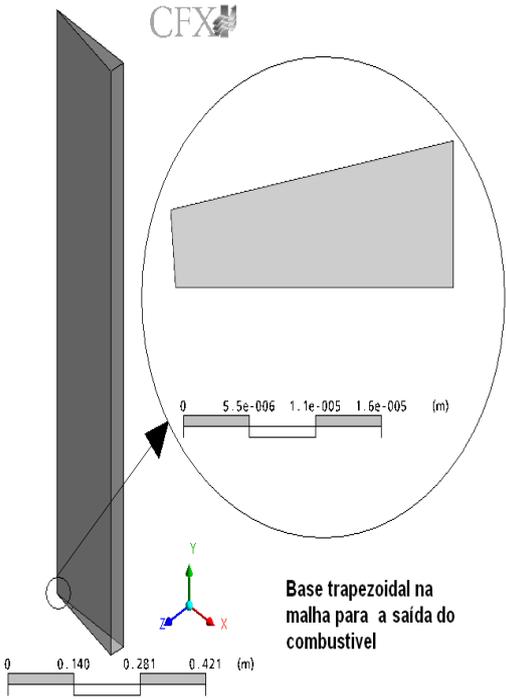
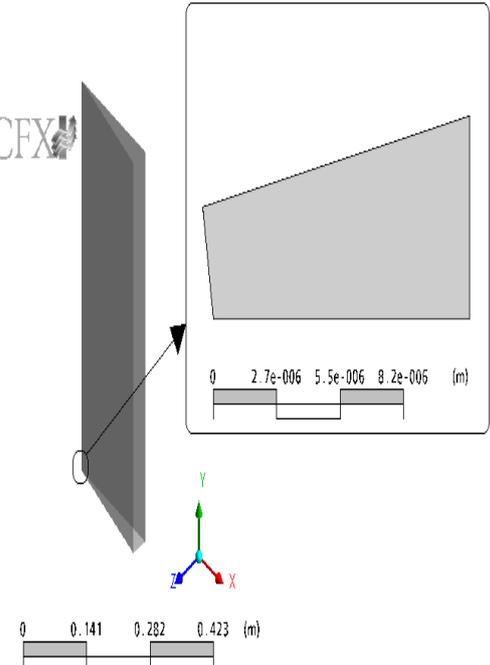
A **tabela 3.1** mostra as principais propriedades geométricas da malhas empregadas na primeira parte do trabalho, assim como sua representação com respeito ao queimador experimental de Schefer et al.[6]. Observe-se na tabela 3.1a, que as dimensões da malha são comparadas com um plano desenhado do queimador de Schefer et al. Mostram-se também os três tipos de malhas que foram utilizadas para modelar o escoamento inerte. Aquela que leva ao melhor resultado será posteriormente utilizada na simulação da chama não pré-misturada.

O domínio computacional foi definido usando como base o trabalho de Alvarez [4], onde o escoamento é assumido bi-dimensional e com simetria de revolução. As dimensões do domínio computacional nas direções longitudinal ( $y$ ) e radial ( $x$ ) para a malha usada no caso de ambos os experimentos, de  $11D_B$  e  $4D_B$ . A origem do sistema de coordenadas é situada na interseção entre centro do jato de combustível e a face do queimador.

Note-se que o domínio escolhido é um prisma cuja base é uma seção circular de  $15^\circ$ . Isto é necessário, pois o programa computacional utilizado, o ANSYS/CFX, somente realiza cálculos em domínios tridimensionais. O programa computacional usado para a geração da malha foi o ICEM as quais foram geradas por cortesia da empresa ESSS. Conforme o mostrado na tabela 3.1a, existe uma região da malha mais refinada e esta situada na vizinhança da face do queimador, onde serão localizadas as zonas de recirculação e de desenvolvimento do jato central. A extensão desta região refinada é de  $50 \times 200$  mm<sup>2</sup>, nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente no caso da malha feita para comparação com dados da literatura [6]. As notações  $X_{ini}$ ,  $X_{fin}$  são a coordenada inicial e final respectivamente no eixo  $x$  da malha, assim como  $Y_{ini}$ ,  $Y_{fin}$ ,  $Z_{ini}$ ,  $Z_{fin}$  representam as coordenadas iniciais e finais nos eixos  $Y$  e  $Z$  respectivamente.

Tabela 3.1 Características geométricas das malhas empregadas para modelar o experimento de Schefer et al. [6].

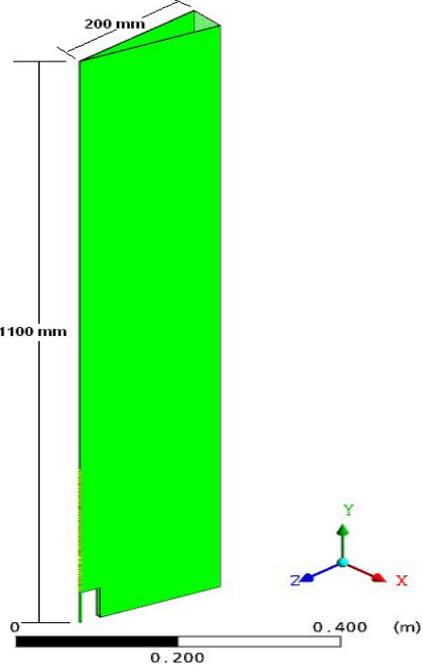
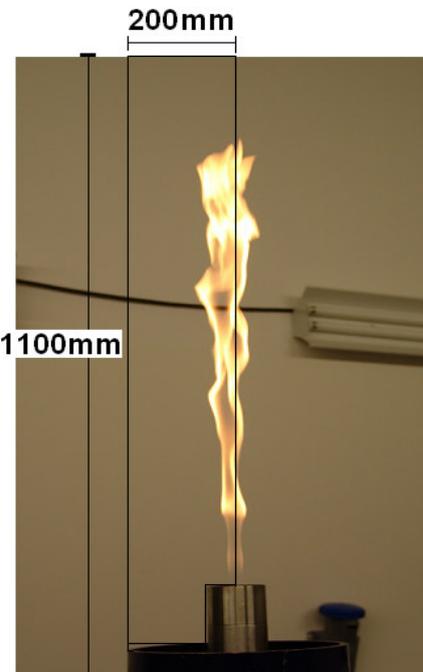
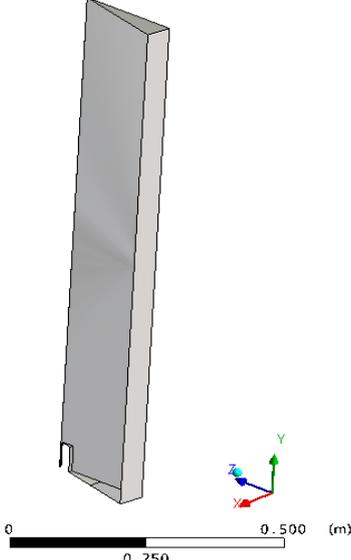
<p>a)</p> 	 <p>1 Saída do combustível 2 Face do corpo rombudo 3 Saída do ar anular 4 Plano de referência para a malha computacional (x,y)</p>
<p>b)</p> 	<p><b>Malha 1</b></p> <p>Número de nós: 33930          Número de elementos: 16776          Hexaedros: 16543          Cunha: 233          Volume: 0,00382026 m<sup>3</sup>          Dimensões:  <math>X_{ini}=0</math> ; <math>X_{fin}=0,2</math> m  <math>Y_{ini}=0</math> ; <math>Y_{fin}=1,1</math> m  <math>Z_{ini}=0</math> ; <math>Z_{fin}=0,0347296</math> m</p>

<p>c)</p>  <p>Base trapezoidal na malha para a saída do combustível</p>	<p><b>Malha 2</b></p> <p>Número de nós: 34164          Número de elementos: 16776          Hexaedros: 16776          Volume: 0,00382026 m<sup>3</sup>          Dimensões:  <math>X_{ini}=2,65 \cdot 10^{-5} \text{ m};</math>    <math>X_{fin}=0,2 \text{ m}</math>  <math>Y_{ini}=0</math>                            ;    <math>Y_{fin}=1,1 \text{ m}</math>  <math>Z_{ini}=0</math>                            ;    <math>Z_{fin}=0,0347296 \text{ m}</math></p>
<p>d)</p> 	<p><b>Malha 3</b></p> <p>Número de nós: 231942          Número de elementos: 114944          Hexaedros: 114944          Volume: 0,00191013 m<sup>3</sup>          Dimensões:  <math>X_{ini}=2,65 \cdot 10^{-5} \text{ m};</math>    <math>X_{fin}=0,2 \text{ m}</math>  <math>Y_{ini}=0</math>                            ;    <math>Y_{fin}=0,55 \text{ m}</math>  <math>Z_{ini}=0</math>                            ;    <math>Z_{fin}=0,0347296 \text{ m}</math></p>

A **tabela 3.2** mostra as principais características da malha para o presente queimador. São mostradas, as dimensões da malha juntamente com as características geométricas do queimador. Na parte inferior da malha há um canal de entrada para o combustível o que permite uma melhor descrição do escoamento na vizinhança da face do queimador. A região refinada é de 60x 240

mm<sup>2</sup> nas direções x e y, respectivamente. A região afastada é recoberta com uma malha mais grosseira.

Tabela 3.2 Características geométricas da malha empregada para modelar o queimador tipo obstáculo desenvolvido neste trabalho.

<p>a)</p> 	
<p>b)</p> 	<p style="text-align: center;"><b>Malha do experimento</b></p> <p>Número de nós: 180804          Número de elementos: 89766          Hexaedros: 89766          Volume: 0,00567789m<sup>3</sup>          Dimensões:  <math>X_{ini}=3.72529 \cdot 10^{-12} \text{ m}</math> ; <math>X_{fin}=0,0517638 \text{ m}</math>  <math>Y_{ini}=-5,68434 \cdot 10^{-17} \text{ m}</math>; <math>Y_{fin}= 1,1 \text{ m}</math>  <math>Z_{ini}=-0,2 \text{ m}</math> ; <math>Z_{fin}=-0,000193 \text{ m}</math></p>

A malha empregada foi uma de tipo hexaédrica para ambos os casos. A escolha de malhas hexaédricas é motivada pela simplicidade geométrica do problema estudado e pelo melhor controle do refinamento no interior do domínio.

### 3.3. Condições de contorno

Na **figura 3.1** se mostra a numeração das faces das fronteiras do domínio computacional do queimador, a qual esta relacionada às condições de contorno adotadas. Serão chamadas de Malha final 1 e Malha final 2 aquelas escolhidas para modelar ambos os casos estudados neste trabalho.

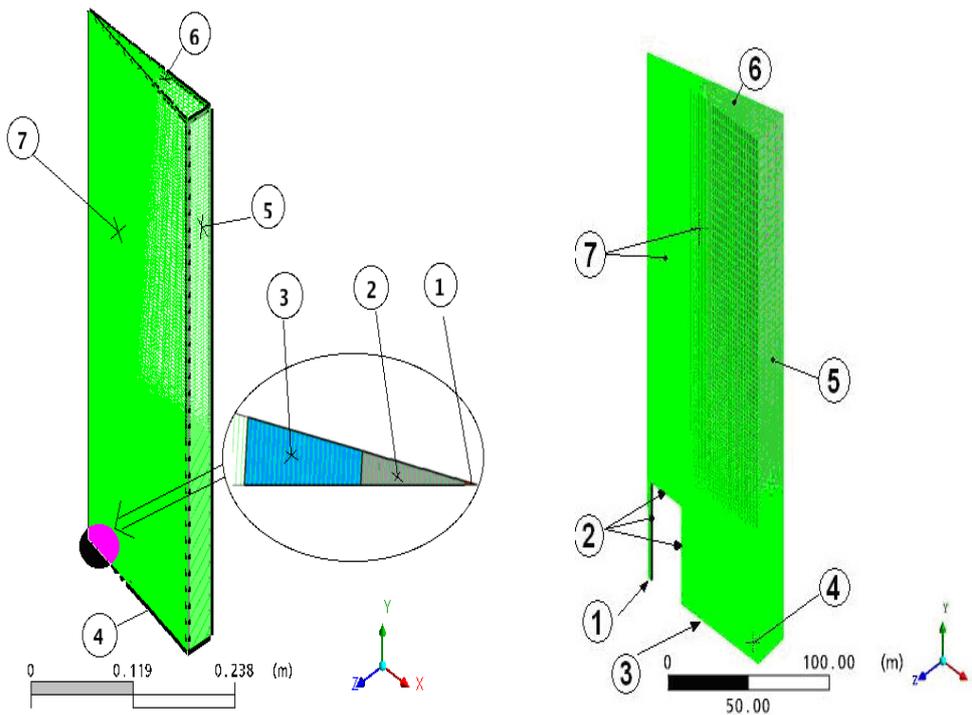


Figura 3.1 Domínio computacional das duas malhas finais, com suas condições de contorno numeradas. (malha final 1: esquerda, malha final 2: direita).

**Condição de contorno 1:** É a seção onde o combustível ingressa ao domínio, na qual foi atribuída para a malha final 1 a velocidade média de 21 m/s, e para a malha final 2 as velocidades médias de 1,31, 2,19, 2,92, 6,90m/s. Aplica-se nesta seção como condição de contorno uma velocidade média normal à entrada de combustível descrita como uma função empírica chamada de “lei de potência” .

$$\frac{u}{U} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/n}, \quad (3.74)$$

No presente trabalho empregam-se três tipos de lei de potência, as quais são representadas pela equação

$$u = U \left( a - b \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right)^{1/n}, \quad (3.75)$$

Os valores das constantes são mostrados na tabela 3.3

Tabela 3.3 Valores para cada caso na lei de potência, escoamento de combustível.

Caso	$U$	$a$	$b$	$R$	$n$
1	21	2	8	0,0054	5
2	21	1	1	0,0027	7
3	24,5	1	4	0,0054	6

Também foram escolhidas diferentes formas de prescrever as quantidades turbulentas, tomando-se como referência trabalhos anteriores.

a) Baseado em Correa e Gulati [7]

Arbitra-se a escala de comprimento e intensidade turbulenta,  
Intensidade=TKI=0,005.

Escala de comprimento dos turbilhões=0,16 mm.

b) Baseado no trabalho interno da ANSYS a qual chamaremos de Flame D, a intensidade turbulenta é representada por uma equação empírica expressa como  $TKI = u' / U$  que aproxima os dados experimentais [50],

$$u' = 11,04779537 * \left[ \frac{r}{0,0054} \right]^2 + 2,3961042 \quad (3.76)$$

$$U = 21 \text{ m/s}$$

$$\text{Taxa de viscosidade do turbilhão} = TVR = \min(c1, c2 - TKI) \quad (3.77)$$

$$c1 = 25 ; c2 = 1000.$$

**Condição de contorno 2:** É a face do queimador tipo obstáculo, a qual foi suposta como uma parede lisa e sem deslizamento.

**Condição de contorno 3:** Corresponde à entrada de ar anular, para a qual foi utilizada uma velocidade média, para a malha final 1, de 25 m/s e, para a malha final 1,24; 6,6; e 11,7m/s .

Para a malha final 1 utiliza-se também uma função empírica de lei de potência para descrever os perfis de velocidade média. Assim, esta lei de potência possui a forma que do jato de combustível, mudando somente as constantes, como mostrado na tabela 3.4.

Tabela 3.4 Valores das constantes para cada caso na lei de potência escoamento de ar.

<b>Caso</b>	$U$	$a$	$b$	$R$	$n$
<b>1</b>	25,8	1	4	0,0253798	7
<b>2</b>	25,5	1	4	0,0253798	50

Utiliza-se um baixo valor de intensidade turbulenta,  $u'/U = 0,01$ .

**Condição de contorno 4 e 5:** Ambas condições foram adotadas como tipo “Opening”, a qual o CFX define como uma condição de contorno na qual o fluido pode atravessar a superfície de contorno em qualquer sentido [41]. Para evitar modificações abruptas da direção do escoamento durante o processo de convergência, um coeficiente de perda é definido para modelar queda de pressão, que corresponderia a uma turbulência de grade

$$\Delta p_{loss} = \frac{1}{2} f \rho U_n^2, \quad (3.78)$$

onde  $f$  é o coeficiente de perda,  $U_n$  é a componente normal da velocidade no contorno “opening”, e  $\rho$  é a densidade do fluido. Para fluido entrando no domínio a pressão estática na fronteira é

$$P_{esc} - \frac{1}{2} f \rho U_n^2 = P_{stat}, \quad (3.79)$$

Enquanto que, para fluido saindo do domínio, a pressão estática é dada por

$$P_{esc} + \frac{1}{2} f \rho U_n^2 = P_{stat}. \quad (3.80)$$

Neste trabalho foi utilizado um coeficiente de perda  $f = 5$ .

**Condição de contorno 6 :** Corresponde à saída do escoamento do domínio computacional na qual a pressão estática é prescrita.

**Condição de contorno 7 :** São os planos de simetria.

### 3.4. Método numérico de resolução

O método numérico que utiliza o programa ANSYS/CFX é baseado na resolução das equações (3.12) e (3.13) e as equações que descrevem o transporte turbulento, mediante a conversão destas em um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidos numericamente. A técnica de resolução destas equações é baseada no método de volumes finitos. Esquemáticamente, esta técnica de resolução consiste em:

- Divisão do domínio de cálculo de um conjunto de volumes de controles discretos usando a malha computacional.
- Integração das equações governantes sobre os volumes de controle individuais para a construção das equações algébricas para propriedades do escoamento.
- Linearização das equações discretizadas e solução do sistema de equações resultante, a fim de atualizar os valores das propriedades do escoamento.

O ANSYS/CFX aplica o algoritmo conhecido como “falso transiente”, o qual utiliza um passo de tempo como maneira de subrelaxar o processo de solução das equações durante a convergência para a solução final. Para se obter os resultados apresentados neste trabalho, foi utilizada uma escolha automática da escala de tempo, baseada na configuração geométrica do domínio de cálculo.

O ANSYS/CFX armazena os valores das propriedades do escoamento nos nós da malha computacional. Para discretização dos termos de convecção e difusão foi empregado o esquema chamado de alta resolução (“*High resolution*”), o qual é um método que mistura o método centrado e o método “*upwind*”.