

4

Modelagem Matemática e Método Numérico

Neste capítulo serão descritos a modelagem matemática e o método numérico utilizados no presente trabalho. Inicialmente será apresentada a forma final das equações governantes utilizadas nas simulações do escoamento e da dispersão do poluente através do programa computacional Fluent (versão 6.0.12). Em seguida são apresentados os procedimentos utilizados para a solução das equações.

Baseando-se nas informações apresentadas no capítulo anterior, as equações descrevendo os fenômenos físicos envolvidos neste problema foram escritas usando o conceito da média de Reynolds. Para a descrição das componentes do tensor de Reynolds, foram comparadas modelagens que utilizam a analogia de Boussinesq àquelas que utilizam as equações de transporte para o cálculo das tensões de Reynolds. Como foi visto anteriormente, diversos autores descrevem as vantagens da utilização deste tipo de modelagem sobre aquelas baseadas na viscosidade turbulenta. Porém, devido ao elevado esforço computacional associado ao modelo de tensões de Reynolds, muitos destes autores consideram a sua utilização atualmente impraticável para a solução de problemas de engenharia. Considerando o aumento da capacidade dos computadores disponíveis atualmente e as técnicas numéricas que permitem maior velocidade de convergência das soluções, é de relevante importância se investigar e comparar o desempenho deste tipo de modelagem na predição de escoamentos tridimensionais envolvendo topografias complexas, representando escoamentos atmosféricos em escala de laboratório.

Outro importante aspecto é que o problema a ser investigado apresenta características que estão relacionadas com algumas das principais deficiências do modelo $k-\varepsilon$. Os escoamentos sobre topografias complexas a serem investigados apresentam curvatura, gradiente adverso de pressão bem como separação no escoamento. Além disso, no estudo de condições atmosféricas estáveis, as forças de corpo (empuxo) apresentam papel relevante. Estas características não favorecem a

utilização do modelo $k - \varepsilon$ e ao mesmo tempo, encorajam a aplicação do modelo das tensões de Reynolds, apesar do desafio representado pelo alto esforço computacional associado à sua utilização em um escoamento tridimensional complexo.

Diversos trabalhos têm apresentado modificações no modelo $k - \varepsilon$ para corrigir deficiências como as que foram citadas no parágrafo anterior. Em muitos desses trabalhos foram obtidos muito bons resultados com tais modificações. Entretanto, muitas vezes essas modificações precisam ser ajustadas dependendo da situação específica em que são aplicadas. Dessa forma, entende-se que o modelo de tensões de Reynolds representa uma opção mais promissora devido a sua maior generalidade em relação aos modelos $k - \varepsilon$ modificados.

Para a definição dos demais fluxos turbulentos, aqueles associados às temperaturas e concentrações, foram utilizados modelos de difusividade turbulenta isotrópica. Foi considerado nesta decisão o fato de que a modelagem desses fluxos turbulentos através de equações de transporte individuais para as suas componentes implicaria em um aumento considerável no esforço computacional envolvido. Além disso, como estas opções não estavam disponibilizadas no programa computacional utilizado (Fluent, versão 6.0.12), seria necessário investir-se considerável tempo na elaboração, implementação e validação das rotinas necessárias.

Alguns trabalhos mais recentes (Boçon e Maliska, 2000) relatam a utilização de modelos de difusividade turbulenta anisotrópica para o cálculo da dispersão turbulenta do poluente. A opção de empregar diferentes valores para as difusividades turbulentas nas diferentes direções não está disponível no Fluent (versão 6.0.12), e nem é possível através da inclusão no código computacional de uma rotina própria do usuário, conforme orientação do fabricante.

Com relação ao tratamento da turbulência na região próxima às paredes sólidas, são apresentadas as equações utilizadas com a Lei da Parede e também aquelas relativas à modelagem com um tratamento em duas camadas. Como os escoamentos sobre topografias complexas podem apresentar separação no escoamento, foi testada uma abordagem alternativa à lei da parede para a modelagem da turbulência na região próxima à parede e os resultados obtidos foram comparados.

Em problemas envolvendo a simulação de escoamentos atmosféricos em escala real é comum se observar modificações nas equações de conservação normalmente utilizadas na mecânica de fluidos, para a representação de características especiais destes tipos de escoamentos (atmosféricos). Como as investigações computacionais realizadas no presente trabalho estão relacionadas a simulações de experimentos de dispersão em escala reduzida (túnel de vento), algumas dessas modificações não se aplicam ou não são necessárias nos problemas ora estudados. A dedução das equações de mecânica dos fluidos comumente utilizadas para escoamentos atmosféricos em escala real podem ser encontradas em Seinfeld e Pandis (1998) – Capítulo 16.

Finalmente, concluindo o conteúdo do presente capítulo, são descritos os procedimentos para a solução das equações governantes.

4.1. Modelagem Matemática

4.1.1. Equação de Conservação de Massa

A equação de conservação de massa na forma média temporal, em regime permanente, pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (4.1)$$

4.1.2. Equações de Conservação da Quantidade de Movimento Linear

As equações de conservação da quantidade de movimento linear para escoamentos turbulentos, em regime permanente, desprezando a força de Coriolis, obtidas a partir da média temporal das equações de Navier-Stokes, resultam em:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right] - \overline{(\rho u_j)' u_i'} \right\} + \rho g_i \quad (4.2)$$

A equação (4.2) tem a mesma forma do balanço de quantidade de movimento linear para o caso laminar com as velocidades agora representando valores de média temporal (ou escoamento médio) e um termo adicional que representa o efeito de turbulência incorporado através das “tensões de Reynolds”, $\overline{(\rho u_j)' u_i'}$.

Diferentemente do que é usualmente feito em simulações de escoamentos atmosféricos não foi utilizada a aproximação de Boussinesq na representação dos termos envolvendo a densidade. Na modelagem empregada, foi considerado que a densidade (ρ) varia (não tem valor constante) em todos os termos em que ela está presente, e é calculada de acordo com a seguinte expressão:

$$\rho = \frac{M_{ar} p_{atm}}{R \theta} \quad (4.3)$$

onde p_{atm} é a pressão atmosférica, M_{ar} é a massa molecular do ar, \bar{R} é a constante universal dos gases e θ é a temperatura potencial. Considerando que o presente trabalho visa a simulação computacional das condições presentes no experimento em túnel de vento (Ohba, R., apud Boçon, 1998), a variação da pressão atmosférica ao longo da direção vertical foi desprezada devido à pequena altura do túnel de vento (1 metro).

A abordagem para o tratamento da densidade utilizada no presente trabalho deve ser aplicada com cuidado, principalmente em condições instáveis onde significativas variações de densidade podem levar à dificuldade de convergência da solução numérica. A aproximação de Boussinesq é recomendada em tais situações.

4.1.3. Equação de Conservação de Energia

Assumindo o regime permanente, considerando a inexistência de fontes de calor e desprezando os efeitos de dissipação viscosa (devido às baixas velocidades envolvidas), o campo de temperatura potencial é obtido através da solução da equação de conservação de energia:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial h}{\partial x_i} \right] + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (4.4)$$

Vale ressaltar aqui que como os problemas que investigamos no presente trabalho estão relacionados a simulações em escala de túnel de vento, a escolha entre utilizar a temperatura termodinâmica ou a temperatura potencial é praticamente indiferente, já que no espaço de 1 metro (que é a altura do túnel de vento) a variação da temperatura termodinâmica com a altura, devido a efeitos gravitacionais, pode ser desprezada. Dessa forma assumimos que $\theta = T$ e a entalpia h é definida como:

$$h = \int_{\theta_{ref}}^{\theta} c p_{ar} d\theta \quad (4.5)$$

ou

$$h = \int_{T_{ref}}^T c p_{ar} dT$$

$c p_{ar}$ é o calor específico do ar e o número de Prandtl turbulento especificado é $Pr_t = 0,5$ (Boçon, 1998).

4.1.4. Equação de Transporte das Espécies Químicas

Na modelagem da conservação das espécies químicas, é calculada a fração de massa local para cada espécie, m_l , através da solução de uma equação de

conservação para a espécie l . Assumindo o regime permanente, a equação de transporte das espécies químicas para o escoamento turbulento fica:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_l) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial m_l}{\partial x_i} \right] + S \quad (4.6)$$

onde o número de Schmidt turbulento especificado é $Sc_t = 0,5$ (Boçon, 1998).

Uma equação dessa forma será resolvida para N-1 espécies onde N é o número total de espécies químicas presentes no sistema. Como a soma das frações mássicas de todas as espécies tem que ser igual a 1, a fração mássica da enésima espécie é calculada a partir dos valores conhecidos das outras N-1 espécies.

4.1.5. O Modelo k-ε de Turbulência

O modelo k-ε de turbulência é um modelo no qual assume-se que as tensões de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média, sendo a viscosidade turbulenta, μ_t , a constante de proporcionalidade. Esta suposição, conhecida como analogia de Boussinesq, provê a seguinte expressão para as tensões de Reynolds:

$$-\overline{(\rho u_j)' u_i'} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\mu_t \frac{\partial u_l}{\partial x_l} + \frac{\rho}{2} \overline{u_l'^2} \right) \quad (4.7)$$

A energia cinética turbulenta, k , é definida como:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} \quad (4.8)$$

A equação (4.7) para as tensões de Reynolds é análoga àquela que descreve as tensões de cisalhamento que aparecem no escoamento laminar, com a viscosidade turbulenta μ_t fazendo o mesmo papel que a viscosidade molecular μ . Nas equações

de conservação da quantidade de movimento linear obtidas através da média de Reynolds, μ é substituído pela viscosidade efetiva, μ_{ef} :

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad (4.9)$$

A viscosidade turbulenta μ_t é dada por:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.10)$$

onde $C_\mu = 0,09$ é uma constante de proporcionalidade definida empiricamente (Launder e Spalding, 1974).

Os valores de k e ε requeridos na equação (4.10) são obtidos a partir das seguintes equações de conservação considerando-se o regime permanente:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + P_k + G_k - \rho \varepsilon \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (P_k + G_k) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.12)$$

onde $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$ são constantes empíricas, σ_k e σ_ε são os números de Prandtl governando a difusão turbulenta de k e ε , P_k é a taxa de produção de energia cinética turbulenta e G_k é a geração de energia cinética turbulenta por efeitos de empuxo, definidos por:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (4.13)$$

$$G_k = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \tag{4.14}$$

Os coeficientes $C_{1\epsilon} = 1,44$, $C_{2\epsilon} = 1,92$, $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\epsilon = 1,3$ são valores determinados empiricamente (Launder e Spalding, 1974).

4.1.6. O Modelo de Tensões de Reynolds

O modelo de Tensões de Reynolds envolve o cálculo das tensões de Reynolds individuais, $\overline{u_i' u_j'}$, através de equações de transporte diferenciais (seção 2.2.1.3):

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k' \overline{u_i' u_j'})}_{C_{ij} \equiv \text{Convecção}} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} [\rho \overline{u_i' u_j' u_k'} + p' (\delta_{kj} u_i' + \delta_{ik} u_j')] }_{D_{T,ij} \equiv \text{Difusão Turbulenta}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial}{\partial x_l} (\overline{u_i' u_j'}) \right]}_{D_{L,ij} \equiv \text{Difusão Molecular}} +$$

$$\underbrace{-\rho \left(\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial u_j'}{\partial x_k} + \overline{u_j' u_k'} \frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \right)}_{P_{ij} \equiv \text{Produção de Tensão}} - \underbrace{\rho \beta (g_i \overline{u_j' \theta'} + g_j \overline{u_i' \theta'})}_{G_{ij} \equiv \text{Empuxo}} + \underbrace{p' \left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} \right)}_{\phi_{ij} \equiv \text{Pressão-Deform.}} - \underbrace{2\mu \frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial u_j'}{\partial x_k}}_{\epsilon_{ij} \equiv \text{Dissipação}}$$

(4.15)

Entre os vários termos acima, C_{ij} , $D_{L,ij}$ e P_{ij} não necessitam modelagem. Contudo, os termos $D_{T,ij}$, G_{ij} , ϕ_{ij} , ϵ_{ij} necessitam de modelagem para fechar as equações. Os itens a seguir descrevem as modelagens adotadas para estes termos.

4.1.6.1. Modelagem do Termo de Transporte Difusivo Turbulento

Segundo Lien e Leschziner (1994), $D_{T,ij}$ é modelado como

$$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{Pr_k} \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k} \right) \quad (4.16)$$

onde $Pr_k = 0,82$

4.1.6.2. Modelagem do Termo de Pressão-Deformação

A abordagem para modelar ϕ_{ij} (Gibson e Launder, 1978 e Launder, 1989) utiliza a seguinte decomposição

$$\phi_{ij} = \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} + \phi_{ij,w} \quad (4.17)$$

$$\phi_{ij,1} \equiv -C_1 \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} \left[\overline{u_i' u_j'} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right] \quad (4.18)$$

$$\phi_{ij,2} \equiv -C_2 \left[(P_{ij} + F_{ij} + G_{ij} - C_{ij}) - \frac{2}{3} \delta_{ij} (P + G - C) \right] \quad (4.19)$$

onde $C_2 = 0,6$, P_{ij} , F_{ij} , G_{ij} e C_{ij} são definidos conforme a equação (4.15).

$$P = \frac{1}{2} P_{kk}, \quad G = \frac{1}{2} G_{kk} \quad \text{e} \quad C = \frac{1}{2} C_{kk}.$$

O termo de reflexão de parede $\phi_{ij,w}$ é responsável pela redistribuição das tensões normais próximas à parede. Este termo é modelado como:

$$\begin{aligned} \phi_{ij,w} \equiv & C_1' \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{u_k' u_m' n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{u_i' u_k' n_j n_k} - \frac{3}{2} \overline{u_j' u_k' n_i n_k} \right) \frac{k^{3/2}}{C_1 \varepsilon d} + \\ & + C_2' \left(\phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ik,2} n_j n_k - \frac{3}{2} \phi_{jk,2} n_i n_k \right) \frac{k^{3/2}}{C_1 \varepsilon d} \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde $C_1' = 0,5$, $C_2' = 0,3$, n_k é o componente x_k do vetor unitário normal à parede, d é a distância normal à parede, e $C_l = C_\mu^{3/4} / \kappa$, onde $C_\mu = 0,09$ e κ é a constante de Von Kármán (=0,4187).

4.1.6.3. Modelagem do Termo de Empuxo

Os termos de produção devido ao empuxo são modelados como

$$G_{ij} = \beta \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(g_i \frac{\partial \theta}{\partial x_j} + g_j \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right) \tag{4.21}$$

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento para energia, com o valor 0,85. β é o coeficiente de expansão térmica. Como o ar foi considerado um gás ideal, β foi calculado como $\beta = \frac{1}{\theta}$.

4.1.6.4. Modelagem da Energia Cinética Turbulenta

Quando a energia cinética turbulenta é necessária para a modelagem de um termo específico, ela é obtida tomando-se o traço do tensor das tensões de Reynolds:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} \tag{4.22}$$

Para a obtenção das condições de contorno para as tensões de Reynolds a equação de transporte para a energia cinética turbulenta (equação (4.11)) é resolvida e os valores de k calculados nas células adjacentes à parede são utilizados através das expressões que são apresentadas em (4.34) para o cálculo das tensões de Reynolds junto às paredes.

4.1.6.5.**Modelagem do Termo de Dissipação da Energia Cinética Turbulenta**

O tensor de dissipação é modelado como

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \delta_{ij} (\rho \varepsilon) \quad (4.23)$$

O escalar taxa de dissipação, ε , é calculado com a equação de transporte para ε (equação (4.12)).

4.1.6.6.**Modelagem da Viscosidade Turbulenta**

A viscosidade turbulenta é calculada conforme a equação (4.10).

4.1.7.**Tratamento da Turbulência na Região da Parede**

O tratamento da turbulência para as variáveis dependentes na parede foi considerado através de duas diferentes abordagens: a lei logarítmica de parede e tratamento em duas camadas.

4.1.7.1.**Lei da Parede**

A lei da parede para a velocidade média produz

$$U^* = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^*) \quad (4.24)$$

onde

$$U^* \equiv \frac{U_p C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{\tau_w / \rho} \quad (4.25)$$

$$y^* \equiv \frac{\rho C_\mu^{1/4} k_p^{1/2} y_p}{\mu} \quad (4.26)$$

onde κ corresponde à constante de Von Karman, E é uma constante empírica ($\approx 9,81$), U_p corresponde à velocidade média do fluido no ponto p , k_p é a energia cinética turbulenta no ponto p , y_p é a distância do ponto p à parede e μ é a viscosidade dinâmica do fluido.

No programa computacional utilizado, a lei logarítmica é empregada quando $y^* > 11,225$.

Quando a malha é tal que $y^* < 11,225$ nas células adjacentes à parede, é aplicada a relação laminar de tensão-deformação que pode ser escrita como

$$U^* = y^* \quad (4.27)$$

Energia

Como na lei da parede para a velocidade média, a lei da parede para a temperatura potencial empregada compreende duas diferentes leis:

- Lei linear para sub-camada térmica de condução, onde a condução é importante
- Lei logarítmica para a região turbulenta, onde os efeitos de turbulência dominam o transporte de energia

A lei da parede para a temperatura potencial tem a seguinte forma:

$$\theta^* \equiv \frac{(\theta_w - \theta_p) \rho c_p C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{\dot{q}''} = \begin{cases} \text{Pr} y^* & (y^* < y_\theta^*) \\ \text{Pr}_t \left[\frac{1}{\kappa} \ln(Ey^*) + P \right] & (y^* > y_\theta^*) \end{cases} \quad (4.28)$$

onde P é calculado pelo uso da fórmula recomendada por Jayatilleke (1969):

$$P = 9,24 \left(\left(\frac{\text{Pr}}{\text{Pr}_t} \right)^{3/4} - 1 \right) \left[1 + 0,28 e^{-0,007 \text{Pr}/\text{Pr}_t} \right] \quad (4.29)$$

k_f é a condutividade térmica do fluido, ρ corresponde à densidade do fluido, c_p é o calor específico do fluido, \dot{q}'' corresponde ao fluxo de calor na parede, θ_p é a temperatura potencial na célula adjacente à parede, θ_w corresponde à temperatura potencial na parede, Pr é o número de Prandtl molecular, Pr_t corresponde ao número de Prandtl turbulento (0,85 na parede), A é a constante de Van Driest (= 26), κ é a constante de von Karman e E é uma constante da função de parede.

A espessura adimensional da sub-camada térmica, y_θ^* , na equação (4.28), é calculada como o valor de θ^* no qual a lei linear e a lei logarítmica se interceptam, dado o número de Prandtl molecular do fluido que está sendo modelado.

O procedimento de aplicar a lei da parede para a temperatura potencial é descrito a seguir. Uma vez que as propriedades do fluido sendo modelado são especificadas, seu número de Prandtl molecular é calculado. Então, dado o número de Prandtl molecular, a espessura da sub-camada térmica, y_θ^* , é calculada a partir da interseção dos perfis logarítmico e linear, e armazenada.

Durante a iteração, dependendo do valor de y^* na célula próxima à parede, o perfil linear ou o perfil logarítmico é aplicado na equação (4.28) para calcular a temperatura potencial da parede θ_w ou o fluxo de calor \dot{q}'' (dependendo do tipo de condição de contorno térmica).

Espécies

Ao utilizar funções de parede para o transporte de espécies químicas, o programa assume que o transporte das espécies se comporta de maneira análoga à transferência de calor. De forma similar à equação (4.28), a Lei da Parede para as espécies pode ser expressa como (considerando propriedades constantes e dissipação viscosa desprezível):

$$Y^* \equiv \frac{(Y_{i,w} - Y_i) \rho C_\mu^{1/4} k_p^{1/2}}{J_{i,w}} = \begin{cases} Sc y^* & (y^* < y_c^*) \\ Sc_t \left[\frac{1}{\kappa} \ln(E y^*) + P_c \right] & (y^* > y_c^*) \end{cases} \quad (4.30)$$

onde Y_i é a fração mássica local da espécie, Sc e Sc_t são os números de Schmidt molecular e turbulento, e $J_{i,w}$ é o fluxo difusivo da espécie i na parede. Os valores de P_c e y_c^* são calculados de uma forma similar a P e y_t^* , com as diferenças que os números de Prandtl são sempre substituídos pelos correspondentes números de Schmidt.

Turbulência

No modelo $k - \varepsilon$ empregado, a equação para k é resolvida em todo o domínio inclusive nas células adjacentes à parede. A condição de contorno para k nas paredes é

$$\frac{\partial k}{\partial n} = 0 \quad (4.31)$$

onde n é a coordenada local normal à parede. Como na camada próxima à parede a tensão cisalhante é constante então k também é constante.

A produção de energia cinética P_k e sua taxa de dissipação (ε) nas células adjacentes à parede, que são os termos fontes na equação de k , são calculados com

base na hipótese de equilíbrio local. Sob esta suposição, assume-se que a produção de k e sua taxa de dissipação são iguais nos volumes de controle adjacentes à parede.

Assim, a produção de k é calculada por

$$P_k \approx \tau_w \frac{\partial U}{\partial y} = \tau_w \frac{\tau_w}{\kappa \rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y_P} \quad (4.32)$$

e ε é calculado por

$$\varepsilon_P = \frac{C_\mu^{3/4} k_P^{3/2}}{\kappa y_P} \quad (4.33)$$

A equação de ε não é resolvida nas células adjacentes à parede, ao invés disso, é calculada usando a equação (4.33).

Os valores das tensões de Reynolds próximos às paredes são calculados a partir de funções de parede. Condições de contorno para as tensões de Reynolds são aplicadas explicitamente a partir da lei logarítmica e a hipótese de equilíbrio local da turbulência, desprezando a convecção e a difusão nas equações de transporte para as tensões. Usando um sistema de coordenadas local, onde τ é a coordenada tangencial, η é a coordenada normal e λ é a coordenada binormal, as tensões de Reynolds nas células adjacentes às paredes são calculadas por

$$\frac{\overline{u_\tau^2}}{k} = 1,098 \quad , \quad \frac{\overline{u_\eta^2}}{k} = 0,247 \quad , \quad \frac{\overline{u_\lambda^2}}{k} = 0,655 \quad , \quad -\frac{\overline{u_\tau u_\eta}}{k} = 0,255 \quad (4.34)$$

4.1.7.2. Modelo de Duas Camadas

No modelo de duas camadas o domínio computacional é subdividido em duas regiões, a região afetada pela viscosidade e a região totalmente turbulenta. A

demarcação das duas regiões é determinada por um número de Reynolds turbulento baseado na distância da parede.

$$Re_y \equiv \frac{\rho y \sqrt{k}}{\mu} \quad (4.35)$$

onde y corresponde à distância normal da parede ao centro da célula.

Para a sua utilização, a malha perto da parede deve ser fina o suficiente para resolver a subcamada viscosa ($y^+ \approx 1$). A recomendação do fabricante (Fluent User's Guide, 2003) é que deve-se garantir a presença de no mínimo 10 células (na direção normal à parede) na região afetada pela viscosidade ($Re_y < 200$) para se resolver a velocidade média e as quantidades turbulentas em tal região.

Na região totalmente turbulenta, $Re_y > Re_y^*$, onde $Re_y^* = 200$, o modelo $k - \varepsilon$ é empregado. Na região próxima a parede, $Re_y < Re_y^*$, o modelo de uma equação de Wolfstein (1969) é utilizado. No modelo de uma equação, as equações de quantidade de movimento e a equação de energia cinética turbulenta (equação (4.11)) são resolvidas normalmente, mas a equação da viscosidade turbulenta é calculada como:

$$\mu_{t,2layer} = \rho C_\mu l_\mu \sqrt{k} \quad (4.36)$$

onde o comprimento de escala l_μ , de acordo com Chen e Patel (1988) é obtido de:

$$l_\mu = y c_l \left(1 - \exp \frac{-Re_y}{A_\mu} \right) \quad (4.37)$$

A viscosidade turbulenta é suavemente ajustada através de uma média ponderada da viscosidade turbulenta obtida pelo modelo de duas camadas (região

afetada pela viscosidade) e da camada totalmente turbulenta. Para isto se utiliza uma função de ponderação, λ_ε , proposta por Jongen (1992).

$$\mu_{t,ajuste} = \lambda_\varepsilon \mu_t + (1 - \lambda_\varepsilon) \mu_{t,2cam} \quad (4.38)$$

onde μ_t é para número de Reynolds alto, obtido da equação (4.10) e $\mu_{t,2cam}$ é obtido da equação (4.36). A função de ponderação, λ_ε é definida de forma que seja igual a 1 nas posições mais afastadas da parede e igual a zero bem próximo desta. O objetivo principal da função de ponderação é prevenir problemas de convergência quando a solução obtida com o $k-\varepsilon$ na camada externa não se igualar àquela obtida com a formulação na camada interna.

$$\lambda_\varepsilon = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\text{Re}_y - \text{Re}_y^*}{A} \right) \right] \quad (4.39)$$

A constante A, determina a largura da função de ponderação, de forma que o valor da função de ponderação estará dentro de 1% do valor do campo externo dando uma variação de ΔRe_y . Tipicamente, ΔRe_y assumirá um valor entre 5 e 20%.

$$A = \frac{|\Delta \text{Re}_y|}{\tanh(0.98)} \quad (4.40)$$

O campo da taxa de dissipação de turbulência é obtido da seguinte expressão:

$$\varepsilon = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l_\varepsilon} \quad (4.41)$$

onde o comprimento de escala l_ε , de acordo com Chen & Patel (1988) é obtido de:

$$l_\varepsilon = y c_l \left(1 - \exp \frac{-\text{Re}_y}{A_\varepsilon} \right) \quad (4.42)$$

As constantes utilizadas, de acordo com Chen & Patel (1988) são:

$$c_l = \kappa C_\mu^{-3/4}, \quad A_\mu = 70, \quad A_\varepsilon = 2c_l,$$

Se todo o domínio estiver dentro da região afetada pela viscosidade, $\text{Re}_y < 200$, ε não será obtido resolvendo as equações de transporte, equação (4.12), e sim obtido algebricamente pela equação (4.41).

A lei da parede laminar é determinada a partir da seguinte expressão

$$u_{lam}^+ = y^+ \quad (4.43)$$

A condição de contorno para a energia cinética turbulenta é a mesma utilizada para a lei logarítmica da parede. Porém a produção da energia cinética turbulenta P_k é calculada usando os gradientes de velocidade que são consistentes com o modelo de duas camadas.

4.2. Método Numérico

Foi utilizada a técnica de volumes de controle para resolver as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia, espécies químicas e quantidades turbulentas descritas nas seções precedentes. Esta técnica consiste de:

- Divisão do domínio em volumes de controle discretos
- Integração das equações governantes nos volumes de controles individualmente para construir as equações algébricas para incógnitas discretas (velocidade, pressão, escalares)

- Solução das equações discretizadas

A discretização das equações diferenciais e as técnicas usadas pelo programa computacional para resolvê-las são brevemente descritas nesta seção.

4.2.1.

A Técnica de Volume de Controle

Foi utilizada uma técnica baseada em volume de controle para converter as equações diferenciais de conservação em equações algébricas que podem ser resolvidas numericamente. Esta técnica consiste na integração das equações diferenciais sobre cada volume de controle, gerando uma equação de diferenças finitas que conserva cada quantidade com base no volume de controle.

O mesmo volume de controle é empregado para a integração de todas as equações de conservação e todas as variáveis (pressão, componentes cartesianos da velocidade e todos os escalares) são armazenadas no centro do volume de controle.

4.2.2.

Esquema de Interpolação

O Fluent (versão 6.0.12) utiliza um esquema co-localizado, no qual os valores de pressão e velocidade são, ambos, armazenados no centro das células. Um esquema de interpolação é utilizado para calcular os valores de pressão nas faces a partir dos valores no centro das células. O esquema utilizado interpola os valores de pressão e também as velocidades nas faces utilizando os coeficientes da equação de quantidade de movimento, em um procedimento similar ao apresentado por Rhie e Chow (1983).

Para as demais variáveis do problema o esquema de interpolação Power Law (Patankar, 1980) foi utilizado.

4.2.3.

O Algoritmo de Acoplamento Pressão-Velocidade: SIMPLE

No processo de solução sequencial utilizado, uma equação descrevendo a atualização da pressão é necessária, e não está explicitamente disponível através do balanço de massa ou de conservação da quantidade de movimento. A família de algoritmos SIMPLE (Patankar, 1980) é baseada na utilização de uma relação entre correções de velocidade e pressão de forma a reorganizar a equação de continuidade em termos de um cálculo de correção de pressão.

4.2.4.

O Procedimento Iterativo de Solução

O algoritmo SIMPLE descrito acima relaciona os campos de velocidade e pressão que satisfazem as equações linearizadas de conservação da quantidade de movimento e continuidade em um ponto. Devido ao fato de que o programa não resolve as equações em todos os pontos simultaneamente, e porque as equações são acopladas e não lineares, um procedimento iterativo de solução é necessário com iterações contínuas até que todas as equações sejam satisfeitas em todos os pontos.

Cada iteração do procedimento de solução do programa consiste dos seguintes passos:

- As equações de conservação de quantidade de movimento para u_1, u_2, u_3 são resolvidas usando o campo de pressão estimado, p^* .
- A equação de correção de pressão (balanço de massa) é resolvido para obter as correções necessárias ao campo de pressão. Ajustes correspondentes são feitos aos componentes de velocidade.
- As equações de k e ε são resolvidas utilizando o campo de velocidade atualizado para obter a distribuição da viscosidade efetiva e tensões de Reynolds.
- A equação de conservação de energia é resolvida utilizando os valores previamente atualizados das outras variáveis.
- As propriedades do fluido são atualizadas.

4.2.5. Solução das Equações

A equação algébrica a ser resolvida para uma variável ϕ em um ponto P pode ser escrita como (Patankar, S., V., 1980):

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (4.44)$$

onde o subscrito nb representa os valores vizinhos. Para cada incógnita ϕ uma equação desta forma deve ser resolvida em todos os pontos do domínio. Para a solução do sistema de equações é utilizado o método Gauss-Seidel em conjunto com um método multigrid para aceleração da convergência (Fluent User's Guide, 2003).

4.2.6. Critério de Convergência

Durante o processo iterativo para resolver as equações diferenciais, dois critérios são verificados para assegurar a convergência e o processo iterativo continua até que ambos os critérios sejam satisfeitos.

O primeiro critério utilizado envolve o cálculo dos valores do resíduo $R(\phi)$ de uma propriedade genérica ϕ em cada célula p . Estes valores são calculados como

$$R(\phi) = \sum_{\text{células } p} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right| \quad (4.45)$$

Contudo, deve-se tomar cuidado no uso deste critério. Se a ordem de magnitude dos termos for pequena, um valor pequeno de $R(\phi)$ pode ser alcançado sem que aos resultados estejam convergidos.

No presente trabalho, o resíduo é normalizado por um valor representativo de ϕ no escoamento da seguinte forma

$$R(\phi) = \frac{\sum_{\text{celulas } p} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right|}{\sum_{\text{celulas } p} |a_p \phi_p|} < 10^{-5} \quad (4.46)$$

No segundo critério, utilizado exclusivamente para a equação da continuidade, o resíduo é calculado da seguinte forma:

$$R^c = \sum_{\text{celulas } p} |\text{taxa de criação de massa na célula } p| \quad (4.47)$$

O resíduo normalizado para a equação da continuidade é definido como

$$\frac{R_{iter N}^c}{R_{iter 5}^c} \quad (4.48)$$

O denominador corresponde ao maior valor absoluto de resíduo da continuidade nas 5 primeiras iterações.

4.2.7. Recursos Computacionais

Foram utilizados computadores Intel (R) com processadores Pentium (R) 4 CPU com capacidade de 2.40 GHz e 2 GB de memória RAM.