

## 4 Metodologia numérica

Neste capítulo é apresentada a configuração empregada para a simulação numérica do escoamento de jato livre e com obstáculo. Estas configurações foram estudadas utilizando-se a metodologia de dinâmica dos fluidos computacional, tendo sido empregada a ferramenta comercial ANSYS/CFX10 [6].

O objetivo desta simulação computacional é de comparar os resultados obtidos usando dois modelos de turbulência com os dados experimentais. Configurações similares do presente estudo foram objeto de simulações computacionais [8, 12], as quais serviram de base para a escolha das condições de contorno e dos modelos empregados. O estudo numérico detalhado do escoamento turbulento não faz parte dos objetivos deste trabalho. O desenvolvimento de tal estudo passaria pela avaliação da influência da escolha dos modelos físicos e químicos, e do grau de refinamento da malha computacional, sobre o resultado obtido.

Neste capítulo serão brevemente descritos o procedimento seguido para a definição das características da malha computacional, e do modelo de turbulência usado. Também são especificadas as condições iniciais e de contorno assumidas; o tipo de simulação, o modo de processamento e os critérios de convergência dos resíduos r.m.s. das equações governantes do escoamento.

### 4.1 Domínio e malha computacional utilizado

As duas configurações de escoamento estudadas utilizaram o mesmo domínio computacional. As características mais importantes da configuração experimental são:

- Diâmetro e velocidade média do jato central de saída,  $D_j = 2$  mm e  $U_j = 27,4$  m/s, respectivamente.
- Diâmetro do queimador tipo obstáculo ( $D_B$ ): 36 mm.

- Diâmetro e velocidade média do ar anular,  $D_a = 200$  mm e  $U_a = 1,5$  m/s, respectivamente.

O domínio computacional foi definido usando como base o trabalho de Liu et al. [12], onde o escoamento é assumido bi-dimensional e com simetria de revolução. As dimensões do domínio computacional nas direções longitudinal (y) e radial (x) são de  $7,2D_B$  e  $3D_B$ , respectivamente. A origem do sistema de coordenadas é situada no centro do jato de saída do queimador, conforme mostrado na **Figura 4.1**.

As dimensões do domínio computacional nas direções longitudinal (y) e radial (x) são 450 e 115 mm, respectivamente. 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 software usado para a geração da malha computacional foi o ICEM/CFD e as malhas foram geradas por cortesia da empresa ESSS. Conforme o mostrado na **Figura 4.2**, uma região de malha mais refinada é 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  $50 \times 20$  mm<sup>2</sup>, nas direções y e x, respectivamente [8, 17 e 27]. A região afastada do queimador é recoberta com uma malha mais grosseira.

O domínio computacional foi recoberto por uma malha hexaédrica. A escolha de malhas hexaédricas é motivada pela simplicidade geométrica do problema estudado e pelo melhor controle do refinamento junto às paredes laterais do domínio. Além disto, espera-se obter um menor tempo computacional, pois a utilização deste tipo de malha facilita a convergência [6]. Entre as principais características do domínio da malha computacional foram:

- A malha gerada possui 26970 nós e 13248 elementos hexaédricos.
- O número de nós nas direções x e y foram 186 e 290 respectivamente.
- O número de elementos hexaédricos nas direções x e y foram 92 e 144 respectivamente.
- O espaçamento mínimo de cada elementos hexaédrico nas direções x e y foram 0,244 mm e 0,84 mm, respectivamente, correspondentes à região de interesse na saída do jato central.

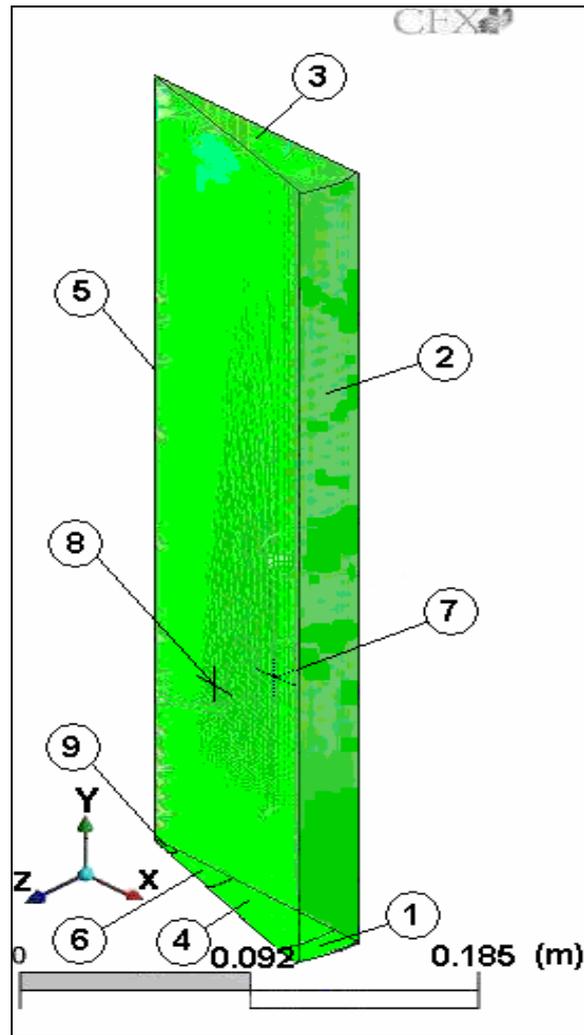


Figura 4.1 – Domínio computacional e condições de contorno.

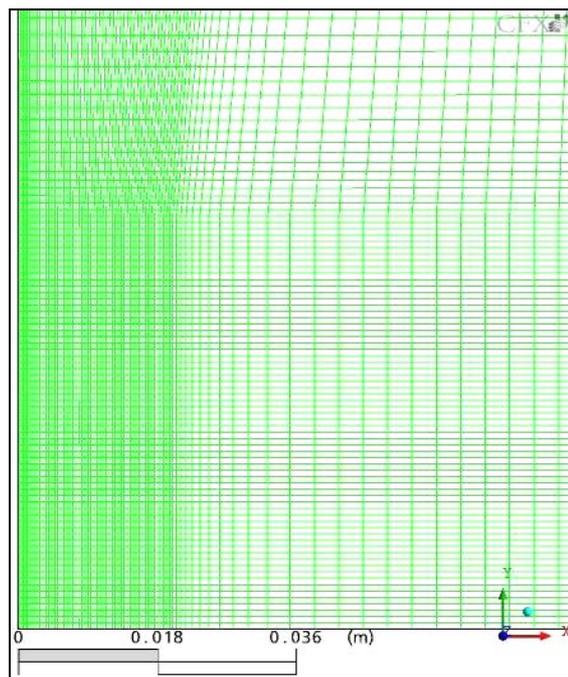


Figura 4.2 – Malha computacional na região próxima à face do queimador.

## 4.2 Formulação dos modelos matemáticos utilizados

### 4.2.1 Equações básicas de conservação

Nesta seção são descritas brevemente as equações usadas para a modelagem do escoamento. Admite-se que os escoamentos estudados são transientes, compressíveis e turbulentos e que o ar se comporta como gás perfeito governado pelas equações de Navier-Stokes, que exprimem a de transporte de massa, de quantidade de movimento e de energia, escritas sob a forma diferencial [6, 21], isto é,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho H \vec{u}) = \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{\tau} \cdot \vec{u} - \vec{q}]. \quad (4.3)$$

Nestas equações,  $\rho$ ,  $\vec{u}$ ,  $\vec{\tau}$  e  $p$  são a densidade, o vetor velocidade, o tensor de tensões viscosas e a pressão do escoamento, respectivamente,  $\vec{q}$  é o vetor fluxo de calor. A entalpia total específica  $H$  pode ser expressa como função do módulo da velocidade  $\vec{u}$  e a energia interna específica,  $e_i$ :

$$H = e_i + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} |\vec{u}|^2. \quad (4.4)$$

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 [21]:

$$p = \rho R_g T = (\gamma - 1) \rho e_i, \quad (4.5)$$

onde  $R_g$ ,  $T$  e  $\gamma$  são a constante do gás, a temperatura e a razão de calores específicos. A energia interna específica,  $e_i$  é dada por:

$$e_i = C_v T, \quad (4.6)$$

onde  $C_v$  é o calor específico a volume constante.

O vetor fluxo de calor,  $\vec{q}$ , é obtido pela lei de Fourier para condução de calor:

$$\vec{q} = -k\nabla T. \quad (4.8)$$

Para este escoamento admite-se que o fluido de trabalho, ar, comporta-se como fluido Newtoniano. Assim, os componentes do tensor de tensões viscosas são dados por [21]:

$$\tau_{ij} = \mu \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{u}) \delta_{ij} \right], \quad (4.9)$$

onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker.

As equações de Navier-Stokes também podem ser escritas da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0, \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(e + p)u_j - \tau_{ij}u_i + q_j] = 0, \quad (4.12)$$

onde a energia total por unidade de volume,  $e$ , é definida como:

$$e = \rho \left[ e_i + \frac{1}{2} (u_i u_i) \right]. \quad (4.13)$$

#### 4.2.2

#### Equações básicas para modelagem da turbulência

A turbulência é um processo tridimensional complexo que é caracterizado por uma distribuição continua de escalas de flutuação. As maiores escalas turbulentas são caracterizadas, em particular, por forças de inércia no fluido significativamente maiores do que as forças devido à viscosidade.

Em princípio, as equações de Navier-Stokes descrevem ambos os regimes de escoamento laminar e turbulento sem a necessidade de informação adicional. Porém, os escoamentos turbulentos a números de Reynolds elevados abrangem uma ampla faixa de escalas de comprimento e de tempo. As menores escalas de comprimento habituais são muito menores do que as malhas computacionais que

podem ser usadas na prática em uma análise numérica. Assim, a Simulação Numérica Direta (DNS) de escoamentos com altos números de Reynolds requer potência computacional de muitas ordens de grandeza maior que as disponíveis. Para que os efeitos de turbulência sejam preditos sem recorrer a uma malha proibitivamente fina, os modelos de turbulência foram desenvolvidos.

Os modelos de turbulência mais usuais modificam as equações de Navier-Stokes pela introdução de quantidades médias e flutuantes, levando às equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds (RANS). Estas equações descrevem o transporte das quantidades médias do escoamento.

Este procedimento de média introduz termos adicionais, desconhecidos, envolvendo produtos de quantidades flutuantes. Os termos chamados de tensões de Reynolds ou “Turbulentas” necessitam ser modelados para permitir o fechamento das equações de transporte. As propriedades ( $\phi$ ) do escoamento serão divididas em uma componente média e outra flutuante [21, 28].

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \text{ onde } \bar{\phi}' = 0, \quad (4.14)$$

onde  $\bar{\phi}$  é o resultado do operador média sobre  $\phi$ . Este componente média é dado por:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt, \quad (4.15)$$

onde  $\Delta t$  é a escala de tempo, grande em relação às flutuações turbulentas.

No caso de escoamentos em que a densidade flutua sob efeito da turbulência, é recomendado o uso da média ponderada pela densidade, conhecida como média de Favre:

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi''; \tilde{\phi}'' = 0; \tilde{\phi} = \frac{\bar{\rho}\phi}{\bar{\rho}}; \tilde{\phi}'' \neq 0. \quad (4.16)$$

Mediante a utilização destas propriedades de médias, as equações (4.10), (4.11) e (4.12) podem ser reescritas em termos das grandezas médias,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) = 0. \quad (4.18)$$

Das equações (4.17) e (4.18), os termos abertos que requerem hipóteses de fechamento são:

$$\overline{\rho u_i u_j} \rightarrow \text{tensão de Reynolds}, \quad (4.19)$$

que representa os efeitos da turbulência e envolve correlações de segunda ordem entre propriedades flutuantes.

O processo de análise do escoamento adotado consiste em derivar novas equações de transporte para os termos abertos (tensões ou fluxos de Reynolds), o que passa pela utilização das equações de Navier-Stokes. Estes modelos, os quais são frequentemente chamados de modelos de fechamento de segunda ordem, são apropriados para a modelagem de escoamentos complexos.

Assim, por simplicidade, ao invés de derivar equações de transporte tanto para as tensões, fluxos e taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, estes termos são modelados utilizando-se o conceito de viscosidade turbulenta introduzida por Boussinesq [6, 21]. Através deste conceito se assume que, em analogia às tensões viscosas presentes em escoamentos laminares, as tensões turbulentas são proporcionais ao gradiente da velocidade média.

O conceito de viscosidade turbulenta foi concebido presumindo uma analogia entre o movimento molecular e o movimento turbulento. Assim, usando-se a definição de viscosidade molecular (ou absoluta),  $\mu_l$ , a qual indica que esta é resultante da transferência de quantidade de movimento resultante da colisão de moléculas, ( $\mu_l = \rho c l$ ), onde  $c$  é a velocidade do som e  $l$  é o livre caminho médio entre colisões; de forma análoga, a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , é definida como sendo resultante da transferência de quantidade de movimento da colisão de turbilhões turbulentos, podendo ser estimada como:

$$\mu_t \approx \rho V_C L_C, \quad (4.20)$$

onde  $V_C$  e  $L_C$  são a velocidade e o comprimento característicos do movimento turbulento respectivamente.

Os modelos de viscosidade turbulenta são baseados na hipótese de Boussinesq, que relaciona as tensões turbulentas às taxas de deformações e aos gradientes das propriedades médias [6, 21].

$$-\overline{\rho u_i u_j} = \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij}, \quad (4.21)$$

onde  $\mu_t$  é o coeficiente de viscosidade turbulenta e  $k$  é a energia cinética média de turbulência. Assim, esta abordagem requer somente a determinação do valor da viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , ao invés dos termos das tensões e fluxos de Reynolds.

Os modelos de viscosidade turbulenta são distinguidos pela maneira como são prescritas a viscosidade e difusividade turbulentas. Neste trabalho, somente serão apresentados aqueles modelos que foram utilizados para a determinação da viscosidade turbulenta, com os modelos  $\kappa$ - $\varepsilon$  e SST [21].

#### 4.2.2.1 Modelo de turbulência k- $\varepsilon$

Este modelo introduz duas novas variáveis no sistema de equações,  $k = \frac{1}{2} \overline{(u'_j u'_j)}$ , a energia cinética do movimento turbulento e  $\varepsilon = \nu \overline{\left( \frac{\partial u'_j}{\partial x_j} \right)^2}$ , a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta [6, 21].

Com estas duas propriedades do escoamento, formula-se uma viscosidade turbulenta relacionada à energia cinética turbulenta ( $k$ ) e à taxa de dissipação de  $k$ , ( $\varepsilon$ ) como segue:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.22)$$

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

#### 4.2.2.2 Modelo de turbulência de Transporte de Tensão Cisalhante-SST

Este modelo de turbulência é baseado na formulação k- $\omega$  com tratamento perto das paredes para cálculos à números de Reynolds baixos. O modelo não envolve as funções não lineares complexas requeridas para o modelo k- $\varepsilon$  e, entretanto, é mais exato e robusto. Este modelo assume que a viscosidade turbulenta  $\mu_t$  é relacionada à energia cinética turbulenta,  $k$ , à frequência de turbulência,  $\omega$ , e à densidade  $\rho$ , segundo a relação [6]:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (4.23)$$

O modelo SST, baseado no modelo  $k-\omega$ , é resultado da inclusão de efeitos de transporte do tensor de tensões na formulação da viscosidade turbulenta. Este modelo é recomendado para simulações de camadas limites de alta acurácia, e para escoamentos de cisalhamento livre.

### 4.3 Condições de contorno e iniciais

Na **Figura 4.1** se mostra a numeração das faces das fronteiras indicando as condições de contorno definidas para os casos de jato livre e de escoamento com obstáculo. A **Tabela 4.1** traz uma descrição detalhada das diferentes condições de contorno adotadas para a velocidade e quantidades turbulentas.

A fronteira “Air External” (Face 1) é a seção limitada entre a fronteira lateral do domínio e do duto de ar anular. Nesta região o escoamento é afetado pelo processo de “entrainment”.

A fronteira “Air External 1” (Face 2) é uma fronteira de entrada na qual a pressão estática é fixada.

A fronteira “Air External 2” (Face 3) corresponde à saída do escoamento do domínio computacional na qual a pressão estática é prescrita.

A fronteira “Air Inlet” (Face 4) corresponde ao ingresso de ar anular com uma velocidade média de 1,5 m/s no caso de escoamento com obstáculo, e 2 cm/s no caso de escoamento de jato livre.

A fronteira “Axis” (Face 5) corresponde ao eixo de simetria do escoamento.

A fronteira “Burner Wall” (Face 6) é a face do queimador tipo obstáculo, a qual foi suposta uma parede lisa sem deslizamento.

As fronteiras “Domain Interface1 Side 1” (Face 7) e “Domain Interface 2 Side 2” (Face 8) são os planos de simetria.

A fronteira “Jet Inlet” (Face 9) é a entrada do jato central, na qual foi atribuída a velocidade média de 27,4 m/s.

Condições iniciais são necessárias por se tratar de um cálculo transiente. Foram assumidas as seguintes condições:

- Componentes de velocidade  $(U,V,W)=(0,10^{-3},0)$ , em m/s.
- Pressão estática relativa de 0 Pa.

- A intensidade turbulenta de 0,01 e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta foi iniciada em modo automático em 0,001.

**Tabela 4.1** – Resumo das configurações realizadas nas condições de contorno com o software CFX10.

Condição contorno			Regime	Equação Massa - Momento	Turbulência
Nome	Tipo	Localização			
Air External	Inlet	Zona 3	subsônico	Veloc. na Direção Y: 0,001 m/s	Gradiente zero
Air External 1	Inlet	Zona 4	subsônico	Pressão total: 0 Pa	Gradiente zero
Air External 2	Outlet	Topo	subsônico	Pressão estática: 0 Pa	Gradiente zero
Air Inlet	Opening (Caso Jato Livre)	Zona 2	subsônico	Veloc. Normal=0,02 m/s.	Gradiente zero
	Inlet (Caso Jato Bluff-Body)		subsônico	Veloc. Normal=1,5 m/s.	Pressão total estável (0 Pa)
Axis	Simetria	Eixo	-	-	-
Burner Wall	Wall	Zona 1	-	Influencia parede no escoamento: sem deslizamento	-
Domain Interface 1 Side 1	Interface	Sim 1	-	Fluxo conservativo de interface	Fluxo conservativo de interface
Domain Interface 1 Side 2	Interface	Sim 2	-	Fluxo conservativo de interface	Fluxo conservativo de interface
Jet Inlet	Inlet	Zona 0	subsônico	Veloc. Normal =27,4 m/s	Baixa (Intensidade: 1%)
Domain Interface 1	Periodico	Inerte Sim 1 e Sim 2	Metodo conexão automático	Periodicidade: Rotacional	-
				Def. Eixos: Rotação	-
				Eixo: Y	-

#### 4.4

#### Metodologia numérica de discretização da malha

O método numérico que utiliza o programa ANSYS/CFX é baseado na resolução das **equações (3.17) e (3.18)** e a equação da energia num problema tridimensional. Mediante a conversão em um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidos numericamente. A técnica de resolução destas equações é

baseada no método de discretização de volumes finitos marchando plano a plano, de montante para jusante. 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 as variáveis.
- Linearização das equações discretizadas e solução do sistema de equações resultante, a fim de atualizar os valores das variáveis dependentes.

Todo problema de valor inicial requer um esquema de avaliação temporal para iniciar um método numérico de regime transiente. Foi utilizado o método de Euler Implícito de segunda ordem, o qual é um método de dois níveis de precisão da função da serie de Taylor para a variável dependente do tempo, que permitirá iniciar a interpolação dos valores nas faces dos elementos que requer todo processo de discretização da equação de conservação de quantidade de movimento.

O ANSYS/CFX armazena os valores discretos de um escalar qualquer no centro dos elementos. Mas como todo processo de discretização das equações governantes, valores na face dos elementos são requeridos para os termos de convecção e difusão; assim foi usado o esquema de Upwind de alta ordem. O termo “upwind” significa que os valores das propriedades na face do elemento são derivados a partir das quantidades no elemento a montante, ou “upwind”, relativo à direção da velocidade normal à face.