MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ANÁLISE NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS TRIDIMENSIONAIS EMPREGANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS

por

Adriane Prisco Petry

Tese para Obtenção do Título de Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2002

ANÁLISE NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS TRIDIMENSIONAIS EMPREGANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS

por

Adriane Prisco Petry Mestre em Engenharia

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Armando Miguel Awruch

Aprovada por:

Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Prof.^a Dr.^a Lígia Damasceno Ferreira Marczak

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo

Prof. Dr. Alberto Tamagna Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, Janeiro de 2002.

AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas e instituições colaboraram para que este trabalho pudesse ser desenvolvido, gostaria de agradecer a todos. É muito difícil não esquecer alguém no momento em que escrevo esta página, peço desculpas se cometer esta injustiça.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, aos mestres e aos funcionários.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, especialmente aos colegas e aos funcionários que me apoiaram durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Centro Nacional de Supercomputação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, especialmente à equipe de suporte e atendimento ao usuário.

Ao Professor Armando Miguel Awruch, por orientar este trabalho.

Aos membros da banca examinadora, por construtivas sugestões.

Ao colega de doutorado Martin P. Kessler, pelo auxílio incansável.

Ao GESTE, por disponibilizar seus recursos.

Ao colega de departamento Sérgio Frey, pelo apoio da equipe do LAMAC, e em especial ao bolsista de iniciação científica Cleber Spode.

À Equipe da Canguru Berçário Pré-Escola e Escola Inclusiva, que com sua competência e carinho garantiu a tranqüilidade de muitas horas de trabalho.

À Maria Antônia, por dedicadamente cuidar de minha casa e de meus filhos, quando tive que me ausentar.

Aos avós, tias e tios, do Ângelo e da Isabela, por serem avós, tias e tios muito presentes, quando precisamos.

À Claudine, irmã e amiga, pelo apoio, especialmente por muitas manhãs com os sobrinhos.

Ao Ângelo e à Isabela, meus filhos, por sua compreensão e colaboração, emprestando nosso tempo a este trabalho.

Aos meus pais, Bruno e Laurete, pelo exemplo e por seu apoio durante este trabalho, e sempre.

Ao Edmilson, pai do Ângelo e da Isabela, e ao Edmilson, companheiro, por seu amor, por sua generosidade e pelo apoio incondicional diante de todas as dificuldades.

RESUMO

O presente trabalho apresenta o estudo e implementação de um algoritmo numérico para análise de escoamentos turbulentos, tridimensionais, transientes, incompressíveis e isotérmicos, através da Simulação de Grande Escalas, empregando o Método de Elementos Finitos.

A modelagem matemática do problema baseia-se nas equações de conservação de massa e quantidade de movimento de um fluido quase-incompressível. Adota-se um esquema de Taylor-Galerkin, com integração reduzida e fórmulas analíticas das funções de interpolação, para o elemento hexaédrico de oito nós, com funções lineares para as componentes de velocidade e constante no elemento para a pressão.

Para abordar o problema da turbulência, emprega-se a Simulação de Grandes Escalas, com modelo para escalas inferiores à resolução da malha. Foram implementados o modelo clássico de Smagorinsky e o modelo dinâmico de viscosidade turbulenta, inicialmente proposto por Germano et al, 1991. Uma nova metodologia, denominada filtragem por elementos finitos independentes, é proposta e empregada, para o processo de segunda filtragem do modelo dinâmico. O esquema, que utiliza elementos finitos independentes envolvendo cada nó da malha original, apresentou bons resultados com um baixo custo computacional adicional.

São apresentados resultados para problemas clássicos, que demonstram a validade do sistema desenvolvido. A aplicabilidade do esquema utilizado, para análise de escoamentos caracterizados por elevados números de Reynolds, é discutida no capítulo final. São apresentadas sugestões para aprimorar o esquema, visando superar as dificuldades encontradas com respeito ao tempo total de processamento, para análise de escoamentos tridimensionais, turbulentos e transientes .

iii

ABSTRACT

Formulation, implementation and applications of a numerical algorithm to simulate turbulent, incompressible, isothermal flows are the main goals here. The transient tridimensional flow is analyzed using an explicit Taylor-Galerkin scheme and the finite element method with hexahedrical eight-node element.

The scheme adopted for turbulence treatment is Large Eddy Simulation. For subgrid scales two models where implemented, the classical Smagorinsky's model and the dynamic eddy viscosity model initially proposed by Germano, 1991. For the process of second filtration necessary in the dynamic model a new method was developed based on independent finite elements that involve each node in the original mesh. The scheme implemented is efficient with good results and low computational cost

Results for classical problems where presented, that demonstrate the system validation. Comments about the scheme applicability for high Reynolds number flows are in the last part. Suggestion to improve the algorithm to overcome long time of analysis are presented.

ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO	1
1.1.	Apresentação	1
1.2.	Motivação e Histórico	2
1.3.	Objetivos, Metodologia e Organização do Trabalho	5
1.4.	Simulação Numérica de Escoamentos Incompressíveis Empregando o	
	Método de Elementos Finitos	6
1.5.	Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos	11
1.5.1	Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos via	
	Equações Médias de Reynolds 1	2
1.5.2	Simulação Direta da Turbulência	21
1.5.3	Simulação de Grandes Escalas	25
1.6.	Programação de Alto Desempenho	2
2.	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	\$5
2.1.	Equações que Governam o Escoamento	5
2.2.	Equações para Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Turbulentos	39
2.3.	Modelos de Turbulência Sub-malha	42
2.3.1	Modelo de Smagorisky 4	4
2.3.2	Modelo Dinâmico de Viscosidade Turbulenta	45
2.4	Equações que Governam o Escoamento com Modelos Sub-malha de Smagorinsky e	
	Modelo Dinâmico de Viscosidade Turbulenta	46
3 N	IODELAGEM NUMÉRICA E ASPECTOS COMPUTACIONAIS	48
3.1 F	Formulação de Elementos Finitos do problema	48
3.1.1	Formulação de Resíduos Ponderados do Problema	49
3.1.2	Equações de Elementos Finitos do Problema	51
3.2 F	Esquema de Tavlor-Galerkin	55
3.3 S	Segunda Filtragem: Metodologia Proposta	57

. RESULTADOS:

4.1	Análise Escoamento sobre o degrau: Código Bidimensional	
4.1.1	Validação do Programa: Análise do Escoamento a Baixos Números de	Reynolds
	67	
4.1.2	Simulação do escoamento sobre o degrau em canal aberto: Re=40000	69
4.2 Ar	nálise Empregando o Código Tridimensional:	
Es	coamento Forçado em Cavidade Bidimensional	
4.3 Ar	nálise do Escoamento Forçado em Cavidade Tridimensional	84
4.3.1	Descrição do Problema	
4.3.2	Cavidade Tridimensional - Resultados: Re=3200	85
4.3.3	Cavidade tridimensional – Resultados, Re=10000	
4.4 Ar	nálise do Escoamento Sobre um Degrau	102
4.4.1	Validação do Programa: Análise do Escoamento bidimensional a Baixos N	Números de
	Reynolds	103
4.4.2	Análise do Escoamento Turbulento Bidimensional	115
4.4.3	Escoamento Sobre um Degrau Tridimensional	118
5. CO	NCLUSÕES	123
REFE	RÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	127

LISTA DE SÍMBOLOS

Caracteres Romanos

С	velocidade de propagação do som no meio [m/s]
Cs	constante de Smagorinsky
C(x,t)	coeficiente do modelo dinâmico
Cij	termos cruzados de velocidades
L_{ij}	termos de Leonard
Re	Número de Reynolds [UL/v]
\mathbf{f}_{i}	componente das forças de campo na direção i [N/m ³]
$k_{SM} \\$	energia cinética sub-malha [m ² /s ²]
nj	cosseno diretor do vetor normal ao contorno considerado
р	pressão [N/m ²]
$\overline{\mathbf{p}}$	pressão, componente correspondente às grandes escalas $[N/m^2]$
p*	função peso para a pressão
$\overline{p}_{}$	vetor de valores nodais da pressão
$\mathop{p}\limits_{\sim}^{*}$	vetor de valores nodais da função peso de pressão
t	tempo [s]
ti	valores prescritos das forças de superfície no contorno indicado [N/m ²]
\mathbf{v}_{i}	componente da velocidade na direção i [m/s ²]
$\mathbf{\hat{v}}_{i}$	valores prescritos da componente i da velocidade no contorno
$\overline{\mathbf{v}_i}$	componente, correspondente às grandes escalas, do vetor de velocidade na direção $x_{\rm i}$
$\mathbf{v'_i}$	componente, correspondente às escalas sub-malha, do vetor de velocidade na direção x_{i}
\mathbf{v}_i^*	função peso para a velocidade
$\overline{\mathbf{V}}_{\sim i}$	vetor de valores nodais da componente i da velocidade
$v_{\sim i}^{*}$	vetor de valores nodais da componente i da função peso de velocidade
x _i	coordenada na direção i [m]

Caracteres Gregos

 Δp variação da pressão [N/m²]

- Δt intervalo de tempo [s]
- $\Delta \rho v_i$ variação de ρv_i
- $\overline{\Delta}$ escala associada com o filtro utilizado para definir o campo de grandes escalas
- $\langle \overline{\Delta} \rangle$ comprimento característico do segundo filtro, sendo $\langle \overline{\Delta} \rangle > \overline{\Delta}$.
- Γ contorno do domínio
- Ге contorno do elemento
- Ω domínio do problema
- Ωe domínio do elemento
- δ_{ij} delta de Kronecker
- λ coeficiente de viscosidade volumétrica do fluido [Ns/m²]
- η componente do sistema de coordenadas naturais
- μ coeficiente de viscosidade dinâmica do fluido [Ns/m²]
- v viscosidade cinemática $[m^2/s]$
- v_t viscosidade turbulenta [m²/s]
- ρ massa específica do fluido [kg/m³]
- σ_{ij} tensor de tensões [N/m²]
- ξ componente do sistema de coordenadas naturais
- ψ vetor de funções de interpolação para a pressão
- ζ componente do sistema de coordenadas naturais

LISTA DE FIGURAS

Fig.	TÍTULO Pág	gina
1.1	Resultados do Escoamento em Torno de um Cilindro Fixo, Re=1500 [Petry, 1993]	9
3.1	Exemplo de elemento independente para uma malha	59
	bidimensional	
3.2	Exemplos de elementos independentes em malhas irregulares e	59
	distorcidas	
3.3	Elemento independente em uma malha tridimensional	60
3.4	Elemento hexaédrico de oito nós no espaço físico e computacional.	62
4.1	Esquema do domínio e dimensões características do escoamento sobre o degrau.	67
4.2	Relação entre comprimento de recolamento (X _R /H) e número de Reynolds (<i>Re</i>): \Diamond ,	
	resultados experimentais de Armaly et al., 1983;	
	Neto et al., 1993; Δ , simulação numérica de Kaiktsis et al, 1991; •, resultados do	
	presente trabalho	69
4.3	Distribuição de vorticidade, resultados da simulação NSI (desprezando os termos	
	relativos a efeitos às escalas inferiores à resolução da malha), em diferentes instantes	
	de tempo: (a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g),	
	$\hat{t} = .75$	71
4.4	Distribuição de vorticidade, resultados da simulação LES1 (empregando o modelo	
	de Smagorinsky, desprezando os termos de Leonard e cruzados), diferentes instantes	
	de tempo: (a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g),	
	$\hat{t} = .75$	72
4.5	Distribuição de vorticidade, resultados da simulação LES2 (considerando todos os	
	termos de escalas sub-malha), em diferentes instantes de tempo: (a), $\hat{t} = 15$; (b),	
	$\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g), $\hat{t} = .75$	73
4.6	Distribuição de vorticidade, resultados apresentados por Ortega e Azevedo, 1995;	
	(a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g),	74
	$\hat{\mathbf{t}} = .75$	
4.7	Escoamento forçado em uma cavidade, geometria do problema	78
4.8	Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical	

para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=100) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982

(•).....

4.9 Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=400) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia. et 1982 80 al., **(●)**. Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média 4.10 vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=1000) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 80 (•)..... 4.11 Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=3200) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 81 (•)..... 4.12 Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=5000) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e 81 resultados de Ghia, et al., 1982 (•)..... 4.13 Resultados do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional empregando programa laminar reestruturado: - Re=100, -Re=400, Re=1000, Re=3200 e -83 Re=5000..... Resultados do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para vários 4.14 números de Reynolds, para o escoamento na cavidade bidimensional apresentados por Reddy e Gartling, 1994..... 83 4.15 Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=3200) empregando: o programa laminar reestruturado, __- com modelo de Smagorinsky e __- com

	modelo dinâmico
4.16	Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média
	vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=5000) empregando:
	o programa laminar reestruturado, com modelo de Smagorinsky e com
	modelo dinâmico
4.17	Esquema do domínio do problema: Cavidade Tridimensional
4.18	Corte da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade 3D,
	Re=3200
4.19	Perfis de velocidades médias adimensionalizadas nas linhas centrais vertical e
	horizontal do plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff,
	1989] e resultados do presente trabalho: 3dles,3dlam e
	3ddin
4.20	Perfis de velocidades médias adimensionalizadas nas linhas centrais vertical e
	horizontal do plano de simetria, ° e 🗆- resultados experimentais [Prasad e Koseff,
	1989]; eresultados numéricos [Zang, Street e Koseff, 1993]
4.21	Distribuição de V1rms e V2rms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do
	plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados
	do presente trabalho 3dles,3dlam e3ddin
4.22	Distribuição de Urms e Vrms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano
	de simetria,, ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; e
	resultados numéricos [Zang, Street e Koseff, 1993]
4.23	Distribuição de UV sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de
	simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados do
	presente trabalho: 3dles,3dlam e3ddin
4.24	Distribuição de UV sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de
	simetria,, ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; e
	resultados numéricos [Zang, Street e Koseff, 1993]
4.25	Perfis de velocidades médias adimensionalizadas nas linhas médias da cavidade
	bidimensional (esquerda) e linhas médias do plano central, para a cavidade
	tridimensional (direita). por [Zang, Street e Koseff, 90
	1994]
4.26	Isolinhas de pressão no plano de simetria, Re=3200, resultados do presente trabalho
	(t=0.795s): (a) 3dlam, (b) 3dles e (c) 3ddin

4.27	Regiões de isso-velocidade, Re=3200, no plano de simetria, resultados do presente
	trabalho (t=0.795s): (a) 3dlam, (b) 3dles e (c) 3ddin
4.28	Isolinhas de vorticidade no plano de simetria, Re=3200, resultados do presente
	trabalho (t=0.795s): (a) 3dlam, (b) 3dles e (c) 3ddin
4.29	Isolinhas de função de corrente no plano de simetria, Re=3200, t=0.795s: (a) 3dlam,
	(b) 3dles e (c) 3ddin
4.30	Corte da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade 3D,
	Re=10000
4.31	Imagem da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade
	3D, Re=10000
4.32	Perfis de velocidades médias adimensionalizadas, Re=10000, nas linhas centrais
	vertical e horizontal do plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e
	Koseff, 1989] e resultados do presente trabalho: 3dles e3ddin
4.33	Perfis de velocidades médias adimensionalizadas, Re=10000, nas linhas centrais
	vertical e horizontal do plano de simetria, ° e 🗆- resultados experimentais [Prasad e
	Koseff, 1989]; eresultados numéricos [Zang, Street e Koseff, 1993]
4.34	Distribuição de V1rms e V2rms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do
	plano de simetria, Re=10000: + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]
	e resultados do presente trabalho 3dles e3ddin
4.35	Distribuição de Urms e Vrms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano
	de simetria, Re=10000: ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989];
	eresultados numéricos [Zang, Street e Koseff,
	1993]
4.36	Distribuição de UV sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de
	simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados do
	presente trabalho, Re=10000: 3dles e3ddin
4.37	Distribuição de UV sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de
	simetria, Re=10000, ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; e
	resultados numéricos [Zang, Street e Koseff, 1993]
4.38	Isolinhas de pressão, Re=10000 (t=1.095s): (a) 3dles e (b) 3ddin
4.39	Regiões do vetor de velocidades, Re=10000, no plano de simetria, (t=1.095s): (a)

	3dles e (b) 3ddin	
4.40	Isolinhas de vorticidade no plano de simetria, Re=10000, (t=1.095s): (a) 3dles e (b)	
	3ddin	100
4.41	Isolinhas de função de corrente no plano de simetria, Re=10000, (t=1.095s): (a)	
	3dles e (b) 3ddin	101
4.42	Esquema do domínio e dimensões características do escoamento sobre o degrau	101
4.43	Detalhe da malha de elementos finitos empregada para análise do escoamento	103
	sobre o degrau a baixos números de Reynolds – corte em um plano perpendicular	
	ao eixo	
	X ₃	
4.44	Detalhe da malha uniforme com 100x300 elementos na região posterior ao degrau	
	(step2b)	
		104
4.45	Detalhe da malha com concentração de elementos próximo às paredes superior e	
	inferior na região posterior ao degrau (step2a)	106
4.46	Detalhe do campo de pressões em malha com elementos muito	
	distorcidos	107
4.47	Campos de pressão obtidos com o mesmo programa, malha uniforme e diferentes	
	intervalos de tempo de integração, para o mesmo instante de tempo. Re=400	108
4.48	Vetores de velocidade obtidos com o mesmo programa, malha uniforme e	
	diferentes intervalos de tempo de integração, para o mesmo instante de tempo.	109
	Re=400	
4. 49	Visualização do campo de pressões para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes	
	Re	110
4.50	Isolinhas de função de corrente para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes	111
	Re	
4.51	Campo de vorticidade instantâneo para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes	112
4 52	Re. Detalhe dos vetores de velocidade resultados com 3ddin Re=100	112
4 53	Detalhe dos vetores de velocidade resultados com 3dles Re=100	113
4 54	Detalhe dos vetores de velocidade para resultados com 3ddin Re=400	113
4.55	Detalhe dos vetores de velocidade para resultados com 3 dles Re=400	113
4.56	Detalhe dos vetores de velocidade. resultados com 3ddin. Re=1000.	114
4.57	Detalhe dos vetores de velocidade. resultados com 3dles. Re=1000.	114
 4.51 4.52 4.53 4.54 4.55 4.56 4.57 	Campo de vorticidade instantâneo para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes Re. Detalhe dos vetores de velocidade , resultados com 3ddin, Re=100 Detalhe dos vetores de velocidade , resultados com 3dles, Re=100 Detalhe dos vetores de velocidade, para resultados com 3ddin, Re=400 Detalhe dos vetores de velocidade, para resultados com 3dles, Re=400 Detalhe dos vetores de velocidade, resultados com 3dles, Re=1000 Detalhe dos vetores de velocidade, resultados com 3ddin, Re=1000	 112 112 113 113 113 114 114

4.58	Detalhe dos vetores de velocidade, resultados obtidos com 3ddin, Re=1000, após a	114
	região de separação.	
4.59	Detalhe dos vetores de velocidade, resultados obtidos com 3dles, Re=1000, após a	
	região de separação	114
4.60	Perfis da componente v1 dos vetores de velocidades médias, ao longo da linha	
	sobre a parede inferior do degrau, Re=10000: $\Delta t = 1 \times 10^{-6}$; $\Delta t = 5 \times 10^{-7}$	116
4.61	Visualização do campo de pressões para resultados com 3ddin, Re = 10000, t=0.4s.	116
4.62	Isolinhas de função de corrente para resultados com 3ddin, Re = 10000, t=0.4s	116
4.63	Evolução do campo de vorticidade, resultados com 3ddin, Re = 10000	117
4.64	Detalhes dos vetores de velocidade para resultados com 3ddin Re=10000	117
4.65	Detalhes do campo de vorticidade para resultados com 3ddin, Re=10000	117
4.66	Esquema do domínio e dimensões características do escoamento sobre o degrau 3D.	118
4.67	Campo de pressões, Re=100, plano central (x3=1), degrau 3D, empregando	118
	3ddin	
4.68	Detalhe dos vetores de velocidade, Re=100, degrau 3D, empregando 3ddin	119
4.69	Detalhe: iso-superfícies de vorticidade (w), Re=100, degrau 3D, empregando 3ddin	120
	$-\underline{\qquad} - \mathbf{w}_3 = 5.7 \mathbf{x} 10^1, \underline{\qquad} - \mathbf{w}_1 = 4 \mathbf{x} 10^{-4} \mathbf{e} \underline{\qquad} - \mathbf{w}_1 = -4 \mathbf{x} 10^{-4}.$	
4.70	Campo de pressões, Re=1000, plano central (x ₃ =1), degrau 3D, empregando	120
	3ddin	
4.71	Detalhe dos vetores de velocidade, plano central, Re=100, degrau 3D, empregando	121
	3ddin	
4.72	Detalhe dos vetores de velocidade, Re=1000, degrau 3D, empregando 3ddin	121
4.73	Vorticidade, plano central, Re=100, degrau 3D, empregando 3ddin	122
4.74	Detalhe da distribuição da vorticidade, Re=1000, degrau 3D, empregando 3ddin.	122
4.75	Detalhe: iso-superfícies de vorticidade (w), Re=1000, degrau 3D, empregando	122
	3ddin w ₃ =5.7x10 ¹ ,w ₁ =4x10 ⁻⁴ e w ₁ = -4x10 ⁻⁴ .	

ÍNDICE DE TABELAS

Tabe	la TÍTULO	Página
1.1	Comparação entre número de pontos necessários para simulação direta e número	de
	pontos empregados [Petry, 1993].	24
1.2	Comparação entre intervalos de tempo necessários para simulação direta e interva	alos
	de tempo utilizados [Petry, 199	93]. 24
4.1	Comprimento de recolamento X _r /H em função do número de Reynolds, resultad	dos
	com os programas 3dles e 3ddin.	105
4.2	Intervalos de tempo de integração adotados comparados com valores estimad	dos
	para simulação direta, para solução dos escoamentos caracterizados por diferen	ntes
	números de Reynolds.	. 110

1. INTRODUÇÃO

1.1 Apresentação

Neste trabalho apresenta-se um estudo sobre análise numérica de escoamentos turbulentos empregando o método de elementos finitos e a simulação de grandes escalas.

Os escoamentos turbulentos são caracterizados usualmente por elevados números de Reynolds e têm um comportamento coerente nas grandes escalas e randômico nas menores escalas, sendo ainda difusivo, tridimensional e transiente [Tenekes e Lumley, 1972]. As escalas envolvidas nestes escoamentos são, normalmente, muito maiores do que as escalas de comprimento do movimento molecular [Hinze,1975], desta forma a turbulência pode ser descrita como um fenômeno contínuo [Tenekes e Lumley, 1972].

Ao empregar, como modelo matemático para análise de escoamentos, as equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento da mecânica dos fluidos, derivadas da mecânica do contínuo, chega-se a um sistema complexo de equações diferenciais parciais. Este sistema incluí equações constitutivas, condições de contorno e condições iniciais, a serem resolvidas em domínios de geometria variável, aumentando a complexidade do problema. A solução aproximada destes sistemas complexos de equações pode ser obtida através de métodos numéricos, sendo o Método de Elementos Finitos [Hughes, 1987; Reddy e Gartling, 1994] um dos métodos que pode ser empregado.

Apesar das equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento consistirem um modelo matemático completo, capaz de descrever os escoamentos turbulentos de fluidos, a discretização espacial e temporal necessária para a simulação direta de todas as escalas envolvidas (Simulação Direta da Turbulência) inviabiliza esta forma de análise para a grande maioria dos problemas de interesse em engenharia. Esta impossibilidade decorre do grande número de equações a serem processadas, que conduzem à necessidades de armazenamento de dados, bem como tempos de processamento inaceitáveis, mesmo nos mais avançados computadores da atualidade [Grötsbach, 1987; Kim e Menon, 1999].

Como conseqüência da inviabilidade da solução via simulação direta, é necessário o emprego de metodologias alternativas. A Simulação de Grandes Escalas é uma opção para a análise de escoamentos turbulentos, a qual consiste em resolver as equações de conservação para as grandes escalas dos escoamentos e empregar modelos para representar os efeitos das escalas inferiores à resolução obtida pela discretização espacial do problema (escalas sub-malha) [Ferziger 1993, Rogallo e Moin 1984, Lesieur et al, 1995].

1.2 Motivação e Histórico

A análise de escoamentos tem aplicações em diversos campos da engenharia, assim como em outras áreas do conhecimento, tais como medicina, meteorologia e esportes. Compreender e ser capaz de prever o comportamento do movimento dos fluidos, ou de corpos em movimento imersos em fluidos, é importante para tópicos tão diversos como o projeto de uma aeronave [Reuther et al.,1999] ou a distribuição de medicamentos no organismo através das vias respiratórias [Lange et al., 2001].

Uma grande parte dos problemas de interesse são caracterizados por escoamento turbulentos. Na engenharia civil o estudo da ação dos ventos sobre as edificações [Blessmann, 1990; Rocha e Souza, 2000] é um exemplo. Os modelos empregados em meteorologia, ou para prever o potencial de energia eólica de uma região, assim como a avaliação de dispersão de poluentes atmosféricos também envolvem a análise de escoamentos turbulentos.

No esporte, o escoamento do ar em torno de uma bola de golfe é um exemplo clássico de aplicação da dinâmica dos fluidos, onde emprega-se a técnica de aumentar a rugosidade da superfície da bola, precipitando o descolamento da camada limite turbulenta e reduzindo a força de arrasto, aumentando a distância que a bola percorre para a mesma tacada [Fox e McDonald, 1995].

O projeto aerodinâmico consiste uma importante aplicação da análise de escoamentos turbulentos [Mohammadi,1997, Jansen ,1999], tendo sido em grande parte o tema motivador deste trabalho. A otimização de formas para obter, ou aprimorar, determinadas características aerodinâmicas é uma aplicação da dinâmica dos fluidos que requer a determinação precisa do escoamento. Quanto mais corretamente forem definidos os campos de pressão e velocidades em torno de um objeto imerso em um escoamento, mais otimizado poderá ser o projeto.

O desenvolvimento de métodos de projeto aerodinâmico eficientes é de grande importância. As características aerodinâmicas de máquinas e equipamentos operando em contato com escoamentos têm influência direta na qualidade com que estes desempenham as funções para as quais foram projetados. Como exemplo destacam-se o projeto de perfis de alta sustentação e a redução do arrasto em veículos, com conseqüente redução no consumo de combustíveis. Cosentino e Holst, 1986, afirmam que uma redução de 5% no arrasto de cruzeiro em um avião tipo DC-10, podem representar uma economia de US \$500.000,00, por avião-ano, em custo de combustível.

O projeto de máquinas de fluxo [Stow, 1989] é outra área de grande aplicação da otimização de formas aerodinâmicas, pois a eficiência das máquinas depende essencialmente do projeto aerodinâmico. Um bom projeto conduz à economia da energia consumida para realizar o trabalho desejado em bombas, compressores e ventiladores, ou maior produção de energia a partir dos mesmos recursos em turbinas. No desenvolvimento das turbinas eólicas [Sadhu, 1990], tem sido essencial o aprimoramento do projeto aerodinâmico.

Um estudo específico sobre simulação numérica de escoamentos aplicada ao projeto de turbomáquinas foi desenvolvido por Petry e Awruch, 1997a. Neste trabalho foram destacados tópicos de pesquisa importantes para desenvolver a dinâmica dos fluidos computacional, visando as necessidades da análise e projeto de turbomáquinas. Dentre estes, encontram-se temas que fazem parte dos objetivos propostos nesta tese, tais como, o aprimoramento dos métodos de simulação de escoamentos turbulentos (modelos numéricos para representar problemas com separação e recolamento) e o desenvolvimento de programas mais eficientes do ponto de vista de tempo de análise e recursos computacionais requeridos.

Escoamentos de fluidos têm sido estudado há séculos. White, 1974, apresenta um pequeno resumo sobre o desenvolvimento da análise de fluidos viscosos, onde relata a existência de registros pré-históricos de interesse no tema. Ainda segundo White, uma abordagem científica teve início quase 300 anos antes de Cristo, quando Arquimedes desenvolveu uma versão preliminar do cálculo diferencial para análise de escoamentos. No ano de 1500, Leonardo da Vinci deduziu a equação da conservação de massa para escoamentos unidimensionais e viscosos. Outros grandes nomes da ciência dedicaram-se a esse tema, tais como Newton, Euler e Laplace nos anos 1600 e 1700; Navier, Poisson e Stokes nos anos 1800 e Prandtl, que formulou a teoria de camada limite em 1904.

Durante um longo período a complexidade das equações deduzidas e conseqüente dificuldade em obter soluções, resultaram em duas linhas de investigação quase paralelas. A teoria da camada limite foi um marco para aproximar as correntes experimental e teórica em Mecânica dos Fluidos. Nas últimas décadas, o desenvolvimento dos computadores permitiu o surgimento e consolidação de uma nova linha de estudo, a Dinâmica dos Fluidos Computacional, que emprega métodos numéricos para a solução das equações que governam os escoamentos.

A análise numérica de escoamentos teve o seu desenvolvimento inicialmente baseado no método de Diferenças Finitas. Atualmente o emprego dos métodos de Volumes Finitos [Patankar, 1980] e Elementos Finitos tem se generalizado. Maliska, 1995, apresenta uma interessante revisão sobre aspectos que levaram a aplicação e os caminhos do desenvolvimento dos diferentes métodos na análise de problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor, discutindo diferenças e semelhanças entre os métodos.

O método de elementos finitos teve o início de seu desenvolvimento baseado na análise de problemas estruturais. Apenas mais recentemente passou a ser aplicado a problemas de dinâmica dos fluidos e transferência de calor. Este método apresenta características que o tornam adequado a problemas com geometrias complexas, análise com malhas não estruturadas e adaptação de malhas. Permite também a formulação e solução elemento a elemento, um esquema apropriado para o processamento de casos com um número muito elevado de elementos, como os que serão abordados. Outras características do método, ressaltadas por Reddy e Gartling, 1994, são a simplicidade e rigor em estabelecer condições de contorno e o nível de desenvolvimento do método e sistemas de pré e pós processamento resultantes de sua ampla utilização na análise estrutural.

Atualmente os métodos experimentais e teóricos (incluindo os métodos numéricos) vêm sendo empregados de forma integrada e complementar. Os estudos experimentais, além de apresentarem importantes resultados sobre o comportamento do escoamento, são essenciais para validar os resultados dos métodos analíticos e numéricos desenvolvidos.

A simulação numérica de escoamentos tem sido aprimorada. O avanço dos métodos de solução de equações, juntamente com o desenvolvimento dos equipamentos computacionais, com crescente capacidade de armazenamento e velocidade de processamento, têm permitido simulações com alto grau de realismo. Além da análise para aplicações práticas em engenharia, a qualidade dos resultados obtidos permite o emprego da Dinâmica dos Fluidos Computacional na investigação das características de escoamentos, ou seja, a realização de experimentos numéricos [Lesieur et al, 1995; Silveira Neto et al, 1993].

Contribuíram também para o maior realismo e disseminação da análise numérica, o desenvolvimento dos programas de visualização e análise de resultados, bem como os algoritmos de geração e adaptação de malhas.

Dentre as vantagens do emprego desta técnica, destaca-se a solução de problemas complexos, em termos de geometria e condições de contorno (que não possuem solução analítica) e a facilidade de redefinição dos dados do problema, além do custo reduzido, quando comparada à construção, ou reconstrução, de modelos experimentais.

Apesar do grande desenvolvimento dos sistemas computacionais, diversos problemas de análise de escoamento ainda não podem ser resolvidos de forma completa através de métodos numéricos. Um exemplo desta limitação é o tema deste trabalho, a simulação de escoamentos

turbulentos, cuja abordagem numérica para diversas aplicações, ainda requer grande trabalho de pesquisa e desenvolvimento.

1.3 Objetivos, Metodologia e Organização do Trabalho

Como objetivos do trabalho destacam-se: (a) a implementação de um sistema de análise numérica de escoamentos viscosos, isotérmicos, incompressíveis, tridimensionais, transientes e turbulentos; (b) o estudo e aplicação da simulação de grandes escalas no âmbito do método de elementos finitos.

No programa de simulação numérica de escoamentos desenvolvido emprega-se o método de elementos finitos para resolver as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis, adotando um modelo baseado na hipótese de quase-incompressibilidade [Kawahara e Hirano, 1983]. A solução é processada através de um esquema explícito de Taylor-Galerkin [Donea, 1984; Azevedo, 1999], com integração reduzida [Engelman et al, 1982; Shultz, 1997]. O elemento implementado é o elemento hexaédrico de 8 nós, empregando fórmulas analíticas para integração das matrizes de elementos [Gresho, et al, 1984; Burbridge, 1999].

O problema da turbulência é abordado através da Simulação de Grandes Escalas (referida na literatura internacional como *Large Eddy Simulation*). Para representar os efeitos das escalas sub-malha foram implementados dois modelos: o modelo de Smagorinsky, de 1963, [Leonard, 1974; Lesieur et al, 1995] e um modelo dinâmico de viscosidade turbulenta [Germano et al.,1991; Lilly, 1992]. Esta abordagem permite a simulação de problemas transientes, preservando uma importante característica da turbulência.

Neste trabalho adota-se o método de elementos finitos em virtude da adequação do método ao problema e de suas características positivas, tais como as apresentadas acima. Considerou-se ainda o a cultura do grupo de pesquisa que deu origem ao trabalho, assim como da autora, e o enquadramento deste em projetos futuros. A análise de problemas transientes e tridimensionais, com o emprego de um método adequado a problemas de geometria complexa, visa possibilitar resultados com grande realismo, importantes para o desenvolvimento de estudos futuros ou em andamento, nas áreas de interação fluido-estrutura e otimização de formas aerodinâmicas.

Este tipo de análise conduz a um problema computacional de grande porte, por esta razão é necessário o uso de técnicas computacionais de alto desempenho, [Petry et al., 1994]. Os problemas foram processados no computador CRAY T-94 do Centro Nacional de

Supercomputação/UFRGS, com programação adequada a esta plataforma. A linguagem de programação utilizada foi o FORTRAN. Outras técnicas empregadas para reduzir o tempo de processamento foram o uso de integração reduzida e fórmulas analíticas das funções de interpolação dos elementos.

Os próximos parágrafos deste primeiro capítulo apresentam uma revisão bibliográfica dos principais tópicos relacionados à tese. Estudos desenvolvidos durante o doutorado resultaram em publicações de circulação restrita contendo revisões mais extensas sobre os temas: simulação de escoamentos turbulentos [Petry e Awruch, 1995], simulação de escoamentos incompressíveis empregando o método de elementos finitos [Awruch e Petry, 1997] e simulação numérica de escoamentos em turbomáquinas [Petry e Awruch 1997a].

Os capítulos seguintes à introdução apresentam a modelagem matemática, a modelagem numérica, os resultados obtidos e finalmente conclusões e considerações finais sobre a continuidade do trabalho. No anexo 1 estão informações sobre o código bidimensional implementado em estudos preliminares ao desenvolvimento do código tridimensional [Petry e Awruch, 1997b].

1.4. Simulação Numérica de Escoamentos Incompressíveis Empregando o Método de Elementos Finitos

O método de elementos finitos é uma técnica computacional de solução de equações diferenciais e integrais. Reddy e Gartling, 1994, apresentam uma boa descrição do método de elementos finitos, definindo-o como uma generalização dos métodos variacionais clássicos e de resíduos ponderados, onde o domínio completo é dividido em sub-domínios (elementos finitos), permitindo que as funções de aproximação necessárias para a solução do problema variacional ou de resíduos ponderados sejam obtidas de forma sistemática. As equações de elementos finitos são deduzidas a partir das formulações variacionais ou de resíduos ponderados do problema.

O problema de simulação de escoamentos incompressíveis e isotérmicos consiste na solução das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento. A formulação pode ser desenvolvida em termos de variáveis primárias, velocidade e pressão, ou em termos de função de corrente e vorticidade. Esta segunda formulação conduz a uma redução no número de variáveis para o problema bidimensional, não ocorrendo o mesmo no problema tridimensional [Carey e Oden, 1984; Gunzburger, 1989]. A formulação em variáveis primárias apresenta mais facilidade para a imposição de condições de contorno e uma compreensão física mais direta

[Reddy e Gartling, 1994; Carey e Oden, 1984; Gunzburger, 1989]. Neste trabalho emprega-se a formulação em variáveis primárias.

O problema de escoamentos incompressíveis apresenta algumas dificuldades no desenvolvimento da solução numérica, como surgimento de modos espúrios de pressão, dificuldades de convergência e a ausência da variável de pressão na equação de conservação de massa (divergente nulo do campo de velocidades), resultando no aparecimento de zeros na diagonal principal da matriz de massa.

Existem diversos modelos matemáticos para a simulação de escoamentos incompressíveis empregando o método de elementos finitos, na revisão publicada sobre o tema [Awruch e Petry, 1997] apresentam os métodos mais relevantes, descritos a seguir.

No enfoque misto de análise de escoamentos incompressíveis e viscosos, as variáveis de velocidade e pressão são mantidas na formulação. Esta pode ser obtida diretamente da aplicação do método de elementos finitos nas equações de resíduos ponderados para conservação de massa e de quantidade de movimento, ou aplicando-se o método dos multiplicadores de Lagrange para incorporar a equação de conservação de massa como uma restrição às equações de Navier-Stokes.

O método de função de penalidade considera a equação de conservação de massa como uma restrição de incompressibilidade, satisfeita de forma aproximada através da inclusão do termo de penalidade, resultando em um sistema onde a pressão é eliminada da formulação, restando como incógnitas as componentes de velocidade. A pressão pode ser calculada posteriormente com base no campo de velocidade obtido.

A restrição de incompressibilidade inibe a convergência dos algoritmos iterativos, como Gradientes Conjugados ou Gauss-Seidel, para solução de problemas com enfoque misto ou de função de penalidade [Reddy e Gartling, 1994]. Os métodos de análise de escoamentos incompressíveis empregando a equação de Poisson visam superar esta dificuldade de convergência. viabilizando o uso deste tipo de algoritmo adequado para a solução de problemas de grandes dimensões.

O esquema empregando a equação de Poisson para a pressão é também denominado de correção de pressão ou de projeção de pressão. No contexto de volumes finitos, este esquema corresponde a algoritmos como SIMPLE ou SIMPLER [Patankar, 1980]. O sistema de equações acoplado da formulação mista é alterado, substituindo-se a equação de conservação de massa pela equação de Poisson da pressão, desacoplada. A equação de Poisson é deduzida das equações de conservação de quantidade de movimento. Para a solução do sistema incluindo a equação de

Poisson para pressão podem ser empregados os esquemas semi-implícitos de solução (implícitos para pressão e explícitos para velocidades).

O último enfoque abordado é o método de pseudo-compressibilidade, baseado nas idéias apresentadas originalmente por Chorin em 1980, que resulta em um sistema de equações onde a equação de conservação de massa mantém um termo de derivada da pressão no tempo. Esta aproximação evita a ocorrência de zeros na diagonal da matriz de massa da formulação de elementos finitos, a custa da inclusão de um parâmetro de pseudo-compressibilidade.

Uma equação de conservação de massa, semelhante ao método de pseudocompressibilidade, pode ser obtida considerando uma velocidade do som finita em um enfoque denominado quase-incompressível por Kawahara e Hirano, 1983. Uma interpretação física para esta proposta consiste em considerar que a condição de incompressibilidade é uma condição ideal, ou seja, escoamentos reais sempre apresentam algum nível de compressibilidade (resultando em uma velocidade de propagação do som real, não infinita). Este enfoque foi empregado em Petry, 1993, apresentando bons resultados (figura 1.1). O sistema de simulação de escoamentos proposto neste trabalho também está baseado nesta formulação.

No enfoque misto, a utilização de polinômios de igual ordem para velocidade e pressão origina oscilações espúrias de pressão. Uma solução é o emprego de funções de interpolação uma ordem inferior para a pressão em relação às funções das componentes da velocidade [Reddy e Gartling, 1994, Carey e Oden, 1984 e Gunzburger, 1989], contudo esta solução nem sempre produz bons resultados [Huyakorn et al.,1978]. Uma garantia da qualidade dos resultados pode ser obtida empregando elementos que satisfaçam a condição de consistência de Ladyzhenskaya-Brezzi-Babushka [Carey e Oden, 1984], porém nem sempre a violação desta condição implica em problemas nas simulações numéricas. Estudos desenvolvidos sobre os modos espúrios de pressão [Sani et al. 1981a, 1981b], concluíram que estes não dependem apenas da escolha das funções de interpolação, sendo fatores importantes as condições de contorno e a distribuição de elementos.

Figura 1.1 - Resultados do Escoamento em Torno de um Cilindro Fixo, Re=1500 [Petry, 1993].

Quando as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressívels são resolvidas pelo método da penalidade, é necessário utilizar um esquema de integração reduzida seletiva. Este esquema implica em resolver numericamente em forma exata a integral que contém as tensões desviadoras, diminuindo a ordem da integração numérica para o termo de penalidade, que contém os termos volumétricos. Neste caso a integração reduzida equivale a uma interpolação de ordem inferior da pressão nos métodos mistos [Sani et al. 1981a; Engelman et al.1982].

Um outro aspecto que merece atenção é o tratamento de problemas com advecção dominante. Diversas alternativas são apresentadas, tais como os métodos estabilizados SUPG (Streamline Upwind/ Petrov-Galerkin [Hughes e Tezduyar, 1984; Tezduyar e Park, 1986] e GLS (Galerkin/Least-Squares). O emprego de métodos estabilizados para escoamentos incompressíveis é abordado por Franca e Hughes, 1993 e Franca e Frey, 1992. No trabalho de Jansen, 1999, é apresentado o uso destes em simulação de grandes escalas. O esquema de Taylor-Galerkin [Donea, 1984] é outra possibilidade de esquema de estabilização. Uma interessante comparação sobre estes métodos e os métodos empregados em volumes finitos pode ser encontrada em Codina, 1998.

O processo de discretização espacial e temporal das equações para análise de escoamentos resulta em um sistema de equações algébricas a serem resolvidas. Em problemas transientes é necessário integrar as equações no tempo para obter a solução. Os métodos diretos de solução, empregados com esquemas implícitos, têm um papel importante, em particular nos casos em que a matriz dos coeficientes permanece constante e pode ser armazenada na memória central. Em problemas de grandes dimensões estes esquemas apresentam inconvenientes, por ser impossível armazenar na memória principal as matrizes completas do sistema, simultaneamente. Existem formas de resolver esta dificuldade, mas usualmente os algoritmos propostos para manipulação das matrizes tem um alto custo em termos de tempo de processamento e acesso à memória secundária. Desta forma é reduzida a vantagem obtida com o elevado passo de tempo de integração, possível de empregar nestes esquemas incondicionalmente estáveis. Uma solução

9

normalmente mais eficiente é obtida com o emprego de esquemas iterativos, como o Método de Gradientes Conjugados [Reddy e Gartling, 1994].

Outra forma de resolver o problema é através do emprego de esquemas explícitos, que permitem manter apenas os dados de um elemento na memória central, usando uma solução elemento por elemento. Neste caso a necessidade de memória é mínima. Contudo a solução por métodos explícitos implica em um reduzido passo de tempo de integração a ser empregado, como conseqüência da condição de estabilidade. Esta restrição pode não ser muito relevante para a análise de problemas com altos números de Reynolds, pois nestes existem restrições físicas ao passo de tempo de integração, tendo em vista que os fenômenos analisados envolvem altas freqüências e para capturá-los é necessário obter dados em intervalos de tempo reduzidos. Este fato é ainda mais evidente quando emprega-se uma metodologia de simulação de grandes escalas da turbulência, como o proposto neste trabalho. Uma grande vantagem do método explícito é a simplicidade do algoritmo, que leva a uma compensação para o reduzido passo de tempo a ser empregado, em termos de tempo de processamento.

Para melhorar a performance computacional do esquema explícito, visando aproveitar as características de processamento vetorial do super-computador CRAY do CESUP, propõem-se o emprego de um algoritmo de solução onde blocos de elementos são mantidos na memória simultaneamente [Petry et al., 1994]. Outra solução é o emprego de algoritmos que permitam estabelecer o passo de tempo por sub-domínios, de acordo com as dimensões do elemento, resultando em passos de tempo superiores para regiões de menor densidade de malha.

1.5. Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos

Conforme descrito anteriormente, os escoamentos turbulentos caracterizam-se por um comportamento difusivo, dissipativo, randômico, tridimensional e transiente [Hinze, 1975], [Tenekes e Lumley, 1972] e [White, 1974]. Segundo Rodi, 1980, a turbulência prevalece usualmente a elevados números de Reynolds, tem um largo espectro de tamanhos de estruturas e um espectro correspondente de frequências de flutuações de velocidades e pressões.

Os maiores estruturas, associadas às frequências de flutuações mais baixas, são determinadas por condições de contorno do escoamento, e sua dimensão é da mesma ordem de grandeza do domínio do escoamento. Os vórtices menores, associados às fequências mais altas de flutuações, são determinados pelas forças viscosas. A largura do espectro de frequências, ou seja, a relação entre as dimensões dos maiores e menores vórtices cresce com o número de Reynolds.

O movimento turbulento de grande escala é o principal responsável pelo transporte da quantidade de movimento, calor e contaminantes, assim como pela definição das correlações da turbulência. Portanto é o movimento de grandes escalas que deve ser simulado para determinar estas correlações, e as escalas de comprimento e velocidade introduzidas nos modelos clássicos de turbulência são parâmetros que caracterizam este movimento.

As grandes estruturas interagem com o escoamento principal, pois têm a mesma escala, extraindo energia cinética deste, as menores estruturas estão contidas nas estruturas maiores. Devido a esta característica do movimento turbulento, a energia extraída do movimento principal é transferida para as escalas imediatamente inferiores, destas para a próxima escala, sucessivamente, até que as forças viscosas tornem-se ativas e dissipem a energia. Este processo é chamado "cascata de energia". A taxa com que a energia do escoamento principal é alimentada para o movimento turbulento é determinada pelo movimento de grandes escalas, somente esta energia pode ser fornecida às escalas menores de vórtices, e ser dissipada pela viscosidade.

A cascata de energia é muito bem descrita por L.F.Richardson, através dos seguintes versos: "Grandes vórtices contém pequenos vórtices, que se alimentam da velocidade e pequenos vórtices, vórtices ainda menores, assim até a viscosidade."

É importante ressaltar que, apesar de o movimento de grandes escalas determinar a quantidade de energia a ser dissipada, a dissipação é um fenômeno viscoso e ocorre nas menores escalas. Portanto, a viscosidade não determina a quantidade de energia a ser dissipada, apenas a escala dos vórtices em que esta dissipação vai ocorrer. Desta forma, quanto mais elevado o número de Reynolds, menores são os vórtices de dissipação de energia com relação às grandes escala da turbulência. Esta característica do fenômeno físico da turbulência é determinante na limitação do emprego da simulação direta da turbulência, como será descrito a seguir.

Devido à interação com o escoamento principal, o movimento turbulento de grandes escalas é altamente influenciado pelas condições de contorno do escoamento. O escoamento principal tem muitas vezes uma direção preferencial, que é imposta ao movimento turbulento de grande escala. Esta característica torna o fenômeno turbulento altamente anisotrópico, sendo a intensidade das flutuações e as escalas de comprimento associadas dependentes da direção. No processo de cascata de energia, a sensibilidade à direção é reduzida. As grandes escalas de turbulência se distanciam das pequenas escalas nos escoamentos em que o número de Reynolds é suficientemente elevado e a sensibilidade direcional torna-se menos importante nas pequenas escalas, tornando o movimento turbulento de menor escala mais isotrópico. Este fenômeno, denominado isotropia local, onde o movimento das grandes escalas da turbulência é anisotrópico e o

movimento das pequenas escalas é isotrópico, é um conceito muito importante na modelagem da turbulência.

O sistema de equações resultantes da modelagem matemática baseada nas leis de conservação de massa, energia e quantidade de movimento do meio contínuo, possui solução exata apenas para um número reduzido de escoamentos simples. Tornando-se necessário o emprego de métodos numéricos para a análise de problemas reais de interesse em engenharia, envolvendo escoamentos laminares ou turbulentos.

No caso de escoamentos turbulentos sabe-se que é possível obter uma solução universal e independente de parâmetros empíricos através da solução direta das equações de Navier-Stokes para todas as escalas da turbulência. Contudo, a **simulação direta da turbulência** exige o emprego de malhas muito refinadas no processamento numérico. Conforme já foi destacado na seção de apresentação do problema, para a maioria dos escoamentos de interesse em engenharia, a resolução requerida conduz a um número de pontos na malha, bem como o número de intervalos de tempo necessários, impossíveis de processar nos melhores computadores da atualidade.

1.5.1. Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos via Equações Médias de Reynolds

Para a análise de problemas práticos de engenharia envolvendo escoamentos turbulentos tem se empregado o modelo baseado nas equações médias de Reynolds. Neste enfoque as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia são avaliadas considerando a média sobre intervalos de tempo suficientemente grandes para o estudo da turbulência. Devido a este processo de média no tempo aparecem incógnitas de tensões turbulentas e fluxos de calor nestas equações. Introduz-se modelos para representar os efeitos totais da turbulência no escoamento.

A solução obtida consiste em valores médios das variáveis do escoamento, sendo adequada para escoamentos médios estacionários, como a investigação de escoamentos em canais.

Os modelos representam os efeitos da turbulência tratando do transporte convectivo e difusivo dos parâmetros da turbulência, como energia turbulenta, vorticidade turbulenta, viscosidade turbulenta e tensões de Reynolds, estes devem ser ajustados para cada tipo de escoamento através da determinação de parâmetros do modelo. Revisões a respeito dos modelos de turbulência podem ser encontradas nas referências [Launder e Spalding, 1972], [Rodi, 1980], [Markatos, 1986] e [Marvin, 1990]. A aplicação dos modelos de turbulência não é universal, pois

estes somente podem ser aplicados aos casos para os quais tenham sido calibrados, contudo o custo computacional (tempo de processamento e armazenamento de dados) é muito reduzido quando comparado ao custo envolvido na simulação direta ou mesmo na simulação de grandes escalas.

O processo de média no tempo leva ao aparecimento de correlações estatísticas envolvendo as flutuações de velocidades, pressão e temperatura, nas equações de conservação. Estas correlações, conhecidas como tensões de Reynolds, constituem novas incógnitas, e não existe uma forma direta de obter os valores destas.

Os termos desconhecidos representam o transporte da quantidade de movimento média, de calor e massa devido ao movimento turbulento. Equações exatas de transporte turbulento podem ser desenvolvidas, gerando como novas incógnitas correlações de mais alta ordem. Este processo ocorre de maneira sucessiva. Para o fechamento das equações é necessário empregar um modelo de turbulência. O sistema é fechado com a adição de informações empíricas, sendo os métodos de cálculo baseados em aproximações estatísticas semi-empíricos. Estas informações empíricas são adicionadas ao sistema por métodos integrais ou por métodos de campo.

Os métodos integrais são adequados para escoamentos como o de camada limite de pequena espessura. Estes introduzem formas de perfil empíricas para reduzir as equações diferenciais parciais originais à equações ordinárias. Dados adicionais são necessários para descrever o efeito global da turbulência, como as leis de fricção ou dissipação de energia para a camada limite de parede.

Os métodos de campo empregam as equações diferenciais originais e requerem a especificação dos termos de transporte turbulentos em cada ponto do escoamento. Esta definição é feita através de modelos matemáticos do processo de transporte turbulento chamado modelo de turbulência.

O início das pesquisas sobre modelos de turbulência se deu com Prandtl em 1925, ampliando-se a partir de 1960. O primeiro modelo de turbulência, a hipótese do comprimento de mistura de Prandtl, relaciona os termos de transporte turbulento com os valores locais das quantidades do escoamento médio. Mesmo este modelo simplificado, durante muito tempo foi utilizado somente para análise de escoamentos similares, para os quais as equações diferenciais parciais de conservação de massa e quantidade de movimento podem ser reduzidas à equações ordinárias. As equações diferenciais parciais que governam os escoamentos não podiam ser resolvidas naquela época.

A partir dos anos 40, desencadeou-se o desenvolvimento de modelos mais complexos. Estes modelos mostraram o sentido a ser seguido, ou seja, a ligação algébrica entre os termos de transporte turbulento e as quantidades do escoamento médio, e desenvolveram equações diferenciais de transporte das quantidades turbulentas, como a energia cinética do movimento turbulento. Nos anos 60 os computadores se tornaram suficientemente rápidos e as técnicas numéricas desenvolvidas para calcular as equações diferenciais parciais para o escoamento médio, permitindo o emprego de modelos de turbulência complexos.

As equações para valores médios do escoamento são obtidas aplicando-se a hipótese de Reynolds às equações de Navier-Stokes. Esta descreve os valores instantâneos das variáveis do movimento turbulento como uma variação randômica em torno dos valores médios:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{v}'$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p} + \mathbf{p}'$$

$$\phi = \mathbf{\phi} + \phi'$$
(1.1)

onde a barra sobre a incógnita indica o valor médio e a aspa indica a flutuação instantânea em torno da média.

Define-se o operador de média como:

$$\overline{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_1 + \Delta t} \phi dt$$
(1.2)

Sendo a média das flutuações nula, ou seja:

$$\phi' = 0 \tag{1.3}$$

As equações de Reynolds (equações de Navier-Stokes com média de Reynolds) são obtidas a partir das equações de Navier-Stokes, substituindo os valores instantâneos das variáveis pelos valores médios mais suas flutuações. As equações assim obtidas são:

Conservação da massa:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho v_j} + \overline{\rho' v_j}] = 0$$
(1.4)

Conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \overline{v_{i}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \overline{v_{i} v_{j}}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \overline{\rho} \overline{v_{i'} v_{j'}}}{\partial x_{j}} = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\mu S_{ij} + (\mu^{b} + \frac{2}{3}\mu) S_{ll} \delta_{ij} \right]$$

$$- \left[\frac{\partial \overline{\rho' v_{i'}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho' v_{i'} v_{j}}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \overline{\rho' v_{j'} v_{i}}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \overline{\rho' v_{i'} v_{j'}}}{\partial x_{j}} \right] + f_{i}$$

$$(1.5)$$

onde:

$$\mathbf{S}_{ij} = \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{v}_i}}{\partial \mathbf{x}_j} + \frac{\partial \overline{\mathbf{v}_j}}{\partial \mathbf{x}_i}\right); \ \mathbf{S}_{ll} = \frac{\partial \overline{\mathbf{v}_l}}{\partial \mathbf{x}_l}; \ \frac{\partial \overline{\mathbf{v}_{l'}}}{\partial \mathbf{x}_j} = \mathbf{0}$$
(1.6)

Conservação de quantidades escalares:

$$\frac{\partial \overline{\rho} \,\overline{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{v_{j}} \,\overline{\rho} \,\overline{\phi}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \overline{\rho} \,\overline{v_{j'} \phi'}}{\partial x_{j}}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_{j}} \right) + \frac{\overline{Dp}}{Dt} - \left[\left(\frac{\partial \overline{\rho' \phi'}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{v_{j}} \,\overline{\rho' \phi'}}{\partial x_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\overline{\rho' v_{j'} \phi'} + \overline{\rho' v_{j'} \phi'} \right) \right] + \overline{S_{\phi}}$$

$$(1.7)$$

A equação de estado (gás homogêneo):

$$p \equiv R\overline{\rho T} = R(\overline{\rho} \,\overline{T} + \overline{\rho' T'}) \tag{1.8}$$

Os modelos de turbulência são conjuntos de equações adicionados às equações (1)-(8), que essencialmente visam modelar as tensões de Reynolds a partir de quantidades conhecidas ou calculadas, solucionando o problema de fechamento.

Os processos turbulentos são altamente dependentes do problema, a nível de grandes escalas dependem da geometria, enquanto as pequenas escalas dependem de efeitos viscosos, rotacionais e de flutuações. Somente as equações exatas formam um modelo matemático capaz de descrever o escoamento em detalhes com precisão, em qualquer situação.

Os modelos de turbulência descrevem aproximadamente o escoamento, e com um determinado conjunto de constantes empíricas, são válidos somente para determinado escoamento, ou na melhor das hipóteses, para um conjunto de escoamentos. O ideal é que o modelo proposto possa descrever com boa aproximação um grande número de escoamentos com um único conjunto de constantes.

O modelo mais universal pode não ser o mais adequado para determinado problema. Na prática o custo computacional e simplicidade de uso de um modelo são fatores importantes, e os modelos mais universais são geralmente os mais complexos e requerem mais tempo de processamento. A qualidade da simulação da turbulência necessária para obter uma simulação precisa do escoamento médio, depende da importância dos termos do transporte turbulento nas equações do escoamento. Concluindo, o melhor modelo depende do problema a ser tratado.

Launder e Spalding, 1972, classificaram os modelos de turbulência em três grupos principais:

- modelos algébricos de viscosidade turbulenta;

- modelos diferenciais de viscosidade turbulenta

- modelos empregando equações diferenciais para modelar diretamente as tensões de Reynolds.

Os dois primeiros baseiam-se na hipótese de Boussinesq (1877) de viscosidade turbulenta, descrita a seguir. O terceiro emprega equações de transporte das quantidades turbulentas diretamente. Exemplos de cada grupo de modelos são [Launder e Spalding , 1972]:

Modelos algébricos para a viscosidade turbulenta:

1.- Hipótese do comprimento de mistura de Prandtl;

2.- Hipótese de Similaridade de von Kármán

3.- Equações para viscosidade turbulenta (Eddy-Viscosity)

Modelos diferenciais para viscosidade turbulenta:

- 1. Modelo de Prandtl
- 2. Nee e Kovasznay
- 3. Kolmogorov

Modelos de transporte de tensões:

- 1. Bradshaw
- 2. Hanjalié (1970)/Rotta (1971)

Rodi, 1980, agrupa os modelos pelo número de equações diferenciais empregadas. Assim os modelos algébricos são classificados como modelos de nenhuma equação, ou zero equações. Os modelos de uma equação empregam uma equação diferencial que deve ser resolvida para obter os valores das quantidades turbulentas. Enquanto os modelos de duas equações, como o modelo k-ε, largamente empregado, envolvem duas equações diferenciais. Os modelos também são sub-divididos em modelos baseados na proposta de viscosidade turbulenta de Boussinesq, modelando esta quantidade; e modelos que tratam diretamente as tensões turbulentas.

Uma classificação apresentada por Rodi, 1980, com modelos característicos de cada grupo:

•Modelos de 0 equações:

- 1-Viscosidade e difusividade turbulenta constante
- 2-Modelos de comprimento de mistura
- 3-Modelo de camadas cizalhantes livres de Prandtl

•Modelos de uma equação:

- 1-Baseados na viscosidade turbulenta
- 2-Modelo de Bradshaw

•Modelos de duas equações:

- 1-Equações de comprimento de mistura
- 2-Modelo k- ϵ
- 3-Viscosidade turbulenta não isotrópica

•Modelos das tensões de Reynolds/ 6 equações de transporte.

O conceito de viscosidade turbulenta, proposto por Boussinesq em 1877, [Hinze, 1975], baseia-se em uma analogia com as tensões viscosas do escoamento laminar. Este considera que as tensões turbulentas são proporcionais ao gradiente de velocidades do escoamento principal, onde o coeficiente de proporcionalidade é chamado de viscosidade turbulenta.

Para uma situação geral de escoamento, este conceito pode ser expresso por:

$$\tau \equiv -\rho \overline{\mathbf{v}_{i'} \mathbf{v}_{j'}} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{v}_i}}{\partial \mathbf{x}_j} + \frac{\partial \overline{\mathbf{v}_j}}{\partial \mathbf{x}_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \,\delta_{ij}$$
(1.9)

Ao contrário da viscosidade molecular, a viscosidade turbulenta é uma propriedade do escoamento, não do fluido. Seu valor varia ponto a ponto no escoamento, de acordo com o estado local. Esta sugestão não constitui um modelo de turbulência. Os modelos propostos irão determinar o valor da viscosidade turbulenta em função de valores calculados do escoamento médio. O termo contendo o delta de Kronecker foi adicionado a expressão original da viscosidade turbulenta (este termo não é encontrado na referência [Launder e Spaldin, 1972]). O objetivo é tornar a expressão aplicável para escoamentos incompressíveis. O primeiro termo da equação (1.9) conduz às tensões normais:

$$\overline{\mathbf{v}_{1}^{\prime 2}} = -2_{\mathbf{v}_{1}} \frac{\partial_{\mathbf{v}_{1}}}{\partial_{\mathbf{x}_{1}}}, \ \overline{\mathbf{v}_{2}^{\prime 2}} = -2_{\mathbf{v}_{1}} \frac{\partial_{\mathbf{v}_{2}}}{\partial_{\mathbf{x}_{2}}}, \ \overline{\mathbf{v}_{3}^{\prime 2}} = -2_{\mathbf{v}_{1}} \frac{\partial_{\mathbf{v}_{3}}}{\partial_{\mathbf{x}_{3}}}$$
(1.10)

cuja soma é zero, segundo a lei de conservação de massa. Contudo as tensões normais são sempre positivas, e sua soma equivale ao dobro da energia cinética do movimento de flutuações:

$$k = \frac{1}{2} \left(\overline{v'_{1}}^{2} + \overline{v'_{2}}^{2} + \overline{v'_{3}}^{2} \right)$$
(1.11)

As tensões normais atuam como uma força de pressão, e por ser a energia cinética uma quantidade escalar como a pressão, este segundo termo da equação (1.9) constitui uma pressão. Neste contexto, quando a equação (1.9) é empregada para substituir o termo v_iv_j na equação de quantidade de movimento, esta segunda parte é incluída no termo de gradiente de pressão.

Em analogia com o transporte turbulento da quantidade de movimento, assume-se que o transporte turbulento de massa e calor é proporcional ao gradiente da quantidade transportada:

$$-\overline{\mathbf{v}_{i'}\phi'} = \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}_{i}}$$
(1.12)

onde Γ é a difusividade turbulenta de calor ou massa. Da mesma forma que a viscosidade turbulenta, esta é um propriedade do escoamento. A difusividade turbulenta relaciona-se com a viscosidade turbulenta através da expressão:

$$Pr_{t} = \frac{v_{t}}{\Gamma}$$
(1.13)

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento ou número de Schmidt. Experimentalmente verifica-se que o número de Prandtl turbulento varia pouco ponto a ponto no escoamento, bem como de escoamento para escoamento. Por esta razão muitos modelos empregam este parâmetro como uma constante.

O conceito de viscosidade turbulenta baseia-se em uma analogia entre o movimento molecular e o movimento turbulento. Pesquisadores como Bradshaw [Launder, 1972] inicialmente postulam que o princípio desta analogia não é correto, pois os vórtices turbulentos não constituem corpos rígidos que retêm sua identidade. Além disto os grandes vórtices são as estruturas responsáveis pelo transporte da quantidade de movimento e , consequentemente, o "caminho livre médio" não pode ser considerado de dimensões reduzidas se comparadas ao volume de controle. Tendo em vista estas considerações, foi proposto um novo enfoque para os modelos de turbulência, o modelamento direto das tensões turbulentas.

Visando considerar o desenvolvimento diferenciado das tensões de Reynolds e obter valores próprios para seu transporte, desenvolveram-se modelos que empregam equações de transporte individuais para cada termo do tensor de Reynolds, $\overline{v_i'v_j'}$. Equações de transporte são introduzidas para o transporte de massa e quantidades escalares, os modelos deste tipo são referenciados como esquemas de fechamento de segunda ordem. As equações para o transporte de $\overline{v_i'v_j'}$ e $\overline{v_i'\phi'}$ podem ser derivadas de forma exata, mas estes têm que ser modelados para obter um sistema fechado. A derivação das equações exatas automaticamente introduz termos que consideram efeitos de flutuações, rotacionais e outros.

Este enfoque tem atualmente larga aplicação em problemas práticos de engenharia, pois permite soluções com recursos computacionais bastante reduzidos quando comparado à análise através da solução direta ou da simulação de grandes escalas. Resultados importantes têm sido obtidos a partir da solução numérica das equações com médias de Reynolds para o escoamento turbulento [Hinze, 1975; Tenekes e Lumley, 1972; Rodi, 1980]. Esta abordagem apresenta bons resultados para o estudo de escoamentos médios estacionários, porém têm um alto grau de dependência do problema em conseqüência dos modelos serem ajustados para cada tipo de escoamento através da determinação de parâmetros empíricos. Para a análise de forças estacionárias médias agindo sobre corpos, como resultado da ação dos escoamentos, os modelos de turbulência baseados nas equações médias de Reynolds- Navier-Stokes, como o k- ε , são adequados. Por outro lado, a intensidade e freqüência das forças transientes são difíceis de prever com estes modelos. Este método permite obter correlações de freqüência do tipo número de Strouhal, mas correlações para a intensidade de flutuações de pressão, por exemplo, são praticamente inviáveis em geometrias complexas.

Para abordar problemas altamente transientes e nos quais os valores médios do campo de pressões, temperaturas e velocidades não são suficientes, é necessário o desenvolvimento de novas metodologias.

1.5.2 Simulação Direta da Turbulência

A evolução dos equipamentos e métodos computacionais vem permitindo o desenvolvimento de sistemas de análise de escoamentos turbulentos mais realistas e independentes do ajuste de parâmetros. A Simulação Direta, solução das equações de Navier-Stokes para todas as escalas da turbulência, é uma realidade. Experimentos numéricos desenvolvidos através da simulação direta da turbulência já constituem uma fonte de informações para a compreensão deste fenômeno. Atualmente, a simulação direta tem sido empregada para estudos de escoamentos com baixos ou moderados números de Reynolds, para a investigação acadêmica do escoamento turbulento, fornecendo dados para os métodos baseados em modelos e como forma de validação dos demais sistemas de análise [Lesieur et al., 1995; Kessler e Yang, 1996; Verstappen e Veldman, 1997].

Para proceder a simulação direta é necessário o emprego de uma discretização espacial e temporal que garantam a captura de todas as estruturas da turbulência. Em outras palavras, é necessário que o menor elemento, em uma malha de elementos finitos, tenha dimensões inferiores aos vórtices relativos à menor escala do processo turbulento. Além disto, o intervalo de tempo de integração deve ser suficientemente pequeno para garantir a captura das mais altas freqüências
envolvidas. Garantidas estas características do modelo computacional, emprega-se um método para a solução das equações de Navier-Stokes para efetuar a simulação direta. Dos campos de escoamento resultantes, tridimensionais e transientes, pode-se deduzir quaisquer dados de interesse.

Apesar da aparente simplicidade deste enfoque, o problema computacional resultante é bastante complexo. Para garantir a discretização necessária, o número de graus de liberdade (número de nós da malha de elementos finitos multiplicado pelo número de variáveis por nó) e de intervalos de tempo a ser processado conduz a um total de operações elevado. O número de graus de liberdade do problema computacional cresce com o aumento do número de Reynolds, pois nos escoamentos com elevados Reynolds existe um distanciamento das maiores e menores escalas relevantes. Considerando o tempo de processamento por operação, chega-se a tempos totais de processamento que tornam inviável esta abordagem em escoamentos de interesse em engenharia, diante da capacidade computacional existente.

A relação entre as maiores e menores escalas envolvidas, determina o número de graus de liberdade necessários para a modelagem numérica do escoamento, em cada uma das três dimensões envolvidas na descrição. Uma característica da turbulência é a imensa diferença entre estas escalas, principalmente a elevados número de Reynolds. Além disto, muitos autores destacam como característica essencial do escoamento turbulento a tridimensionalidade, portanto não consideram simulação direta da turbulência análises baseadas em modelos bidimensionais. A seguir apresenta-se uma análise [Grotzbach, 1987], sobre a discretização necessária para a simulação direta da turbulência.

As maiores escalas, L, são da ordem das dimensões geométricas do escoamento em contornos fechados ou da dimensão dos grandes vórtices. A menor escala relevante, ℓ , pode ser tomada como a espessura da subcamada viscosa próxima às paredes ou ao diâmetro dos vórtices nos quais ocorre a maior parte da dissipação da energia.

A seguinte estimativa é válida para calcular o número de graus de liberdade necessários para modelar com simulação direta da turbulência escoamentos a elevados números de Reynolds:

$$N = \frac{L}{\ell} = Re^{n}$$

(1.14)

 $n = 3/4 \rightarrow turbulência homogênea$

 $7/8 \le n \le 1 \rightarrow$ escoamento em canais

considerando que a análise da turbulência deve ser feita com modelos tridimensionais, o número total de graus de liberdade fica da ordem de:

$$N^3 = Re^{9/4}$$
. (1.15)

Por outro lado, para obter uma simulação representativa do fenômeno em estudo, o tempo total a ser simulado deve ser da ordem de:

$$T = \frac{L}{U}, \qquad (1.16)$$

enquanto o intervalo de tempo a ser empregado deve ser da ordem de:

$$\Delta t = \frac{\ell}{U}, \qquad (1.17)$$

onde U é uma velocidade de referência, Grotzbach, 1987 utiliza a velocidade máxima no escoamento em canais. O número total de passos de tempo requerido para a análise fica da ordem de Re^n .

Multiplicando o número total de graus de liberdade pelo número de passos de tempo necessários chega-se ao número total de operações a processar para obter uma simulação direta de escoamentos turbulentos da ordem de:

$$\operatorname{Re}^{4n} \ge \operatorname{Re}^{3} \tag{1.18}$$

Grotzbach, 1987, ilustra esta análise através do seguinte exemplo: Para um escoamento com número de Reynolds da ordem de 10^4 , tem-se uma previsão de 10^{12} operações. O tempo de processamento por intervalo de tempo por grau de liberdade, referido por Grotzbach, é de 10^{-4} s. Por tanto, o tempo de processamento para um problema deste tipo seria de 10^8 segundos, ou seja, 3 anos.

Para exemplificar foram feitas algumas considerações a respeito de problemas processados em outros trabalhos, [Petry e Awruch, 1992; Petry, 1993]. Nestes trabalhos resolvem-se diretamente as equações de conservação da massa e quantidade de movimento, empregando o método de elementos finitos, com uma modelagem bidimensional e transiente. O escoamento em

torno de um cilindro fixo com números de Reynolds entre 100 e 150.000 é simulado, bem como o escoamento em torno de um cilindro oscilante, com número de Reynolds em torno de 1500.

A simulação desenvolvida não pode ser definida como uma simulação direta da turbulência, tendo em vista o caráter tridimensional da turbulência não ser considerado e a baixa resolução da malha para os escoamentos com número de Reynolds elevados. Os resultados obtidos foram comparados com resultados experimentais e de outras simulações numéricas, estando de acordo com estes em sua maioria. As observações que seguem permitem verificar a proximidade da modelagem empregada com a simulação direta da turbulência, visando fornecer subsídios para compreender as grandezas envolvidas neste tipo de processamento. Segundo a equação (14) pode-se calcular o número de graus de liberdade necessários para modelar o escoamento para os diferentes números de Reynolds, visando a simulação direta (N(sd)).

Estes valores estão na tabela 1.1, juntamente com o número de graus de liberdade utilizado (N(u)) no trabalho [Petry, 1993]. O tempo de processamento necessário para uma simulação direta (t(sd)) é de (L/U), para um intervalo de tempo (dt(sd)) de (l/U), levando a um número total de passos de tempo (ndt) apresentados na tabela 1.2, juntamente com os valores utilizados no processamento:

Re	N(sd)	$N^{2}(sd)$	N ³ (sd)	$N^{2}(u)$
150000	7622	58x10 ⁶	$4.4 \mathrm{x} 10^{11}$	2431
1500	241	58000	1.4x10 ⁷	2431
100	32	1000	3.3x10 ⁴	2431

Tabela 1.1 – Comparação entre número de pontos necessários para simulação direta e número de pontos empregados [Petry, 1993].

Re	t(sd)	t(u)	ndt(sd)	ndt(u)	dt(sd)	dt(u)
150000	1x10 ⁻¹	2	7621	40000	1x10 ⁻⁵	5x10 ⁻⁵
1500	1x10 ⁻¹	10	241	100000	4x10 ⁻⁴	1X10 ⁻⁴
100	1x10 ⁻¹	6	32	60000	3x10 ⁻³	1x10 ⁻⁴

Tabela 1.2 – Comparação entre intervalos de tempo necessários para simulação direta e intervalos de tempo utilizados [Petry, 1993].

Quando foram efetuadas as simulações destes problemas, o tempo de processamento no super-computador CRAY-YMP2E esteve entre 8 a 12 horas. Calculando o tempo de processamento por intervalo de tempo por grau de liberdade do modelo, conforme dados do relatório de pesquisa [Petry, 1994], chega-se a um valor em torno de 1×10^{-4} s, enquanto Grotzbach anuncia um valor semelhante, em 1987. O que conduz a conclusão de que nestas condições, com um modelo bidimensional, o tempo necessário para este programa simular o exemplo com simulação direta da turbulência e Re = 150.000 seria de 511 dias (12.278 horas). Para a simulação tridimensional, considerando o mesmo tempo de processamento por grau de liberdade, por intervalo de tempo conclui-se que o tempo necessário seria de 389.433 dias (em torno de 10.800 anos).

O programa implementado em [Petry,1993] foi otimizado para a plataforma vetorial do super-computador, visto que este havia sido desenvolvido para processamento em estações SUN. O processo de vetorização deste programa está descrito em [Petry, 1994]. Como resultado deste trabalho, o tempo de processamento para a solução dos referidos problemas reduziu-se de 8 a 12 horas originais para valores em torno de 30 minutos. O tempo de processamento por grau de liberdade (nó da malha de elementos finitos), por intervalo de tempo de integração passou a 1.27×10^{-5} s, contra originais 1×10^{-4} s. Com base nestes valores, o tempo para simulação direta da turbulência no problema bidimensional do escoamento em torno do cilindro fixo, Re=150.000, seria da ordem de 65 dias (1560 horas). Extrapolando estes resultados, para uma simulação tridimensional, teriamos 496.000 dias (1.377 anos), tempo total de processamento.

Analisando o mesmo caso com o emprego do programa de análise tridimensional implementado no presente trabalho, processado no CRAY T94, com uma performance da ordem de $5x10^{-6}$ s por grau de liberdade por intervalo de tempo de integração, chega-se a um tempo estimado de 542 anos para processar a simulação direta do cilindro tridimensional.

As considerações acima evidenciam a limitação prática do emprego da simulação direta da turbulência como ferramenta para análise de engenharia, na atualidade. É possível empregar a simulação direta para análise de escoamentos com baixos números de Reynolds e obter informações importantes para a compreensão da turbulência. Muitas propriedades da turbulência podem ser estudadas a partir de escoamentos a baixos números de Reynolds. Esta consideração é verdadeira principalmente quanto ao decaimento da turbulência. Constatou-se também que utilizando malhas mais grosseiras é possível simular propriedades importantes das grandes escalas de turbulência. Estas permanecem inalteradas quando modelos simplificados são introduzidos para representar os

efeitos de escalas inferiores à menor escala possível de ser analisada pela representação computacional. Esta constatação deu origem à chamada simulação de grandes escalas.

1.5.3 Simulação de Grandes Escalas

A simulação de grandes escalas, com modelos submalha, é uma alternativa intermediária à solução direta de todas as escalas e aos modelos baseados na média de Reynolds [Clark et al., 1979; Lesieur et al., 1995]. Esta aproximação permite desenvolver a solução transiente das equações do escoamento em malhas com refinamento inferior ao necessário para a simulação direta, viabilizando a análise de escoamentos com número de Reynolds mais elevados. Constitui uma forma de análise numérica de escoamentos turbulentos na qual os grandes vórtices são resolvidos diretamente, enquanto os efeitos das pequenas escalas são representados por modelos de fechamento apropriados.

Em outras palavras, desenvolve-se a solução transiente das equações de Navier-Stokes em malhas com refinamento insuficiente para capturar todas as escalas da turbulência. O efeito das escalas de dimensões inferiores à resolução da malha são simulados através dos modelos de turbulência. Esta solução apresenta maior universalidade do que os modelos baseados nas equações médias de Reynolds, pois enquanto as grandes escalas dependem profundamente das características individuais do escoamento. Por outro lado, as pequenas escalas da turbulência, a serem modeladas, obedecem leis mais universais.

A simulação de grandes escalas é adequada para abordar escoamentos altamente transientes, quando existe interesse em avaliar picos de velocidades ou pressões. Esta é indicada para análise de escoamentos complexos como camada de mistura, jatos, escoamentos com separação e recolamento de camada limite [Silveira Neto et al, 1993; Ortega e Azevedo, 1995; Petry e Awruch, 1997b], escoamento interagindo com corpos imersos [Jansen,1999; Lee, 1998] e com recirculação [Zang et al. 1993; Kim e Menon, 1999].

No presente trabalho, o modelo proposto para a análise do escoamento emprega esta metodologia, ou seja, a simulação de grandes escalas com modelos sub-malha. Os fundamentos da simulação de grandes escalas podem ser encontrados nos trabalhos publicados por Ferziger, 1993, Rogallo e Moin, 1984 e Lesieur et al, 1995. Importantes subsídios foram encontrados também no texto publicado por Grotzbach, 1987, enquanto Findikakis e Street, 1982, e Jansen, 1999, apresentam aspectos relacionados com a simulação de grandes vórtices empregando o método de elementos finitos. Outras referências importantes estão indicadas no texto.

Os modelos sub-malha buscam representar o processo físico de transferência de energia entre as escalas resolvidas e as pequenas escalas (sub-malha). Estes modelos tem propósito semelhante aos modelos empregados nos esquemas via equações médias de Reynolds, porém é suficiente o emprego de modelos simples, tendo em vista que:

 a) o modelo deve considerar apenas o efeito de pequenas escalas, não necessita ser válido para todas as escalas;

b) o modelo não depende da geometria, pois as pequenas escalas são de natureza muito mais universal que a turbulência total.

As grandes escalas são definidas por Ferziger, 1993, tentando uniformizar o emprego deste termo entre os autores. Nesta definição o termo "grandes escalas" é um conceito local. As grandes escalas são aquelas que dominam a dinâmica local do escoamento. Esta categoria compreende as estruturas turbilhonares responsáveis pela maior parte do transporte da quantidade de movimento e da produção da turbulência. Em determinados escoamentos estes podem ter pequenas dimensões. Segundo esta definição, na simulação de grandes escalas, somente os vórtices que tem pequena importância na determinação das propriedades médias do escoamento são representados através de modelos. A elevados Re, estes constituem a escala inercial de Kolmogorov [Lesieur et al.,1995].

Muitos autores caracterizam o número de Reynolds em função das escalas da turbulência. O número de Reynolds turbulento mais empregado é definido com base na flutuação da velocidade (q) e a micro-escala de Taylor(λ), como:

$$R_{\lambda} = \frac{q\lambda}{v}.$$
 (1.19)

Este número de Reynolds é tipicamente duas ordens de magnitude inferior ao número de Reynolds macroscópico, usualmente empregado em engenharia.

É importante ressaltar ainda que a simulação de grandes escalas está relacionada, por definição, a modelos tridimensionais, contudo, para validação e desenvolvimento do método, têm sido simulados escoamentos bidimensionais. Esta aproximação é possível para escoamentos nos quais as grandes escalas da turbulência têm características essencialmente bidimensionais.

A simulação de grande escalas baseia-se no processo conhecido da turbulência denominado cascata de energia (Kolmogorov, 1941, [Hinze,1975]). Para Reynolds suficientemente

elevados, o escoamento turbulento é constituído por uma superposição de vórtices. Apenas os maiores vórtices são gerados diretamente da instabilidade do escoamento principal. Estes vórtices são também instáveis e esta instabilidade gera vórtices menores. Após diversas etapas deste processo de cascata de vórtices, as escalas características, bem como o Reynolds local tornam-se tão pequenos, que as forças viscosas dominam o escoamento e dissipam a energia cinética dos vórtices. A escala dissipativa independe das escalas relacionadas à geometria do escoamento, sendo esta definida pela viscosidade do fluido e quantidade de energia fornecida pelas escalas maiores, resultando na dissipação ε . De acordo com análise dimensional (Kolmogorov, 1941) esta escala dissipativa, (micro-escala de Kolmogorov) é definida como $\eta = (v^3/\varepsilon)^{1/4}$. A energia contida nestas escalas, em função do comprimento de onda $k=\eta^{-1}$, é calculada através da expressão E(k)= $\alpha\varepsilon^{2/3}k^{-5/3}$. A constante de Kolmogorov, α , é conhecida experimentalmente, assumindo o valor 1,6±0,06.

Uma importante característica deste processo de cascata de energia é que, independente da existência de direções predominantes no escoamento principal e no movimento de grandes escalas, esta é perdida a nível de pequenas escalas, obtendo-se uma isotropia local. Baseados nestas características universais da turbulência, é possível implementar modelos de SGS muito simples. O único dado empírico é a constante de Kolmogorov para o transporte da quantidade de movimento. Para o transporte de quantidades escalares existem leis similares. Estas leis universais aplicam-se apenas para números de Reynolds muito elevados, por tanto a validade dos modelos SGS baseados nestas leis restringe-se quando trata-se de Reynolds mais baixos.

Quando existe a interface com superfícies sólidas, as pequenas estruturas do escoamento próximo às paredes requerem uma densidade de malha excessiva, os custos computacionais podem inviabilizar o método como prática em engenharia. Grotzbach, 1987, destaca esta restrição para análise do escoamento próximo à parede, onde o Reynolds local decresce, sendo necessário adicionar dados empíricos na região próxima à parede. A sub-região inercial desaparece na região limite da sub-camada viscosa e as escalas não são mais isotrópicas, independente de quão elevado seja o número de Reynolds global. Micro-efeitos como rugosidade e similares tornam-se igualmente importantes nesta parte do escoamento. Na região de transição entre a sub-camada viscosa e o escoamento central turbulento, existe um modelo de universalidade similar ao modelo de Kolmogorov, o modelo de comprimento de mistura de Prandtl [Schlichting, 1968]. Na sub-camada viscosa e para paredes com rugosidade, dados empíricos tem que ser adicionados [Grotzbach, 1987].

Outra forma de enfrentar este problema consiste em utilizar resolução variável da malha, densificando o estudo sobre a vizinhança da parede; contudo, isto pode conduzir a problemas

numéricos, tais como a restrições de estabilidade do esquema de integração, o tempo de integração deve assumir valores inferiores ao mínimo calculado por $\Delta x/u$ (Δx - dimensão da malha, u-velocidade local).

A simulação de escoamentos próximo à parede é uma das dificuldades apresentada por diversos autores, no que se refere ao emprego da simulação de escoamentos turbulentos. Ferziger, 1993, discute a definição de condições de contorno e destaca também o problema da densidade necessária para simular a região próxima a parede.

Inicialmente a simulação direta e a simulação de grandes escalas foram aplicadas a problemas com turbulência homogênea, nas três dimensões. Nestes casos os problemas relacionados a condições de contorno estão equacionados. Emprega-se condições de contorno periódicas, adequadas para estes casos e que operam bem com métodos espectrais. Para superfícies de corpos imersos no escoamento emprega-se a condição de não deslizamento. Para escoamentos ao infinito são aplicados métodos apropriados, disponíveis. Quando se pretende resolver a camada limite próxima à parede, empregando a condição de contorno de não deslizamento, a turbulência próximo à parede contém estruturas muito pequenas, sendo necessário empregar malhas muito refinadas para sua resolução. Conduzindo a custos computacionais excessivos. A resolução das estruturas importantes no restante do escoamento, de maiores dimensões, pode ser feita com malhas mais grosseiras.

Os resultados obtidos em problemas de análise de forças sobre corpos imersos, sem resolver completamente a região da parede, são surpreendentes, tendo em vista o problema físico. Uma solução que tem sido empregada para representar o efeito da parede no escoamento exterior a esta região, com economia dos custos computacionais, é o uso da lei da parede como condição de contorno. Esta proposta foi apresentada inicialmente por Murakami, et al, 1989.

A condição de contorno do escoamento na entrada pode ser muito simples caso este seja laminar, mas este caso é raro em problemas reais. Normalmente o escoamento entrante é turbulento, afetando profundamente o efeito sobre as estruturas em contato com o escoamento. Quando a turbulência do escoamento de entrada não contém estruturas coerentes como um fator importante, uma aproximação empregada consiste em incluir uma força flutuante na entrada, com escala e intensidade apropriadas [Lee, et al 1991]. Outra solução é o emprego de outro escoamento mais simples relacionado como condição inicial ou de entrada. A determinação de condições de contorno para o fluxo de saída é mais simples, o essencial é colocar o final do domínio do escoamento suficientemente distante para não influenciar artificialmente a região de interesse.

Para deduzir as equações para simulação de grandes escalas, os campos de velocidade e pressão das grandes escalas são definidos por uma operação de filtro, aplicada às equações de

28

Navier-Stokes. Desta operação resultam termos não resolvidos pela malha, chamadas tensões de Reynolds sub-malha. (SGSRS - SubGrid Scale Reynolds Stress). Estes termos são processados a partir dos resultados dos campos de grandes escalas, empregando modelos de aproximação. Esta dedução será apresentada com mais detalhes no capítulo de modelagem matemática, tendo em vista que esta é a metodologia adotada no trabalho.

A primeira etapa desta aproximação é a decomposição das variáveis de campo f em componentes correspondentes às grandes escalas \overline{f} e às escalas inferiores a resolução da malha (SGS) f' [Findikakis et al, 1982].

As equações para as grandes escalas são obtidas aplicando a operação de filtro sobre as equações de conservação. As equações de massa e quantidade de movimento, por exemplo, podem ser escritas como:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{v}_j}}{\partial \mathbf{x}_j} = 0 \tag{1.22}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}_{i} \, \mathbf{v}_{j}}{\partial \mathbf{x}_{i}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{x}_{i}} = \mathbf{v} \, \nabla^{2} \overline{\mathbf{v}_{i}}$$
(1.23)

Sendo:

$$\overline{\mathbf{v}_i \, \mathbf{v}_j} = \overline{\overline{\mathbf{v}_i} \, \overline{\mathbf{v}_j}} + \overline{\overline{\mathbf{v}_i} \, \mathbf{v}_{j'}} + \overline{\mathbf{v}_{i'} \, \overline{\mathbf{v}_j}} + \overline{\mathbf{v}_{i'} \, \overline{\mathbf{v}_j}}$$

As variáveis \overline{v} são resolvidas diretamente, enquanto as variáveis v' devem ser modeladas.

Tradicionalmente empregam-se modelos de viscosidade turbulenta, baseados na proposta de Boussinesq que relaciona as componentes ij do tensor SGSRS ao tensor correspondente do campo de grandes escalas, conforme a equação (1.9). v_T é a viscosidade turbulenta, definida pelo modelo.

O modelo de Smagorisky tem sido utilizado largamente. Este apresenta bons resultados em escoamentos simples, para escoamentos mais complexos, próximo a superfícies sólidas, é necessário fazer ajustes específicos para cada caso. Ferziger, 1993, apresenta diversos modelos, destacando o modelo dinâmico de viscosidade turbulenta proposto por Germano et al, 1991 e modificado por Lilly, 1992.

Outros modelos sub-malha têm sido propostos; Lesieur e Métais, 1992, propõem o modelo função estrutura de velocidades, Murakami, 1993, propõem um modelo Smagorinsky

modificado, além de muitos outros. Lesieur et al., 1995, apresenta uma revisão sobre modelos submalha. Os artigos publicado por Murakami, 1993, e Menon, et al., 1996, apresentam estudos detalhado de diversos modelos, comparando com resultados de simulação direta e entre simulações de grandes escalas. Os modelos de pequenas escalas de Smagorinsky, viscosidade turbulenta dinâmico, energia cinética turbulenta, energia cinética turbulenta dinâmica, além de um modelo estocástico e de similaridade de escala, são apresentados e seus resultados comparados. Os modelos dinâmicos apresentam resultados que demonstram maior adaptabilidade para grandes variações nos regimes encontrados em escoamentos complexos, sendo uma característica procurada nas análises propostas na continuidade deste trabalho.

Em suas conclusões no artigo de 1980, Schuman, Grotzbach e Kleiser, salientam as seguintes vantagens da simulação direta e simulação de grandes escalas, comparando com o uso de modelos estatísticos para turbulência:

- a) a simulação direta leva em conta efeitos tridimensionais, essenciais para a turbulência;
- b) os modelos para escalas inferiores a resolução da malha (SGS) são mais universais;
- c) a simulação direta é mais simples e compreensível que as teorias estatísticas;
- d) a pressão, uma variável importante, é mais acessível;
- f) a simulação direta permite resolver efeitos no escoamento de grandes escalas, muito difícil de abordar através dos modelos estatísticos, por exemplo explosões;
- g) existem alguns casos em que a resolução por simulação direta não representa maior custo computacional que a solução por modelo estatístico.

Quando bem empregada, a simulação direta produz resultados comparáveis à qualidade dos dados experimentais. Quando comparada às técnicas experimentais apresenta vantagens e desvantagens. Dentre as vantagens está a definição clara de todas as condições e a produção de uma massa de dados detalhados de todas as variáveis de importância. Como desvantagem destaca-se a restrição de sua aplicação, restringindo-se a problemas com geometria simples e baixo número de Reynolds, em virtude de seu custo computacional impraticável em outros casos. Atualmente esta é empregada como uma ferramenta para estudar a turbulência, demonstrando capacidade para responder muitas questões sobre o fenômeno físico da turbulência e seu modelamento. Infelizmente ainda não constitui uma ferramenta prática em engenharia.

A simulação de grandes escalas é adequada para abordar escoamentos altamente transientes, quando existe interesse em avaliar picos de velocidades ou pressões, sendo indicada para

análise de escoamentos complexos como separação de camada limite e escoamento interagindo com corpos imersos.

Convém destacar que o emprego de clássicos modelos de turbulência ainda é válido e necessário. Contudo, à medida que ocorrerem avanços nos recursos computacionais disponíveis, estes tornarão viável a simulação direta da turbulência e a simulação de grandes escalas. A simulação direta não envolve dados empíricos e permite uma definição mais clara e próxima da realidade dos modelos computacionais.

A solução do escoamento turbulento baseado no escoamento médio, além das dificuldades em desenvolver modelos e calibrá-los para diversos escoamentos, não conduz a soluções adequadas para análise de todos os casos. O fenômeno de turbulência é de interesse em diferentes áreas da engenharia e da ciência. Cada área possui diferentes conceitos e necessidades a respeito do estudo da turbulência. Em determinadas aplicações, são suficientes valores médios, enquanto em outras é necessário definir amplitude de flutuações das variáveis e freqüências destas flutuações.

Quando se procura informações sobre forças estacionárias médias agindo sobre corpos, como resultado da ação dos escoamentos, os modelos de turbulência baseados nas equações médias de Reynolds- Navier-Stokes (RANS) como k-ε são adequados. Por outro lado, a intensidade e freqüência das forças transientes são difíceis de prever com estes modelos. É possível obter correlações de freqüência do tipo número de Strouhal, mas correlações para a intensidade de flutuações de pressão, por exemplo são muito difíceis, ou mesmo inviáveis em geometrias complexas. Estas limitações dos modelos, aliadas ao alto custo de testes em túneis de vento, sugerem a necessidade de evolução da dinâmica de fluidos computacional.

1.6 Programação de Alto Desempenho

Estudos importantes em engenharia envolvem problemas complexos, cuja análise numérica conduz a um elevado custo computacional. Em muitos casos, este tipo de análise torna-se improdutiva, tendo em vista os tempos de processamento e o volume de dados envolvidos. Com o desenvolvimento de plataformas computacionais de alto desempenho ampliaram-se as possibilidades de análise destes problemas, denominados problemas computacionais de grande porte. A evolução dos equipamentos também tem incentivado o emprego de modelos mais detalhados e realistas.

O problema a ser abordado é complexo, e requer o emprego de malhas tridimensionais com grande número de nós e processamento de muitos passos de tempo, ou seja, alto custo computacional, tanto em termos de memória requerida como em tempo de processamento.

Para solucionar os problemas relativos à memória central requerida propõem-se o emprego de um esquema explícito, pois neste esquema é necessário dispor das matrizes de um único elemento simultaneamente, apenas vetores globais devem ser gerados. O programa desenvolvido utiliza a integração explícita, mantendo os dados de um conjunto de elementos referentes ao máximo número possível na memória, visando ampliar as possibilidades de vetorização.

Este esquema leva a restrições quanto ao passo de tempo de integração, que fica limitado para garantir a estabilidade. O critério para determinar o intervalo de tempo máximo está relacionado ao tamanho do elemento. Como resultado temos um pequeno passo de tempo, em princípio agravando os problemas relativos a tempos de processamento. Contudo, a análise de escoamentos com alto número de Reynolds é obrigatoriamente conduzida por um pequeno passo de tempo de integração devido à velocidade dos fenômenos envolvidos.

A solução apresentada para reduzir o tempo de processamento consiste no desenvolvimento de um sistema de análise baseado em uma plataforma computacional de alta performance, o computador CRAY do centro Nacional de Supercomputação. O trabalho desenvolvido até o momento empregou o computador CRAY-T94. Este equipamento tem memória central de 2Gbytes e dois processadores de capacidade nominal de 1.8 Gflops. A memória central é compartilhada (shared memory) pelos processadores e o equipamento não possui memória virtual. Uma palavra equivale a 64 bits, a capacidade de armazenamento em disco é de 53 Gbytes. O sistema operacional é o UNICOS (Unix CRAY Operation Sistem) e os compiladores disponíveis são FORTRAN e C. Os programas desenvolvidos neste trabalho empregam o compilador FORTRAN. Este equipamento tem como principal característica a alta performance, relacionada com o processamento vetorial.

Para efetivo uso das potencialidades de processamento vetorial e paralelo dos equipamentos, é essencial o desenvolvimento de programas otimizados e adequados às características da plataforma empregada.

O termo "processamento paralelo" é empregado para referir-se ao multiprocessamento, ou seja, execução simultânea de um programa em diversos processadores. A programação para o multiprocessamento exige um algoritmo complexo, extremamente específico para a arquitetura do equipamento. Programar de forma otimizada para uma máquina de 4 processadores não é similar à programação para um equipamento de 64 processadores. Esta característica é referida como a não existência de fator de escala ("scalability") [Leiss, 1990]. Além disto, os compiladores têm poucos

recursos quando se trata de paralelização automática. A redução do tempo de processamento com a paralelização é determinado por um fator de ganho inferior a um, multiplicado pelo número de processadores disponíveis. A paralelização é aplicada a problemas onde o processamento vetorial otimizado ao máximo não viabiliza a solução ou em máquinas de elevada granularidade (grande número de processadores).

A programação otimizada para a vetorização é normalmente o ponto de partida para o desenvolvimento de algoritmos de alta performance, pois, mesmo o processo de paralelização, tem como premissa a programação otimizada para cada processador vetorial. Considerando estes fatores, aliados às características dos computadores CRAY-YMP e CRAY-T94 de baixa granularidade (2 processadores) e elevada capacidade de processamento vetorial, foi desenvolvido um estudo sobre as técnicas de vetorização [Petry et al., 1994].

Os programas foram desenvolvidos em FORTRAN e os exemplos foram processados no Centro Nacional de Supercomputação, em computadores CRAY-YMP2E e T94.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA

2.1 Equações que Governam o Escoamento

As equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento consistem o sistema que descreve o escoamento de um fluido. Para análise de um escoamento tridimensional, transiente, isotérmico, as equações que governam o problema são:

Equações de Conservação de Quantidade de Movimento

,

$$\frac{D\rho v_i}{Dt} - \frac{\partial (\sigma_{ij} - p\delta_{ij})}{\partial xj} = f_i \qquad (i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.1)$$

Equação de Conservação de Massa

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0 \qquad (i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.2)$$

Com as condições de contorno:

$$\mathbf{v}_{i} = \hat{\mathbf{v}}_{i}$$
 em Γ_{v} (2.3)

$$(\sigma_{ij} - p\delta_{ij})\mathbf{n}_{j} = \mathbf{t}_{i}$$
 em Γ_{v} (2.4)

e condições iniciais

$$\mathbf{v}_{i} = \hat{\mathbf{v}}_{i0} \qquad \qquad \text{em } \mathbf{t} = \mathbf{0}, \Omega \qquad (2.5)$$

$$\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}}_0 \qquad \qquad \text{em } \mathbf{t} = \mathbf{0}, \Omega \qquad (2.6)$$

Para um fluido newtoniano, é válida a seguinte equação constitutiva:

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \lambda \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}$$
(2.7)

Sendo

 $\frac{D(\bullet)}{Dt}$ - derivada total

ρ - massa específica do fluido

vi - componente da velocidade na direção i

x_i - coordenada na direção i

p - pressão

f_i - componente das forças de campo na direção i

 \hat{v}_i - valores prescritos da componente i da velocidade no contorno indicado

 δ_{ij} - delta de Kroenecker

- n_i cosseno diretor do vetor normal ao contorno
- ti valores prescritos das forças de superfície no contorno
- μ coeficiente de viscosidade dinâmica do fluido
- λ coeficiente de viscosidade volumétrica do fluido

Reescrevendo as equações (2.1) e (2.2), substituindo a equação constitutiva (2.7) e expandindo a derivada total, estas passam a ser:

Equações de Conservação de Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_{i}) + v_{j}\frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho v_{i}) + \frac{\partial p}{\partial x_{j}}\delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left\{\mu\left(\frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}}\right) + \lambda\left(\frac{\partial v_{k}}{\partial x_{k}}\right)\delta_{ij}\right\} - f_{i} = 0$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.8)$$

Equação de Conservação de Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho v_{j} \right) = 0 \qquad (i, j, k = 1, 2, 3) \, \text{em}\Omega \qquad (2.9)$$

Adicionadas à estas equações condições de contorno, (2.3) e (2.4), e condições iniciais (2.5) e (2.6). Sendo que a condição de contorno (2.4) pode ser reescrita, considerando a equação (2.7):

$$\left\{\mu\left(\frac{\partial \mathbf{v}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \frac{\partial \mathbf{v}_{j}}{\partial \mathbf{x}_{i}}\right) + \left[\lambda\left(\frac{\partial \mathbf{v}_{k}}{\partial \mathbf{x}_{k}}\right) + p\right]\delta_{ij}\right\}n_{j} = t_{i} \qquad \text{em }\Gamma_{t} \qquad (2.10)$$

Considerando a equação (2.9), pode-se reescrever a equação (2.8) como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho v_{i} v_{j}) + \frac{\partial p}{\partial x_{j}}\delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left\{\mu\left(\frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}}\right) + \lambda\left(\frac{\partial v_{k}}{\partial x_{k}}\right)\delta_{ij}\right\} - f_{i} = 0$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.11)$$

Os escoamentos a serem analisados neste trabalho são escoamentos incompressíveis. Um escoamento totalmente incompressível é um escoamento ideal, onde assume-se um valor constante para a massa específica. Esta hipótese é válida para abordar escoamentos caracterizados por baixos números de Mach (velocidades do escoamento muito inferiores à velocidade de propagação do som no fluido). Considerando massa específica constante, as equações 2.9 e 2.11, para o escoamento incompressível podem ser escritas como:

$$\frac{\partial v_{j}}{\partial x_{j}} = 0 \qquad (i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.12)$$

$$\rho \frac{\partial v_{i}}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(v_{i} v_{j} \right) + \frac{\partial p}{\partial x_{j}} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ \mu \left(\frac{\partial v_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial v_{j}}{\partial x_{i}} \right) + \lambda \left(\frac{\partial v_{k}}{\partial x_{k}} \right) \delta_{ij} \right\} - f_{i} = 0 \qquad (i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.13)$$

As equações acima são usualmente empregadas para a análise de escoamentos incompressíveis. Contudo, conforme foi discutido na revisão bibliográfica (1.4), para a análise numérica de escoamentos incompressíveis é necessário adotar algum esquema para superar complicações devidas à incompressibilidade.

Neste trabalho considera-se um fluido quase-incompressível [Kawahara e Hirano, 1983], semelhante ao método de pseudo-compressibilidade [Chorin, 1980]. Esta abordagem consiste em assumir que as variações da massa específica são desprezíveis, mas admite-se um valor finito para a velocidade de propagação do som. Da hipótese da incompressibilidade total deriva-se que a velocidade de propagação do som no escoamento é infinita; esta é uma condição ideal, pois nos escoamentos reais a propagação do som sempre ocorre com uma velocidade finita. Por esta razão, o esquema é também referido como incompressibilidade real.

Esta consideração permite deduzir uma equação de conservação de massa que contém a derivada da pressão no tempo, evitando o aparecimento de zeros na diagonal principal da matriz de massa da formulação de elementos finitos.

Para deduzir a equação de conservação de massa de um escoamento quaseincompressível considera-se a equação (2.9), e sendo [Schlichting, 1979]:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}(\boldsymbol{\rho}) \tag{2.14}$$

logo:

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$
(2.15)

37

Sendo a velocidade do som definida por:

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \boldsymbol{\rho}} = \mathbf{C}^2 \tag{2.16}$$

Logo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} \frac{1}{C^2}$$
(2.17)

Substituindo (2.17) em (2.9) e multiplicando por C^2 , obtém-se a forma final da equação de conservação de massa para escoamentos quase-incompressíveis:

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + C^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho v_j \right) = 0 \qquad (j = 1, 2, 3) \text{ em } \Omega \qquad (2.18)$$

Considerando a massa específica constante, multiplicando e dividindo a equação (2.11) pela massa específica, a equação de conservação da quantidade de movimento pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho v_{i} v_{j}) + \frac{\partial p}{\partial x_{j}} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ v \left(\frac{\partial}{\partial x_{j}}(\rho v_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}}(\rho v_{j}) \right) + \frac{\lambda}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_{k}}(\rho v_{k}) \right) \delta_{ij} \right\} - f_{i} = 0$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega$$
 (2.19)

Onde $v=\mu/\rho$, é a viscosidade cinemática do fluido.

A condições de contorno (2.10) também pode ser reapresentada como:

$$\left\{ \left[-p + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} (\rho v_{k}) \right] \delta_{ij} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} (\rho v_{i}) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} (\rho v_{j}) \right] \right\} n_{j} = t_{i} \qquad \text{em } \Gamma_{t} \qquad (2.20)$$

As equações (2.18) a (2.19), juntamente com as condições de contorno (2.3) e (2.20) e condições iniciais (2.5) e (2.6), descrevem o escoamento de fluidos viscosos, transientes, tridimensionais, quase-incompressíveis e isotérmicos. Estas poderiam ser empregadas para a análise de escoamentos turbulentos via simulação direta. Contudo, como foi discutido anteriormente, a discretização espacial e temporal necessárias para análise de problemas práticos de engenharia por simulação direta ainda é superior à discretização possível nos computadores atuais. Conforme foi apresentado no Capítulo 1, as alternativas à simulação direta

para análise do escoamento turbulento são o emprego das equações médias de Reynolds ou a simulação de grandes escalas. Neste trabalho emprega-se a simulação de grandes escalas, tendo sido implementados dois modelos para representar os efeitos das escalas inferiores à resolução da malha, o modelo de Smagorinsky e um modelo dinâmico de viscosidade turbulenta [Germano et al., 1991; Lilly, 1992]. As equações empregadas são apresentadas nos próximos parágrafos.

2.2. Equações Para Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Turbulentos

As equações que governam as grandes escalas de escoamentos turbulentos isotérmico são obtidas aplicando-se um operador filtro espacial às equações de conservação de massa (2.18) e quantidade de movimento (2.19) apresentadas no item 2.1. Desta operação resultam termos não resolvidos pela malha, chamadas tensões de Reynolds de sub-malha (Sub Grid Scale Reynolds Stress). Estes termos são processados a partir dos resultados dos campos de grandes escalas, empregando modelos de aproximação.

A primeira etapa [Findikakis e Street, 1982] desta aproximação é a decomposição das variáveis de campo em componentes correspondentes às grandes escalas (identificadas pela sobrebarra) e às escalas sub-malha (identificadas pelo apóstrofe):

$$\mathbf{v}_{i} = \overline{\mathbf{v}_{i}} + \mathbf{v}_{i}^{\prime} \tag{2.21}$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p} + \mathbf{p}' \tag{2.22}$$

$$\rho = \rho + \rho' \tag{2.23}$$

Ao assumir a hipótese de que a massa específica é constante, tem-se $\rho' = 0$ e portanto:

$$\rho = \overline{\rho} \tag{2.24}$$

É importante ressaltar que as equações (2.21),(2.23) e (2.24) não estão relacionadas com a hipótese de Reynolds discutida na secção 1.5.1, apesar da semelhança da expressão matemática.

Leonard, 1974, define a componente \overline{f} como a convolução entre a variável u e uma função de filtro G(x):

$$\overline{f}(x) = \int G(x - x') f(x') dx'$$
 (2.25)

Sendo G uma função filtro, por exemplo a função filtro "box", definida como:

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{pmatrix} \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\Delta_{i}} & \text{para } |\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{i}'| < \frac{\Delta_{i}}{2} \\ 0 & \text{para } |\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{i}'| > \frac{\Delta_{i}}{2} \end{pmatrix}$$
(2.26)

onde Δ_i é a dimensão do filtro na direção i, e n corresponde ao número de dimensões.

Quando um filtro uniforme é empregado, as operações matemáticas de filtro e derivadas parciais são comutativas. Outras propriedades da operação de filtro espacial são:

$$\overline{\overline{g}\overline{f}} \neq \overline{g}\overline{f}$$
(2.27)

$$\overline{\overline{g}f'} \neq \overline{g}\overline{f'}$$
(2.28)

$$\overline{\overline{g}f'} \neq 0 \tag{2.29}$$

Procedendo a filtragem das equações (2.18) e (2.19) e considerando (2.21), (2.22) e (2.27-29) obtém-se:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{p}}}{\partial t} + C^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{\mathbf{v}}_j \right) = 0$$
(2.30)

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{v}_{i} \right) &+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v}_{i} \overline{v}_{j} \right) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{j}} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ \nu \left(\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v}_{i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{v}_{j} \right) \right) + \frac{\lambda}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{v}_{k} \right) \right) \delta_{ij} \right\} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ \rho \left(L_{ij} + C_{ij} + \overline{v'_{i} v'_{j}} \right) \right\} - f_{i} = 0 \end{split}$$

 $(j = 1, 2, 3) \text{ em } \Omega$ (2.31)

Sendo:

 $\overline{v_i}$ -componente, correspondente às grandes escalas, do vetor de velocidade na direção x_i

p - pressão, componente correspondente às grandes escalas

 v'_i -componente, correspondente às escalas sub-malha, do vetor de velocidade na direção x_i

$$\mathbf{L}_{ij} = \overline{\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j} - \overline{\mathbf{v}_i \mathbf{v}_j}$$
, termos de Leonard

 $Cij = \overline{v_i v_j}' + \overline{v_i' v_j}, \text{ termos cruzados}$ $\overline{v_i' v_j'}, \text{ tensor de Reynolds de sub-malha}$

Observe-se que os termos não lineares, após a aplicação da operação de filtro, podem ser escritos como:

$$\overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}} = \overline{\overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}}} + \overline{\overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}}} + \overline{\overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}}} + \overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}} + \overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}}$$
(2.32)

Devido aos valores das variáveis filtradas não serem valores constantes no espaço, o filtro do produto de duas variáveis filtradas não é igual ao produto das variáveis filtradas: $\overline{v_i v_j} \neq \overline{v_i v_j}$. Esta observação foi feita inicialmente por Leonard, 1974, que propôs termos adicionais para uma melhor aproximação. Clark, et al., 1979, propõem uma aproximação para os termos envolvendo médias de produtos das variáveis de grandes escalas e de escalas inferiores. Partindo de uma expansão em série de Taylor da variável filtrada, em torno do centro do volume do filtro (x₀), obtém-se:

$$\overline{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) + \frac{\Delta_k^2}{4\gamma} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{u}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_k \partial \mathbf{x}_k} \right)_{\mathbf{x}_0} + \mathcal{O}(\Delta_1^4, \Delta_2^4, \Delta_3^4)$$
(2.33)

Para $u = \overline{v_i v_j}$, a expressão (2.14) leva a expressão de Leonard (1974). Para $u = v_i v_j$, a expressão (2.14) conduz a aproximação de Clark et al., 1979. Conseqüentemente, os valores filtrados dos termos não lineares podem então ser aproximados por:

$$\overline{\mathbf{v}_{i} \mathbf{v}_{j}} \approx \overline{\mathbf{v}_{i}} \overline{\mathbf{v}_{j}} + \mathbf{L}_{ij} + \mathbf{C}_{ij} + \overline{\mathbf{v}_{i}' \mathbf{v}_{j}'}$$
(2.34)

sendo
$$C_{ij} + L_{ij} = \frac{\Delta_k^2}{2\gamma} \frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_k} \frac{\partial v_j}{\partial x_k}$$
 (2.35)

Esta aproximação também é válida quando aplicada a função filtro "box", neste caso γ =6.

Os termos L_{ij} e C_{ij} podem ser desprezados [Findikakis e Street, 1982], estudos anteriores [Petry e Awruch, 1997b] mostraram que a consideração destes termos alterou de forma desprezível os resultados e aumentou significativamente o tempo de processamento (da ordem de 20% de acréscimo). A equação (2.31) fica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \overline{v_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{j}} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ v \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{v_{j}} \right) \right] - \frac{\lambda}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{v_{k}} \right) \right] \delta_{ij} + \overline{v_{i}' v_{j}'} \right\} - \overline{f}_{i} = 0$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.36)$$

O mesmo processo descrito acima é aplicado à equação de condição de contorno (2.20), resultando:

$$\left\{ \left[-\overline{p} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{v_{k}} \right) \right] \delta_{ij} + \nu \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{v_{j}} \right) \right] \right\} n_{j} = t_{i} \quad \text{em } \Gamma_{v}$$
(2.37)

As equações (2.30) e (2.36), juntamente com as condições de contorno (2.3) e (2.37) e condições iniciais (2.5) e (2.6) governam o escoamento turbulento, isotérmico e quase-incompressível, de um fluido newtoniano. Os termos $\overline{v_i'v_j'}$ são resultado do movimento das escalas inferiores à resolução da malha, e devem ser modelados.

2.3 Modelos de Turbulência Sub-Malha

Os modelos sub-malha visam representar a transferência de energia entre as escalas resolvidas e as escalas sub-malha. Estes modelos têm o mesmo propósito dos modelos convencionais de turbulência, porém é suficiente o emprego de modelos simples, tendo em vista que:

 a) no modelo deve considerar-se apenas o efeito de pequenas escalas, ou seja, não necessita ser válido para todas as escalas;

b) o modelo não depende da geometria, pois as pequenas escalas são de natureza muito mais universal que a turbulência total.

Os dois modelos implementados são baseados no conceito de viscosidade turbulenta, baseados na hipótese de Bousinesq, sendo o tensor de Reynolds sub-malha, para escoamentos incompressíveis, usualmente modelado por:

$$-\overline{\mathbf{v}_{i}'\mathbf{v}_{j}'} = 2\mathbf{v}_{t}\overline{\mathbf{S}}_{ij} - \frac{2}{3}\mathbf{k}_{SM}\delta_{ij}$$
(2.38)

sendo que \overline{Sij} depende das escalas resolvidas explicitamente e é definido como:

$$\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{v}_j}{\partial x_i} \right)$$
(2.39)

logo:

$$\overline{-\mathbf{v}_{i}'\mathbf{v}_{j}'} = \mathbf{v}_{t} \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{v}_{i}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \frac{\partial \overline{\mathbf{v}_{j}}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \right) - \frac{2}{3} \mathbf{k}_{SM} \delta_{ij}$$
(2.40)

 k_{SM} é a energia cinética turbulenta sub-malha, $k_{SM} = \frac{1}{2} \overline{v_i' v_i'}$ e v_t é a viscosidade turbulenta, calculada de acordo com o modelo, conforme será descrito a seguir.

Contudo esta expressão foi obtida da expressão original de Boussinesq, que definia:

$$\overline{-\mathbf{v}_{i}'\mathbf{v}_{j}'} = \mathbf{v}_{t} \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{v}_{i}}}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \frac{\partial \overline{\mathbf{v}_{j}}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \right).$$
(2.41)

O termo contendo a energia cinética sub-malha foi introduzido para compatibilizar o modelo com a equação de conservação de massa dos escoamentos incompressíveis [Hinze, 1975], pois, empregando a equação (2.41), obtém-se a seguinte expressão:

$$\overline{-\mathbf{v}_{i}'\mathbf{v}_{i}'} = 2\mathbf{v}_{t}\frac{\partial\overline{\mathbf{v}_{i}}}{\partial\mathbf{x}_{i}}$$
(2.42)

Nessa equação o termo do lado direito é nulo para um escoamento incompressível (equação (2.12)), enquanto o lado esquerdo somente será nulo caso não existam escalas sub-malha, pois representa o dobro da energia cinética sub-malha (k_{SM}). Para compatibilizar o modelo com a condição de incompressibilidade foi incluída na expressão 2.41 o termo que inclui k_{SM} , resultando na equação (2.38).

Porém neste trabalho não é utilizada a equação (2.12) para a continuidade, mas a (2.18) que representa a conservação de massa para escoamentos quase-incompressíveis. Neste caso a expressão do lado direito de (2.42) não se anula e não existe incompatibilidade da equação (2.42) com a continuidade. Para as equações que descrevem o escoamento quase-incompressível, o modelo de viscosidade turbulenta adequado é a expressão original de Boussinesq (2.41).

2.3.1 Modelo de Smagorinsky

O modelo de Smagorinsky, de 1963, [Findikakis e Street, 1983; Lesieur et al, 1995] tem sido tradicionalmente empregado para representar os efeitos das escalas sub-malha, em simulação de grandes escalas. É um modelo de viscosidade turbulenta onde as tensões de Reynolds sub-malha são modeladas pela equação (2.41), sendo v_t a viscosidade turbulenta para as escalas sub-malha, definida como:

$$\mathbf{v}_{t} = \mathbf{C}_{\mathbf{S}}^{2} \,\overline{\boldsymbol{\Delta}}^{2} \, \left| \,\overline{\mathbf{S}} \, \right| \tag{2.43}$$

Sendo que, $\overline{\Delta}$ é uma escala associada com o filtro utilizado para definir o campo de grandes escalas, neste trabalho calculada por:

$$\overline{\Delta} = \sqrt[3]{\prod_{i=1}^{3} \Delta x_i}$$
(2.44)

$$\left|\overline{\mathbf{S}}\right| = \sqrt{2\overline{\mathbf{S}}_{ij}\overline{\mathbf{S}}_{ij}} \tag{2.45}$$

e C_s é a constante de Smagorinsky, assumindo valores entre 0.1 e 0.22.

Porém como o modelo de Smagorinsky apresenta limitações, especialmente para escoamentos em transição, estudou-se o emprego de outro modelo sub-malha. Os modelos dinâmicos são referidos por diversos autores por demonstrar maior adaptabilidade para grandes variações nos regimes encontrados em escoamentos complexos, sendo uma característica procurada na análise proposta neste trabalho.

2.3.2 Modelo Dinâmico de Viscosidade Turbulenta

O modelo dinâmico de viscosidade turbulenta proposto por Germano et al., 1991, e modificado por Lilly, 1992, foi implementado. O tensor de Reynolds de sub-malha também é aproximado pela equação (2.41), contudo a viscosidade turbulenta é definida como:

$$v_{t} = C(\mathbf{x}, t)\overline{\Delta}^{2} \left| \overline{S} \right|$$
(2.46)

O coeficiente dinâmico é calculado em função das características locais do escoamento, empregando-se um processo de dupla filtragem. O cálculo de C(x,t) está baseado em informações das menores escalas resolvidas, sendo definido como:

$$C(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}$$
(2.47)

Sendo os tensores Lij e Mij definidos como:

$$L_{ij} = \left\langle \overline{\mathbf{v}}_{i} \,\overline{\mathbf{v}}_{j} \right\rangle - \left\langle \overline{\mathbf{v}}_{i} \right\rangle \left\langle \overline{\mathbf{v}}_{j} \right\rangle \quad \mathbf{e} \qquad \mathbf{M}_{ij} = \left\langle \overline{\Delta} \right\rangle^{2} \left| \left\langle \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle \left| \left\langle \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle - \left\langle \overline{\Delta}^{2} \left| \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right| \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle$$
(2.48)

$$\left\langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \left\langle \bar{\mathbf{v}}_{i} \right\rangle}{\partial \mathbf{x}_{j}} + \frac{\partial \left\langle \bar{\mathbf{v}}_{j} \right\rangle}{\partial \mathbf{x}_{i}} \right) \qquad \left| \left\langle \bar{\mathbf{S}} \right\rangle \right| = \sqrt{2 \left\langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle \left\langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle} \tag{2.49}$$

 $\left<\overline{\Delta}\right>$ - comprimento característico do segundo filtro, sendo $\left<\overline{\Delta}\right>$ > $\overline{\Delta}$.

Nas equações acima, a barra indica a primeiro processo de filtragem (filtro à nível de malha) e o símbolo $\langle \rangle$ refere-se ao segundo processo de filtragem (filtro teste). O processo de segunda filtragem será discutido no próximo capítulo (Modelagem Numérica e Aspectos Computacionais)

2.4 Equações que Governam o Escoamento Turbulento Empregando Modelo Sub-Malha de Smagorinsky e Modelo Dinâmico de Viscosidade Turbulenta

As equações que governam o problema são escritas em sua forma final nesta seção. A **equação de conservação de massa**, apenas repetindo a (2.30), escreve-se como:

$$\frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + C^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{v}_j \right) = 0 \qquad (j = 1, 2, 3) \text{ em } \Omega \qquad (2.50)$$

A equação de conservação de quantidade de movimento, (2.36) substituindo as tensões de Reynolds sub-malha pela expressão (2.41), pode ser expressa como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \overline{v_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{j}} \delta_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ (v + v_{t}) \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{v_{j}} \right) \right] - \frac{\lambda}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{v_{k}} \right) \right] \delta_{ij} \right\} - \overline{f}_{i} = 0$$

$$(i, j, k = 1, 2, 3) \operatorname{em}\Omega \qquad (2.51)$$

Com as condições de contorno (2.3) e (2.37), esta última considerando também a equação (2.41), pode ser expressa como:

$$\left\{ \left[-\overline{p} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{v_{k}} \right) \right] \delta_{ij} + (v + v_{t}) \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{v_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{v_{j}} \right) \right] \right\} n_{j} = t_{i} \qquad \text{em } \Gamma_{t}$$

$$(2.52)$$

e as condições iniciais estão definidas pelas equações (2.5) e (2.6).

Por ter empregado a equação (2.41), adequada à formulação de escoamentos quaseincompressíveis, em lugar da expressão usual para escoamento incompressíveis, equação (2.40), a pressão nestas equações não é a pressão modificada. Apenas quando a (2.40) é empregada o termo da pressão na equação de conservação da quantidade de movimento é modificado e passa a incluir a energia cinética sub-malha, conforme a discussão apresentada na seção 1.5.1. ao comentar a equação (1.9).

O fechamento deste sistema de equações é feito através dos modelos de Smagorinsky, conforme a equação (2.43), ou do Modelo Dinâmico, descrito pelas equações (2.46) a (2.49).

O próximo capítulo apresenta as equações acima discretizadas no tempo e no espaço, através de um esquema de Taylor-Galerkin, descreve ainda alguns aspectos relevantes do processo

computacional, assim como a metodologia proposta e empregada para o processo de segunda filtragem do modelo dinâmico sub-malha.

3. MODELAGEM NUMÉRICA E ASPECTOS COMPUTACIONAIS

Para a solução do sistema de equações apresentado no Capítulo 2 emprega-se o método de elementos finitos. Para obter o sistema de equações algébricas a ser resolvido, procede-se a discretização das derivadas temporais através da expansão destas em série de Taylor, incluindo os termos de segunda ordem. Para a discretização espacial aplica-se o método de Galerkin clássico [Reddy e Gartling, 1994]. Visando reduzir o tempo de processamento adota-se a integração reduzida das matrizes de elementos, utilizando expressões analíticas das funções de interpolação do elemento hexaédrico trilinear [Burbridge, 1999; Gresho et al., 1984]. Este esquema é conhecido como Taylor-Galerkin, [Donea, 1984], e foi utilizado por Azevedo, 1999, para a simulação de escoamentos laminares tridimensionais com interação fluido-estrutura.

3.1 Formulação de Elementos Finitos do Problema

O método de elementos finitos é uma técnica de solução numérica de sistemas de equações diferenciais e integrais, é uma generalização dos métodos variacionais e de resíduos ponderados clássicos [Oden e Reddy, 1983].

Os métodos clássicos aproximam a solução de um sistema de equações, em todo o domínio do problema, através de uma combinação linear de funções de aproximação ϕ_i multiplicadas por parâmetros cj. Os parâmetros passam a ser as incógnitas do problema aproximado e são calculados de forma que a equação seja satisfeita, ao menos de forma média integral. As funções de aproximação devem satisfazer as condições de contorno do problema para todo o domínio. A construção destas funções é uma grande restrição para os métodos clássicos.

No método de elementos finitos o domínio do problema é aproximado por um conjunto de sub-domínios de geometria simples, elementos finitos, para os quais é possível definir de forma sistemática as funções de aproximação necessárias para a solução do problema por um método variacional ou de resíduos ponderados. Através de condições de continuidade das variáveis primárias e balanço das variáveis secundárias nas interfaces dos elementos é possível estabelecer equações para todo o domínio, este processo é chamado de montagem do sistema global de equações, viabilizando a solução de problemas com complexas condições de contorno e domínios.

A solução é aproximada no domínio do elemento por combinações lineares das funções de elemento e os parâmetros são os valores nodais das variáveis do problema.

Os passos principais da análise por elementos finitos de um problema são resumidos por Reddy e Gartling, 1994, como:

- 1- Pré-Processamento: Discretização do domínio em um conjunto de elementos finitos, geração da malha de elementos finitos (definir as coordenadas dos nós que compõem a malha e as conetividades que definem os elementos, não pode haver sobreposição dos domínios dos elementos).
- Formulação de resíduos ponderados ou forma fraca das equações diferenciais a serem analisadas.
- 3- Desenvolvimento das equações de elementos finitos do problema a partir da formulação de resíduos ponderados ou forma fraca do problema.
- 4- Montagem (assembly) das equações a nível de elemento para obter o sistema global de equações algébricas (sobre todo o domínio).
- 5- Imposição das condições de contorno
- 6- Solução das equações
- 7- Pós-processamento dos resultados.

Os próximos parágrafos apresentam a dedução do modelo de elementos finitos do problema, itens 2 e 3, partindo da formulação matemática definida pelas equações governantes (2.50) e (2.51); condições de contorno (2.3) e (2.52) e condições iniciais (2.5) e (2.6), com fechamento através dos modelos sub-malha de Smagorinsky (2.43) e dinâmico (2.46).

3.1.1 Formulação de Resíduos Ponderados do Problema

Para deduzir as equações de elementos finitos parte-se de uma formulação variacional ou de resíduos ponderados do problema. A formulação de resíduos ponderados do escoamento quase-incompressível, isotérmico, turbulento, transiente pode ser obtida, partindo das equações governantes (2.50) e (2.51), multiplicando pelas funções peso de velocidade e de pressão e integrando sobre o domínio de um elemento, resultando nas equações (3.1) e (3.2).

$$\int_{\Omega} p^* \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} p^* C^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \overline{v_j} \right) d\Omega = 0$$
(3.1)

Conservação de Quantidade de Movimento:

$$\begin{split} &\int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \overline{\mathbf{v}_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) d\Omega \\ &- \int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left\{ \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t} \right) \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) \right] - \frac{\lambda}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{k}} \right) \right] \delta_{ij} \right\} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_{i}} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \overline{f}_{i} d\Omega = 0 \end{split}$$
(3.2)

Onde:

- v_i^{*}- função peso para a velocidade, com valor arbitrário no domínio do elemento, exceto no contorno,
- p^{*}- função peso para a pressão, com valor arbitrário no domínio do elemento, exceto no contorno.

Para reduzir a exigência de diferenciação das funções de aproximação (também referidas como funções de interpolação) faz-se a integração por partes do termo viscoso:

$$-\int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left\{ \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t}\right) \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) \right] \right\} d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{v}_{i}^{*}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left\{ \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t}\right) \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) \right] \right\} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{v}_{i}^{*} \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t}\right) \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) \right] \right\} d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{v}_{i}^{*} \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t}\right) \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{i}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) \right] d\Gamma$$

$$(3.3)$$

Integrando por partes também o termo em λ e o termo do gradiente de pressão, chega-se à forma fraca das equações para o escoamento quase-incompressível (3.4).

$$\begin{split} &\int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \overline{\mathbf{v}_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{v}_{i}^{*}}{\partial x_{j}} \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t} \right) \left[\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right) \right] d\Omega \\ &+ \frac{\lambda}{\rho} \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{v}_{i}^{*}}{\partial x_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{k}} \right) \delta_{ij} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{v}_{i}^{*}}{\partial x_{i}} \overline{p} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{v}_{i}^{*} \overline{f}_{i} d\Omega = \\ &\int_{\Gamma} \mathbf{v}_{i}^{*} \left\{ \overline{p} \delta_{ij} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{k}} \right)}{\partial x_{k}} + \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t} \right) \left[\frac{\partial \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{i}} \right)}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \left(\rho \overline{\mathbf{v}_{j}} \right)}{\partial x_{i}} \right] \right\} n_{j} d\Gamma \end{split}$$

$$(3.4)$$

3.1.2 Equações de Elementos Finitos do Problema

Para obter a equação de elementos finitos emprega-se a técnica clássica de Galerkin [Reddy e Gartling,1994; Hughes, 1987] às equações (3.1) e (3.4), que representam formulação de resíduos ponderados do problema. O método de Galerkin consiste em utilizar as mesmas funções de aproximação para a função peso e para as variáveis do problema.

Considerando o domínio do elemento, substituí-se as variáveis e as funções peso por aproximações, combinações lineares das funções de interpolação do elemento multiplicadas por parâmetros (valores nodais das funções a serem aproximadas):

$$\rho \overline{v}_{i}(x, y) = \phi(x, y) \rho \overline{v}_{i} \qquad \overline{p}(x, y) = \psi(x, y) \overline{p}$$

$$v_{i}^{*}(x, y) = \phi(x, y) v_{i}^{*} \qquad p^{*}(x, y) = \psi(x, y) p_{i}^{*} \qquad (3.5)$$

Sendo:

 $\boldsymbol{\varphi}$ - vetor de funções interpolação para a velocidade,

 $\overline{v}_{a,i}$ - vetor de valores nodais da componente i da velocidade

- v_{-i}^{*} vetor de valores nodais da componente i da função peso de velocidade
- $\psi\,$ vetor de funções de interpolação para a pressão
- $\overline{p}\,$ vetor de valores nodais da pressão

 \boldsymbol{p}^* - vetor de valores nodais da função peso de pressão

 Ω e - domínio do elemento

Obtém-se as equações a nível de elemento:

$$\int_{\Omega e} \underbrace{\psi^{\mathrm{T}}}_{\sim} p^{*} \frac{\partial \left(\underbrace{\psi p}_{\sim} \right)}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega e} \underbrace{\psi^{\mathrm{T}}}_{\sim} p^{*} C^{2} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\oint \rho \underbrace{v}_{\sim j} \right) d\Omega = 0$$
(3.6)

$$\begin{split} &\int_{\Omega e} \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i} \frac{\partial}{\partial t} \left(\oint_{\sim} \overline{v_{i}} \right) d\Omega + \int_{\Omega e} \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i} \oint_{\sim} \overline{v_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\oint_{\sim}^{T} \overline{\rho v_{i}} \right) d\Omega \\ &+ \int_{\Omega e} \frac{\partial \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i}}{\partial x_{j}} (v + v_{t}) \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\oint_{\sim} \overline{\rho v_{i}} \right) d\Omega + \int_{\Omega e} \frac{\partial \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i}}{\partial x_{j}} (v + v_{t}) \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\oint_{\sim} \overline{\rho v_{j}} \right) d\Omega \\ &+ \frac{\lambda}{\rho} \int_{\Omega e} \frac{\partial \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i}}_{\partial x_{j}} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \left(\oint_{\sim} \overline{\rho v_{k}} \right) \delta_{ij} d\Omega + \int_{\Omega e} \frac{\partial \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i}}_{\partial x_{i}} \underbrace{\psi}_{\sim} p d\Omega - \int_{\Omega e} \oint_{\sim}^{T} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i} \overline{f}_{i} d\Omega \\ &= \int_{\Gamma e} \oint_{\sim} \underbrace{v_{i}^{*}}_{\sim i} S_{i} d\Gamma \end{split}$$
(3.7)

onde

$$\int_{\Gamma e} \oint_{\sim} \mathbf{v}^{*}_{\sim} \left\{ \underbrace{\psi \, p}_{\sim} \delta_{ij} + \frac{\lambda}{\rho} \frac{\partial \left(\oint \rho \, \overline{\mathbf{v}}_{\cdot} \right)}{\partial x_{k}} + \left(\mathbf{v} + \mathbf{v}_{t} \right) \left[\frac{\partial \left(\oint \rho \, \overline{\mathbf{v}}_{\cdot} \right)}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \left(\oint \rho \, \overline{\mathbf{v}}_{\cdot} \right)}{\partial x_{i}} \right] \right\} n_{j} d\Gamma = \int_{\Gamma e} \oint_{\sim} \underbrace{v^{*}}_{\sim i} \mathbf{S}_{i} d\Gamma$$

 Γe - contorno do elemento

Isolando as funções peso e considerando sua arbitrariedade, obtém-se:

$$\int_{\Omega e} \left(\underbrace{\psi}_{\sim}^{\mathrm{T}} \underbrace{\psi}_{\sim} \right) d\Omega \underbrace{\frac{\bullet}{p}}_{\sim} + C^{2} \int_{\Omega e} \underbrace{\psi}_{\sim}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} d\Omega \rho \overline{v}_{\sim j} = 0$$
(3.8)

$$\begin{split} &\int_{\Omega e} \overset{\phi}{\underset{\sim}{\circ}}^{T} \overset{\phi}{\underset{\sim}{\circ}} d\Omega \left(\rho \overline{\overrightarrow{v}}_{i} \right) + \int_{\Omega e} \overset{\phi}{\underset{\sim}{\circ}}^{T} \overset{\phi}{\underset{\sim}{\circ}} \overline{\overrightarrow{v}_{j}} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} d\Omega \left(\rho \overline{\overrightarrow{v}}_{i} \right) \\ &+ \left[\int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} d\Omega \right] \left(v + v_{t} \right) \left(\rho \overline{\overrightarrow{v}}_{i} \right) + \left[\int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} d\Omega \right] \left(v + v_{t} \right) \left(\rho \overline{\overrightarrow{v}}_{i} \right) \\ &+ \frac{\lambda}{\rho} \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{k}} d\Omega \left(\rho \overline{\overrightarrow{v}}_{k} \right) \delta_{ij} + \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{i}} \psi d\Omega \underbrace{p}_{i} - \int_{\Omega e} \overset{\phi}{\underset{\sim}{\circ}}^{T} d\Omega \overrightarrow{f}_{i} \\ &= \int_{\Gamma e} \overset{\phi}{\underset{\sim}{\circ}} S_{i} d\Gamma \end{split}$$
(3.9)

Sendo que o ponto acima da variável indica derivada em relação ao tempo.

A equação (3.9) pode escrever-se como:

$$\begin{split} &\int_{\Omega e} \oint_{\sim}^{T} \oint_{\sim} d\Omega \left(\rho \stackrel{\bullet}{\overline{v}}_{i} \right) + \int_{\Omega e} \oint_{\sim}^{T} \oint_{\sim} \stackrel{\bullet}{\overline{v}_{j}} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} d\Omega \left(\rho \stackrel{\overline{v}}{\overline{v}}_{i} \right) \\ &+ \nu \left[\int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} + \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \right] \\ &+ \frac{\lambda}{\rho} \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{k}} d\Omega \left(\rho \stackrel{\overline{v}}{\overline{v}_{k}} \right) \delta_{ij} + \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{i}} \psi d\Omega p - \int_{\Omega e} \oint_{\sim}^{T} d\Omega \stackrel{\overline{f}}{f}_{i} \end{split}$$
(3.10)
$$&+ \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \left(v_{t} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} d\Omega \rho \stackrel{\overline{v}}{\overline{v}_{i}} + \int_{\Omega e} \frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{j}} \left(v_{t} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} d\Omega \rho \stackrel{\overline{v}}{\overline{v}_{j}} \\ &= \int_{\Gamma e} \oint_{\sim} S_{i} d\Gamma \end{split}$$

Empregando as aproximações dadas em (3.5), obtemos a expressão de $|\overline{S}|$, para cálculo da viscosidade turbulenta, em termos das variáveis nodais:

$$\begin{split} \overline{\mathbf{S}} &= \left\{ 2 \left\{ \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-1} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{2}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{3}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-3} \right) \right]^{2} \right\} \\ &+ 2 \left\{ \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{2}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-1} \right) \frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right] \\ &+ \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{3}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-1} \right) \frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-3} \right) \right] + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{2}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-3} \right) \frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{3}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right] \right\} \\ &+ \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{2}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-1} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{3}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right]^{2} \\ &+ \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-1} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{3}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-1} \right) \right]^{2} \\ &+ \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{1}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-3} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{3}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-2} \right) \right]^{2} + \left[\frac{\partial \phi^{\mathrm{T}}}{\partial x_{2}} \left(\boldsymbol{\rho} \mathbf{v}_{-3} \right) \right]^{2} \right\}^{1/2} \tag{3.11}$$

Escreve-se as equações (3.8) e (3.10) de forma compacta:

$$M_{\stackrel{p}{\sim}p} \stackrel{\bullet}{}_{\sim} + G_{j}^{T} \left(\rho \overline{v}_{\stackrel{j}{\sim}j} \right) = 0$$
(3.12)

$$\underset{\sim}{\mathsf{M}}_{v}\left(\rho\overline{\overline{\mathbf{v}}}_{i}\right) + \mathsf{A}_{j}\left(\rho\overline{\mathbf{v}}_{i}\right) + \mathsf{D}_{ij}\left(\rho\overline{\mathbf{v}}_{j}\right) - \mathsf{G}_{i}\overline{p} = \underset{\sim}{\mathsf{F}}_{i}$$
(3.13)

onde as matrizes de elementos são:

$$\begin{split} & \underset{\sim}{M}_{p} = \int_{\Omega_{e}} \underset{\sim}{\psi}^{T} \underset{\sim}{\psi} d\Omega \quad ; \\ & \underset{\sim}{M}_{v} = \int_{\Omega_{e}} \underset{\sim}{\phi}^{T} \underset{\sim}{\phi} d\Omega \quad ; \quad A_{j} = \int_{\Omega_{e}} \underset{\sim}{\phi}^{T} \underset{\sim}{v}_{j} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} d\Omega \\ & G_{i} = \int_{\Omega_{e}} \underset{\sim}{\partial \phi}^{T} \underset{\sim}{\psi} d\Omega \quad ; \quad G_{j}^{T} = C^{2} \int_{\Omega_{e}} \underset{\sim}{\psi}^{T} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} d\Omega \\ & F_{i} = \int_{\Omega_{e}} \underset{\sim}{\phi}^{T} f_{i} d\Omega + \int_{\Gamma_{e}} \underset{\sim}{\phi}^{T} S_{i} d\Gamma \\ & D_{ii} = \int_{\Omega_{e}} \left(2(\nu + \nu_{t}) + \frac{\lambda}{\rho} \right) \left(\frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \right) d\Omega + \int_{\Omega_{e}} (\nu + \nu_{t}) \left(\frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{k}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{k}} \right) d\Omega \\ & \text{ para i=1, k=2,3; \quad para i=2, k=3,1 \quad para i=3, k=1,2 \\ & D_{ij} = \int_{\Omega_{e}} (\nu + \nu_{t}) \left(\frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} \right) d\Omega + \int_{\Omega_{e}} \left(\frac{\lambda}{\rho} \right) \left(\frac{\partial \phi^{T}}{\partial x_{i}} \frac{\partial \phi}{\partial x_{i}} \right) d\Omega \end{split}$$



As funções $\phi e \psi$ são funções de interpolação, sendo usualmente ψ de ordem inferior a ϕ . No caso dos hexaedros trilineares, ϕ são funções lineares e ψ é constante no domínio do elemento.

3.2 Esquema de Taylor-Galerkin

Para obter as equações discretizadas também no tempo, faz-se a expansão em série de Taylor das derivadas temporais das equações de elementos finitos que governam o problema (3.12) e (3.13), até os termos de segunda ordem. Este esquema foi empregado por Donea, 1984. Deduções mais detalhadas da discretização temporal por série de Taylor, podem ser encontradas em Gonzalez, 1993 e Azevedo, 1999.

Expandindo a \overline{p} em série de Taylor, tem-se:

$$\Delta \overline{p} = \overline{p}^{n+1} - \overline{p}^{n} = \Delta t \left(\frac{\partial \overline{p}}{\partial t} \right) + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^{2} \overline{p}}{\partial t^{2}} \right) + \cdots$$
(3.15)

Considerando (3.12) e (3.15), é possível obter a expressão:

$$\underset{\sim}{M} \underset{Dp}{\Delta} \overline{p}_{\substack{k+1}}^{n+1} = -\Delta t \left\{ \left[G_{j}^{T} \left(\rho \overline{v}_{\substack{\nu \\ j}} \right)^{n} \right] + \frac{1}{2} \left[G_{j}^{T} \left(\Delta \rho \overline{v}_{\substack{\nu \\ j}} \right)^{n+1} \right] \right\} - \left(\underset{\sim}{M} \underset{p}{M} - \underset{\sim}{M} \underset{Dp}{M} \right) \Delta \overline{p}_{\substack{n+1 \\ \nu k}}^{n+1} \quad (3.16)$$

A matriz M_{p} é a matriz de massa da pressão discreta, ou diagonalizada, empregada para evitar a inversão de uma matriz consistente. No caso de hexaedros trilineares, com ψ_{p} constante no elemento, as matrizes de massa de pressão consistente e discreta são idênticas e se transformam no volume do elemento. Neste caso o último termo da equação (3.16) se anula.

O mesmo processo de expansão de $\rho_{\tilde{v}_{i}}$ em série de Taylor e considerando a equação (3.13), conduz a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} M_{\widetilde{v}_{D}} \Delta \left(\rho \,\overline{v}_{i} \right)_{k+1}^{n+1} &= -\Delta t \left\{ \left[A_{j} \left(\rho \,\overline{v}_{i} \right) + D_{ij} \left(\rho \,\overline{v}_{j} \right) - G_{i} \,\overline{p} \right]^{n} - \frac{1}{2} \left(F_{i}^{n} + F_{\widetilde{v}_{i}}^{n+1/2} \right) \right\} \\ &- \frac{\Delta t}{2} \left\{ A_{j} \left(\Delta \rho \,\overline{v}_{i} \right) + D_{ij} \left(\Delta \rho \,\overline{v}_{j} \right) - G_{i} \Delta \,\overline{p} + \frac{2}{\Delta t} \left(M_{\widetilde{v}_{v}} - M_{\widetilde{v}_{i}} \right) \Delta \rho \,\overline{v}_{i} \right\}_{k}^{n+1} \end{aligned} \tag{3.17}$$

Onde M $_{\sim \ D}$ é a matriz de massa de velocidade, $M_{v_{\text{s}}}$ diagonalizada.

Nas expressões (3.15) a (3.17), o índice n refere-se ao passo de tempo, enquanto k está relacionado ao número da iteração, Δp é a variação da pressão e $\Delta \rho v_i$ é a variação de ρv_i no intervalo de tempo Δt .

Desta forma tem-se:

$$[\Delta(\rho v_{i})]_{k+1}^{n+1} = -\Delta t M_{\sim D}^{-1} \left\{ S_{\sim}^{n} + \frac{1}{2} R_{\sim k}^{n+1} \right\}$$
(3.18)

$$\left[\Delta p\right]_{k+1}^{n+1} = -\frac{\Delta t C^2}{\text{volume}} \left\{ T^n + \frac{1}{2} Q_k^{n+1} \right\}$$
(3.19)

(i, j, k = 1, 2, 3) em Ω

sendo:

$$\mathbf{S}_{\sim}^{n} = \left[\mathbf{A}\left(\boldsymbol{\rho}_{\sim i} \mathbf{\overline{v}}\right) + \mathbf{D}_{ij}\left(\boldsymbol{\rho}_{\sim j} \mathbf{\overline{v}}\right) - \mathbf{G}_{j} \mathbf{\overline{p}}_{\sim}\right]^{n}$$
(3.20)

$$R_{k}^{n+1} = \left[A\left(\Delta\rho\,\overline{v}_{i}\right) + D_{ij}\left(\Delta\rho\,\overline{v}_{j}\right) - G_{i}\Delta\,\overline{p}_{i} - \left(M_{i}D - M_{i}V\right)\left(\Delta\rho\,\overline{v}_{i}\right)\right]_{k}^{n+1}$$
(3.21)

$$T_{\widetilde{j}}^{n} = G_{j}^{T} \left(\rho \overline{v}_{\widetilde{v}_{j}} \right)^{n}$$
(3.22)

$$Q_{k}^{n+1} = G_{j}^{T} \left(\Delta \rho \overline{v}_{j} \right)_{k}^{n+1}$$
(3.23)

O campo de velocidades e pressões atualizada é então obtido calculando-se:

$$\left(\rho \mathbf{v}_{i}\right)_{n+1} = \left(\rho \mathbf{v}_{i}\right)_{n} + \Delta \left(\rho \mathbf{v}_{i}\right)_{n+1}^{k+1}$$
(3.24)

$$p_{n+1} = p_n + \Delta p_{n+1}^{k+1}$$
(3.25)

para cada nó da malha de elementos finitos.

O esquema é condicionalmente estável e o intervalo de tempo de integração deve respeitar a seguinte restrição:

$$\Delta t \le \frac{\Delta x_i(\min)}{C + V} \tag{3.26}$$

sendo $\Delta x_i(min)$ a menor dimensão de elementos da malha, C é a velocidade de propagação do som e V uma velocidade de referência.

3.3 Segunda Filtragem: Metodologia Proposta

O modelo de viscosidade turbulenta sub-malha de Smagorinsky apresenta como maior limitação a dificuldade de representar corretamente, com uma constante única, diferentes campos de escoamento turbulento, tais como recirculação, recolamento, escoamento próximo à parede.

Uma alternativa ao modelo de Smagorinsky é o modelo dinâmico de viscosidade turbulenta, proposto em Germano et al., 1991, e modificado por Lilly, 1992. Nesse modelo o coeficiente é calculado de acordo com a evolução do escoamento, sendo uma função do tempo e do espaço.

A equação (2.47) define o coeficiente dinâmico, C(x,t). Este depende do uso de dois filtros de diferentes comprimentos característicos. A primeira filtragem é considerada aplicada quando se realiza a discretização das equações, o primeiro filtro (filtro à nível de malha) têm dimensão característica relacionada às dimensões dos elementos da malha.

Para o segundo processo de filtragem (filtro teste) emprega-se um filtro com dimensão característica maior que o primeiro filtro. Baseado nestes dois níveis de escala, os modelos dinâmicos usam informações das menores escalas resolvidas (situadas entre os dois filtros) para calcular o coeficiente dinâmico.

Para o processo de segunda filtragem muitas propostas têm sido apresentadas. Oshima, et al., 1996, apresenta um esquemas de simulação via elementos finitos, na qual o filtro teste é formulado através de uma expansão em série de Taylor:

$$\langle \overline{\mathbf{u}}_{i} \rangle = \overline{\mathbf{u}}_{i} + \frac{\langle \Delta \rangle^{2}}{24} \frac{\partial^{2} \overline{\mathbf{u}}_{i}}{\partial x_{i} \partial x_{j}} + O(\langle \Delta \rangle^{4})$$
 (3.27)

deve-se especificar $\langle \Delta \rangle^2$.

Padilla e Silveira Neto, 2000, implementaram e avaliaram diferentes propostas para a segunda filtragem, aplicadas no contexto de volumes finitos, médias aritméticas empregando 8 e 12 nós vizinhos não conduziram a bons resultados. O uso de uma função de interpolação do tipo gaussiana, função de distribuição, apresentou os melhores resultados.

Partindo da idéia de que a discretização do problema consiste na aplicação do primeiro processo de filtragem, imaginou-se uma sobre-malha de elementos, maiores do que os da malha realmente empregada, para o processo de segunda filtragem. Desta idéia inicial, resultou a proposta para a segunda filtragem apresentada neste trabalho, que será referida como **segunda filtragem por elementos finitos independentes**.
O nome faz referência ao fato de se empregar técnicas de elementos finitos, tais como a definição de elementos por conetividades, o uso de dois sistemas de coordenadas (coordenadas globais (x1,x2,x3) e coordenadas naturais (ξ , η , ζ)), transformações de coordenadas e funções de interpolação de elementos. Contudo, os elementos independentes são construídos em torno de cada nó. Estes não formam uma malha de elementos finitos, pois existe superposições dos domínios dos elementos, além disto, não existe solução de equações baseada neste conjunto de elementos.

Por este conjunto não consistir uma malha de elementos finitos, mas empregar técnicas do método, parece adequada a denominação proposta de elementos finitos independentes.

O processo consiste em construir elementos em torno de cada nó da malha, definido por nós vizinhos ao nó de interesse, e empregar as funções de interpolação lineares do elemento para efetuar o processo de segunda filtragem. Desta forma, emprega-se uma interpolação linear dos valores calculados nos pontos vizinhos da malha, para obter o valor filtrado no ponto de interesse. A inovação está na forma proposta para fazer esta interpolação, empregando técnicas de elementos finitos. O esquema resultante apresentou bons resultados (a serem apresentados), com um acréscimo de tempo de processamento em relação ao modelo de Smagorinsky entre 9 e 18%.

A primeira etapa é a geração dos elementos independentes, ou seja, criar uma lista de conetividades de um elemento independente para cada nó. Em torno de cada nó da malha, define-se um elemento de dimensões maiores do que os elementos da malha localmente. Por exemplo, na malha bidimensional da figura 3.1, o nó I tem associado a ele o elemento independente sombreado, de domínio equivalente aos quatro elementos que concorrem ao nó I. As conetividades deste elemento independente corresponde a lista contendo os números globais dos nós identificados na figura como 1,2,3 e 4.



Figura 3.1 – Exemplo de elemento independente para uma malha bidimensional.

Para gerar este conjunto de elementos independentes foi desenvolvido um algorítmo simples que pode ser descrito através dos seguintes passos principais:

Para todos os nós da malha original:

- a) listar os elementos que concorrem ao nó I;
- b) listar os nós que definem estes elementos;
- c) da lista obtida em (b) definir os nós mais distantes de I nos quatro quadrantes do plano definido por eixos (x,y)_I com origem em I;
- d) a lista com quatro nós obtida em (c) é a lista de conetividades do elemento independente correspondente ao nó I : (I1,I2,I3,I4).

Este esquema pode ser empregado para malhas irregulares ou com elementos distorcidos, como os mostrados na figura (3.2).





Figura 3.2 – Exemplos de elementos independentes em malhas irregulares e distorcidas.

O algoritmo implementado é tridimensional, neste caso a definição das conetividades é feita da mesma forma descrita, apenas no passo (c) faz-se a busca dos oito nós mais distantes, localizados nos oito quadrantes do espaço definido por um sistema de coordenadas $(x,y,z)_{I}$, com origem no nó I. A lista de conetividades resultante contém oito números inteiros, correspondente ao número global dos oito pontos identificados em (c). Um exemplo de elemento independente em malha tridimensional é o elemento em vermelho apresentado na figura 3.3.



Figura 3.3 – Elemento independente em uma malha tridimensional.

O algoritmo de geração de elementos independentes é simplificado e se aplica apenas para geometrias bem comportadas. O processo de busca dos nós para formar o elemento independente deve ser aprimorado para garantir maior universalidade. Uma limitação prevista do algoritmo está em nós de cantos, para os quais o elemento independente coincide com o elemento da malha, pois existe somente um elemento que concorre ao nó. Isto viola a proposta do processo de segunda filtragem em que a dimensão característica do filtro teste deve ser superior a dimensão característica do filtro à nível de malha. Deste fato decorre que os valores obtidos da segunda filtragem serão os mesmos obtidos na primeira filtragem, resultando em valores de C(x,t) nulos. Contudo este problema é amenizado ao considerar-se que a viscosidade turbulenta será definida para cada elemento, sendo que no processo descrito calcula-se C(x,t) para todos os nós da malha, o valor empregado para obter v_t será a média dos valores de C(x,t) correspondentes aos oito nós de cada elemento, sendo que apenas um nó do elemento será um nó de canto.

Um aprimoramento deste processo pode ser implementado de forma simples, ampliando-se a busca de nós vizinhos em nós de canto para incluir os elementos que possuam interface com o elemento ao qual pertence o nó. Metodologias mais complexas do algoritmo de geração de elementos independentes podem ser empregadas, sem conseqüências importantes sobre o tempo de processamento total, tendo em vista que esta etapa pode ser concentrada na fase de préprocessamento.

Esta metodologia prescinde da especificação de um tamanho para o segundo filtro, mas não impede que se faça alguma restrição quanto a esta dimensão. Na forma como foi implementada, faz uso das informações da escala acima mais próxima à escala da malha na região em estudo.

A segunda etapa, também incluída na fase de pré-processameno, é avaliar as coordenadas naturais (ξ_1, η_1, ζ_1) do nó I no interior do seu elemento independente.

Considerando o elemento hexaédrico de oito nós, representado no espaço físico (x_1,x_2,x_3) e no espaço computacional (ξ,η,ζ) na figura (3.4), com funções de interpolação lineares dadas por:

$$\phi_{\alpha}(\xi,\eta,\zeta) = \frac{1}{8}(1+\xi_{\alpha a}\xi)(1+\eta_{\alpha}\eta)(1+\zeta_{\alpha}\zeta) \qquad (\alpha=1,...,8)$$
(3.28)

onde $\xi_{\alpha}, \eta_{\alpha} e \zeta_{\alpha}$ são as coordenadas do nó α do elemento no sistema de eixos referencial $\xi, \eta e \zeta$, dadas por:

$$\xi^{\mathrm{T}} = \{-1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1\}$$
(3.29)

$$\eta^{\mathrm{T}} = \{-1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1\}$$
(3.30)

$$\zeta_{\tilde{z}}^{\mathrm{T}} = \{-1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1\}$$
(3.31)



Figura 3.4 – Elemento hexaédrico de oito nós no espaço físico e computacional.

As coordenadas de um ponto I qualquer no interior do elemento podem ser calculadas pela seguinte transformação de coordenadas:

$$\left(\mathbf{x}_{i}\right)_{I} = \sum_{\alpha=1}^{8} \phi_{\alpha}\left(\boldsymbol{\xi}_{I}, \boldsymbol{\eta}_{I}, \boldsymbol{\zeta}_{I}\right) \mathbf{x}_{i\alpha}$$
(3.32)

onde

 $(x_i)_I$ - coordenada i de um ponto I qualquer no interior do elemento (i=1,2,3) $x_{i\alpha}$ - coordenada i do nó α que define o elemento (α =1,2,3,4,5,6,7,8) $\phi_{\alpha}(\xi_I,\eta_I,\zeta_I)$ - função de interpolação do nó α , avaliada no ponto I, com coordenadas naturais (ξ_I,η_I,ζ_I)

Esta é a transformação usual, empregada em elementos finitos. Contudo, é necessário resolver o problema inverso, obter as coordenadas naturais de um ponto qualquer no interior do elemento (ξ_1, η_1, ζ_1) , conhecidas as coordenadas do ponto , $(x_1, x_2, x_3)_{I_1}$, e as coordenadas dos oito nós do elemento, $(x_1, x_2, x_3)_{\alpha}$. Na solução deste problema chega-se a um sistema não linear de três equações e três incógnitas, um algoritmo empregando um processo iterativo de solução (método de Newton) foi desenvolvido para resolver o problema.

Novamente, por se tratar de um processo desenvolvido na fase de préprocessamento, este algoritmo não representou um custo adicional significativo no sistema de análise das equações do escoamento.

Ao final da segunda etapa, dispõem-se das conetividades dos elementos independentes e das coordenadas naturais de todos os nós da malha, relativas ao seu elemento independente.

A etapa incluída no algoritmo principal de solução consiste em avaliar as quantidades:

$$\left<\overline{v}_{i}\right>,\left<\overline{v}_{i}\overline{v}_{j}\right> e \left<\overline{\Delta}^{2}\left|\overline{S}_{ij}\right|\overline{S}_{ij}\right>$$

utilizando as funções de interpolação do elemento e as coordenadas naturais de cada nó no interior do elemento independente associado a ele da seguinte forma

$$\left\langle \overline{\mathbf{v}}_{i}\right\rangle_{I} = \sum_{\alpha=1}^{8} \phi_{\alpha} \left(\xi_{I}, \eta_{I}, \zeta_{I} \right) \overline{\mathbf{v}}_{i\alpha}$$
(3.33)

$$\left\langle \overline{\mathbf{v}}_{i} \overline{\mathbf{v}}_{j} \right\rangle_{I} = \sum_{\alpha=1}^{8} \phi_{\alpha} \left(\xi_{I}, \eta_{I}, \zeta_{I} \right) \overline{\mathbf{v}}_{i} \overline{\mathbf{v}}_{j_{i\alpha}}$$
(3.34)

$$\left\langle \overline{\Delta}^{2} \left| \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right| \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle_{\mathrm{I}} = \sum_{\alpha=1}^{8} \phi_{\alpha} \left(\xi_{\mathrm{I}}, \eta_{\mathrm{I}}, \zeta_{\mathrm{I}} \right) \left\langle \overline{\Delta}^{2} \left| \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right| \overline{\mathbf{S}}_{ij} \right\rangle_{\alpha}$$
(3.35)

Empregando esta interpolação os valores dos nós vizinhos são ponderados, através de uma interpolação linear, na obtenção do valor filtrado de acordo com a distância dos mesmos ao nó I.

Para avaliar as quantidades é necessário calcular os valores de $\overline{v}_i \overline{v}_j$ e $\overline{\Delta}^2 |\overline{S}_{ij}| \overline{S}_{ij}$ para os nós que compõem o elemento independente. No programa implementado, estes valores são calculados para todos os nós da malha e armazenados para utilização na solução das equações (2.47) a (2.49).

A dimensão característica do primeiro filtro é avaliada como a raiz cúbica dos volumes dos elementos da malha:

$$\Delta = \sqrt[3]{\text{Vol}_{e}}$$
(3.36)

A dimensão característica do segundo filtro é calculada analogamente como sendo a raiz cúbica dos elementos independentes:

$$\left\langle \overline{\Delta} \right\rangle_{\mathrm{I}} = \sqrt[3]{\mathrm{Volume}(\mathrm{E}_{\mathrm{I}})}$$
 (3.37)

Empregando a metodologia descrita nesta secção, a relação entre as dimensões característica dos dois filtros é da ordem de 1:2.

Avaliadas as expressões relativas ao segundo processo de filtragem finalmente podese calcular C(x,t) segundo a equação (2.47), para cada nó da malha.

Este coeficiente será empregado para cálculo da viscosidade turbulenta, segundo a equação (2.46). Sendo a viscosidade turbulenta avaliada a nível de elemento, e os valores do coeficiente dinâmico definidos para os nós da malha, o valor empregado para cada elemento é a média dos valores de C(x,t) para os nós que compõem os elementos da malha original. Isto equivale a uma interpolação dos valores de C para o centro do elemento. Este procedimento está de acordo com o adotado por outros autores [Oshima et al, 1996; Zang et al, 1993, Breuer e Rodi, 1994], que empregam médias do coeficiente dinâmico para evitar que as variações bruscas, tanto espaciais como temporais, sejam fonte de instabilidades na solução. Outra solução, citada por Lilly, 1992, consiste em proceder médias dos termos Mij e Lij antes de obter C(x,t), procurando evitar zeros no denominador além de estabilizar o problema.

Neste trabalho adotou-se um limite para a viscosidade turbulenta negativa, sendo:

$$v + v_t \ge 0 \tag{3.38}$$

Nos exemplos processados, um pequeno número de elementos teve a ocorrência deste corte. O mesmo limite foi utilizado por outros autores, como Zang et al, 1993.

Outra verificação que teve de ser adotada foi que, quando o denominador da expressão para cálculo de C(x,t) se anula, assume-se C(x,t)=0 (lembrando que este valor é relacionado ao nó, e que o valor empregado para cálculo da viscosidade turbulenta é a média dos valores nodais do elemento).

Este esquema emprega as funções de elemento, existentes no código sem modelo de turbulência, o algoritmo elaborado concentrou o processamento adicional em etapas de préprocessamento e sua implementação representou um aumento no tempo de processamento, em relação ao esquema empregando Smagorinsky, entre 9 e 18%, para os problemas analisados.

4. RESULTADOS

4.1 Análise Bidimensional do Escoamento Turbulento Sobre um Degrau

Este parágrafo apresenta resultados obtidos empregando o método de elementos finitos para análise de escoamentos turbulentos, através de técnicas de simulação de grandes escalas aplicadas a um modelo bidimensional, publicados em Petry e Awruch, 1997b. Os experimentos descritos aqui foram desenvolvidos no início dos trabalhos, com o objetivo de adquirir conhecimento acerca da simulação de grandes escalas empregando o método de elementos finitos.

É importante ressaltar que a simulação explícita das grandes escalas da turbulência está implicitamente relacionada a modelos tridimensionais, em virtude do caráter tridimensional do fenômeno a ser representado. Contudo, esta investigação desenvolveu-se empregando um modelo bidimensional, com o objetivo de reduzir os recursos de programação e processamento nesta etapa inicial. Feita esta ressalva, emprega-se a expressão *simulação de grandes escalas* no restante do parágrafo, para simplificar a denominação mais adequada a estas análises, ou seja, análises bidimensionais de escoamentos turbulentos empregando a metodologia de simulação de grandes escalas.

As equações para análise de um escoamento incompressível, transiente e bidimensional, empregadas em um programa de elementos finitos [Petry, 1993 e Petry e Awruch, 1992], foram reformuladas para o contexto da simulação de grandes escalas [Petry e Awruch, 1997b]. Estas equações são semelhantes às equações apresentadas no Capítulo 2, para o caso bidimesional. O método baseia-se na hipótese de quase-incompressibilidade e emprega um esquema explícito de integração de dois passos. Os elementos são quadriláteros bilineares, emprega-se funções de interpolação de igual ordem para a pressão e velocidades. Para modelar o tensor de Reynolds das escalas inferiores à resolução da malha foi utilizado o modelo de Smagorinsky [Findikakis e Street, 1982]. Os termos de Leonard e cruzados, apresentados por diversos autores [Ortega e Azevedo, 1995; Silveira Neto et al., 1993] como negligenciáveis, foram modelados em função do campo de grandes escalas [Findikakis e Street, 1982].

Visando investigar os resultados e a metodologia para implantação do modelo, bem como a importância dos termos de Leonard e termos cruzados, três sistemas de simulação de escoamentos foram desenvolvidos. O sistema original [Petry, 1993; Petry e Awruch, 1992] de solução das equações de Navier-Stokes, desprezando completamente os efeitos de escalas inferiores à resolução da malha, o segundo sistema empregando o modelo de Smagorinsky para

efeitos das estruturas de sub-malha e desprezando os termos de Leonard e termos cruzados e um terceiro sistema modelando todos os termos relativos às pequenas escalas.

Inicialmente, com o objetivo de validar a metodologia, desenvolveu-se a simulação de escoamentos sobre um degrau caracterizados por baixos números de Reynolds, empregando o segundo sistema descrito anteriormente. Posteriormente são apresentados os resultados de simulações obtidas através dos três sistema para o escoamento sobre um degrau em canal aberto, com alto número de Reynolds (40000). Os resultados são comparados entre si e com dados experimentais [Armaly et al., 1983] e numéricos de outros autores[Ortega e Azevedo, 1995; Silveira Neto et al., 1993; Kaiktsis et al, 1991], para problemas semelhantes. A Figura 4.1 apresenta um esquema dos problemas processados, identificando as dimensões características que serão definidas a seguir.

Os problemas foram processados no supercomputador CRAY-YMP2E (Centro Nacional de Supercomputação, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil), fazendo uso das característica de processamento vetorial do equipamento.



Figura 4.1 - Esquema do domínio e dimensões características do escoamento sobre o degrau.

4.1.1 Validação do Programa: Análise do Escoamento a Baixos Números de Reynolds

Primeiramente apresenta-se resultados do escoamento sobre o degrau com baixos números de Reynolds, em regime laminar e bidimensional. Esta análise tem por finalidade a validação do programa de simulação numérica desenvolvido, em virtude da disponibilidade de dados experimentais [Armaly et al., 1983] e numéricos [Ortega e Azevedo, 1995; Silveira Neto et al., 1993; Kaiktsis et al, 1991]. Neste escoamento uma importante característica a ser verificada é a relação entre o número de Reynolds e o comprimento de recolamento X_R .

As dimensões do problema (figura 4.1) são: H=0.94, h=1, X_E =1 e X_T =30. Como condições de contorno, empregou-se um perfil de velocidades (v_1 =V(y), v_2 =0) parabólico completamente desenvolvido na entrada e (v_1 = v_2 =0) velocidades nulas nas paredes superior, lateral e inferiores. Como condições iniciais, empregou-se, na primeira simulação, um escoamento igual a velocidade média de entrada para todo o domínio. Nas simulações seguintes empregou-se o último campo de pressões e velocidades calculado para o número de Reynolds anterior. O número de Reynolds é definido da mesma forma que nos experimentos de Armaly et al, 1995:

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho \left(2V \max_{3} \right) 2h}{\mu} \tag{4.1}$$

Empregou-se uma resolução de 20x10 (X_E x h) na entrada e 40x300 (H_T x X_T) na região posterior ao degrau. Os resultados foram obtidos através do código com modelo de Smagorinky, desprezando os termos de Leonard e termos cruzados.

Este problema é semelhante ao estudado experimentalmente por Armaly, et al., 1983, tendo sido empregado na validação dos resultados apresentados por Silveira Neto, et al, 1993 e Kaiktsis et al., 1991. A Figura 4.2 apresenta os resultados obtidos para a relação $X_R/H \times Re$, juntamente com os apresentados pelas referências [Armaly, et al., 1983; Silveira Neto, et al., 1993 e Kaiktsis et al., 1991], é possível observar a concordância dos resultados com os valores esperados.

Foram analisados escoamentos caracterizados por números de Reynolds até 500, a partir desta ordem de Re, o comprimento de recolamento passa a ser subestimado por simulações bidimensionais. O afastamento da realidade física decorre da importância de efeitos tridimensionais nesta faixa de Reynolds, como afirmam Silveira Neto et al., 1993 e Kaiktsis et al, 1991 e confirma o trabalho de Williams e Baker, 1997.



Figura 4.2 - Relação entre comprimento de recolamento (X_R/H) e número de Reynolds (*Re*): resultados experimentais de Armaly et al., 1983; simulação numérica de Silveira Neto et al., 1993; simulação numérica de Kaiktsis et al, 1991; resultados do presente trabalho.

4.1.2 Simulação do Escoamento sobre um Degrau em Canal Aberto, Re=40.000

Este segundo escoamento, degrau em um canal aberto, é caracterizado por um alto número de Reynolds, (Re=40.000). O problema é similar ao processado por Ortega e Azevedo, 1995, sendo as dimensões apresentadas na figura 4.1: H=3 cm h=3H, X_E =3H, X_T =30H, o número de Reynolds é definido com base em H e V_{max} (velocidade máxima do perfil de velocidades na entrada). Como condições de contorno essenciais empregou-se um perfil de velocidades de camada limite (v_1 =V(y), v_2 =0) na entrada, velocidade nula nas paredes inferiores e lateral e (v_1 = V_{max} , v_2 =0) no contorno superior. A malha empregada é similar a encontrada em [Ortega e Azevedo, 1995] (64 x 32 (X_E x h) na entrada e 84 x 302 (H_T x X_T) na região posterior ao degrau).

Esta configuração foi resolvida empregando os três sistemas descritos em 4.1. Utiliza-se a seguinte nomenclatura para identificar os resultados das simulações nos próximos parágrafos: **NS1** - solução das equações considerando $\overline{v'_i v'_i} = 0$, $L_{ij}=0$ e $C_{ij}=0$;

LES1 - solução das equações, empregando o modelo de Smagorinsky para representar $\overline{v'_i v'_j}$ e L_{ii}=0 e C_{ii}=0

LES2 - solução das equações, empregando o modelo de Smagorinsky e a aproximação dada pela equação (2.) para os termos L_{ij} e C_{ij}.

As figuras 4.3, 4.4 e 4.5 apresentam o campo de vorticidade em diferentes instantes de tempo ($\hat{t} = tV_{max}$ /H) para as três simulações do problema, onde verifica-se a grande semelhança dos resultados obtidos nas simulações que empregam o modelo de Smagorinsky (*LES1 e LES2*). É possível observar também a semelhança destes resultados com os apresentados por Ortega e Azevedo, 1995, reproduzidos na figura 4.6. De acordo com o esperado, a simulação *NS1* não conduziu a bons resultados, apesar da malha refinada.

Outros parâmetro, além da topologia do escoamento apresentada nas figuras 3, 4 e 5, confirmam esta observação. O número de Strouhal foi obtido do histórico de velocidades de um ponto distante (X_R +H) do degrau. Para a simulação *NS1* encontrou-se um valor de 0.033; bastante distante dos valores publicados por outros autores, 0.15 [Ortega e Azevedo, 1995], 0.09 [Silveira Neto et al., 1993] e 0.07 (valor experimental referido em Silveira Neto et al., 1993). Para as simulações *LES1* e *LES2* obteve-se St=0.077, mais condizente com os valores publicados.

Nos casos *LES1* e *LES2*, a velocidade de transporte dos turbilhões formados após o degrau foi da ordem de $0.5V_{max}$, de acordo com o esperado [Silveira Neto et al., 1991]. Para a simulação *NS1* obteve-se um valor de $0.15V_{max}$. Além desta baixa velocidade de deslocamento é possível verificar na figura 3 que os turbilhões não se mantêm.

O comprimento de recolamento é conhecido experimentalmente [Armaly et al., 1983], sendo esperado um valor próximo a 7H, para este número de Reynolds. No caso *NS1*, obteve-se uma região de recirculação muito alongada, X_R =10H, as simulações *LES1* e *LES2* apresentaram uma correta previsão de X_R , sendo os valores obtidos 7.3H e 7.2H, respectivamente. Sendo que, X_R foi calculado a partir do escoamento médio, adotando-se o valor da coordenada do primeiro nó com componente horizontal do vetor de velocidade positiva, a partir de uma média com um período suficientemente longo para obter um valor constante desta coordenada.



Figura 4.3 - Distribuição de vorticidade, resultados da simulação *NS1* (desprezando os termos relativos a efeitos às escalas inferiores à resolução da malha), em diferentes instantes de tempo: (a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g), $\hat{t} = .75$.



Figura 4.4 - Distribuição de vorticidade, resultados da simulação *LES1* (empregando o modelo de Smagorinsky, desprezando os termos de Leonard e cruzados), diferentes instantes de tempo: (a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g), $\hat{t} = .75$.



Figura 4.5 - Distribuição de vorticidade, resultados da simulação *LES2* (considerando todos os termos de escalas sub-malha), em diferentes instantes de tempo: (a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g), $\hat{t} = .75$.

Figura 4.6 - Distribuição de vorticidade, resultados apresentados por Ortega e Azevedo, 1995; (a), $\hat{t} = 15$; (b), $\hat{t} = 25$; (c), $\hat{t} = 35$; (d), $\hat{t} = 45$; (e), $\hat{t} = 55$; (f), $\hat{t} = 65$; (g), $\hat{t} = .75$. Os resultados das simulações empregando o modelo de Smagorinsky para pequenas escalas estão de acordo com valores numéricos e experimentais publicados por outros autores. Os termos de Leonard e termos cruzados tiveram pouca influência nos resultados práticos, mas aumentam (em torno de 20%) o tempo de processamento, sendo vantajoso negligenciá-los. A má qualidade dos resultados das simulações desprezando os efeitos das pequenas escalas confirmam a necessidade do uso de modelos para representá-los.

4.2 Análise Empregando o Código Tridimensional: Escoamento Forçado em Cavidade Bidimensional

Para desenvolver o programa de análise de escoamentos turbulentos tridimensionais descrito neste trabalho, teve-se como base o programa de análise de escoamentos tridimensionais laminares desenvolvido por Azevedo, 1999, em sua tese de doutorado. O programa laminar havia sido elaborado para problemas de interação fluido-estrutura e incluía a possibilidade de movimento de malha. Por esta razão, todas as matrizes dos elementos eram calculadas a cada passo de tempo.

Visando reduzir o tempo de processamento, o programa laminar tridimensional foi reestruturado para armazenar as matrizes de elemento que não variam no tempo, evitando recalcular os valores que dependem apenas da malha. O programa original tinha uma ótima performance em termos de vetorização (800 Mflops); procurou-se preservar esta característica, com um tempo de processamento (CPUs) de 1,76 x 10^{-5} s por passo de tempo, por grau de liberdade da malha. O novo programa laminar reduziu o tempo de processamento em relação ao programa base para 8,69 x 10^{-6} s por passo de tempo, por grau de liberdade da malha , mantendo uma boa performance neste equipamento (700 Mflops).

Para verificar a correção do novo programa desenvolveram-se alguns experimentos, visando comparar os resultados entre o programa base e o novo programa laminar. Posteriormente foram processados alguns problemas laminares com os programas laminar reestruturado e com os dois modelos de turbulência, visando garantir que não houve erro na implementação dos programas.

Este capítulo apresenta um dos exemplos que foi empregado durante esta etapa de desenvolvimento do código computacional. Tendo sido o programa laminar validado por Azevedo, 1999, para baixos números de Reynolds.

O problema empregado para verificar a alteração do programa base laminar e a implementação dos modelos de turbulência foi a simulação de um escoamento forçado em cavidade bidimensional quadrada com dimensões de 1x1m. Diversos autores apresentam resultados numéricos para este problema [Ghuia, et al, 1982; Sohn, 1988; Reddy e Gartling, 1994]. Por ser um código tridimensional empregou-se um elemento de profundidade e restringiu-se a componente da velocidade na direção perpendicular ao plano da cavidade (v₃=0, para tos os nós da malha)

A malha adotada é semelhante a utilizada por Ghia et al, 1982, para Re ate 3.200., contendo 128x128 elementos, sendo a profundidade do elemento de 1/128.





Figura 4.7 – Escoamento forçado em uma cavidade, geometria do problema.

Condições de Contorno e Iniciais		
$v_1 = v_2 = v_3 = 0$	em $x_2=0, x_1=0 e x_1=1$	
$v_1=100 \text{ m/s}$, $v_2=v_3=0 \text{ em } x_2=1$		
v ₃ =0	em todo o domínio	
$v_1 = v_2 = v_3 = p = 0$	em t=0	

O problema processado foi o escoamento com Reynolds 100, também empregado por Azevedo, 1999 em sua validação. Os resultados obtidos foram os mesmos empregando programa base [Azevedo,1999] e a nova versão do programa laminar desenvolvida no presente trabalho. Estes coincidem com os resultados de Ghia et al, 1982. O perfil de velocidades horizontais ao

longo da linha média vertical da cavidade está apresentado na figura 4.8, onde é possível observar a total coincidência de valores.



Figura 4.8 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=100) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 (•).

Posteriormente foram investigados escoamentos caracterizados por números de Reynolds mais altos, Re=400,1000,3200 e 5000. Os resultados obtidos com os programas base laminar e laminar reestruturado coincidem entre si, mas não estão completamente de acordo com Ghia et al, 1982. Estes resultados para as velocidades horizontas na linha média da cavidade estão apresentados nas figuras 4.9 a 4.12.



Figura 4.9 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=400) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 (•).



Figura 4.10 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=1000) empregando: o programa base

(linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 (•).



Figura 4.11 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=3200) empregando: o programa base (linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 (•).



Figura 4.12 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=5000) empregando: o programa base

(linha tracejada); o programa laminar reestruturado (linha cheia), e resultados de Ghia, et al., 1982 (•).

Para número de Reynolds superiores a 400, os resultados obtidos demonstram diferenças com relação aos resultados, também numéricos, de Ghia et al, 1982. Na figura 4.13 estão resumidos os perfis de velocidades para os diferentes casos (números de Reynolds), obtidos com o programa laminar reestruturado. Estes podem ser comparados aos perfis apresentados por Reddy e Gartling, 1994, que empregou uma malha não uniforme de 14x14 elementos em um código bidimensional, reproduzidos na figuras 4.14. Pode-se observar uma boa coincidência.

Estes resultados demosntram a correção na reestruturação do programa laminar. O novo programa foi então utilizado como base para a criação dos novos códigos incluindo os modelos de turbulência, o código onde foi incluído o modelo de Smagorisky e o código com modelo dinâmico. Os nomes utilizados para referir aos diferentes programas estão resumidos no quadro abaixo.

Nomes do Programas	
3dlam – codigo laminar/sem modelo	
3dles – código com modelo de Smagorinsky	
3ddin – código com modelo dinâmico	

Com o objetivo de verificar se não foram introduzidos erros durante o processo de inclusão dos modelos no programa laminar e fazer uma primeira verificação sobre a correção do comportamento dos modelos, alguns exemplos de escoamentos laminares com Reynolds relativamente altos foram processados. Espera-se que, para escoamentos laminares, os resultados obtidos com e sem modelos sejam semelhantes.

Tendo se confirmado a coincidência dos resultados avaliados, conforme se apresenta nos perfis de velocidade representados nas figuras 4.15 e 4.16, passou a se estudar o comportamento da modelagem implementada em escoamentos tridimensionais turbulentos. Os problemas analisados e resultados obtidos são apresentados a seguir





Figura 4.14 – Resultados de Reddy e Gartling, 1994, para o perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para vários números de Reynolds, escoamento na cavidade bidimensional .



Figura 4.15 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=3200) empregando: _____- o programa laminar reestruturado , _____- com modelo de Smagorinsky e _____- com modelo dinâmico.



Figura 4.16 – Resultados coincidentes do perfil de velocidades horizontais na linha média vertical para o escoamento na cavidade bidimensional (Re=5000) empregando: _____- o programa laminar reestruturado , _____- com modelo de Smagorinsky e _____- com modelo dinâmico.

4.3. Análise do Escoamento Forçado em Cavidade Tridimensional

Neste parágrafo apresentam-se resultados obtidos na simulação do escoamento em uma cavidade tridimensional. Diversos autores têm investigado este tipo de escoamento, por se tratar de um escoamento complexo em uma geometria simples, assim sendo, é um problema adequado para verificar e comparar os modelos implementados. Resultados experimentais para a cavidade tridimensional podem ser encontrados em [Prasad e Koseff, 1989], resultados numéricos são apresentados por autores com diferentes métodos e modelos, [Denaro, 1996; Kim e Menon, 1999; Zang et al., 1993]. Os resultados experimentais de Prasad e Koseff, 1989, foram utilizado, no presente trabalho, para orientar os experimentos numéricos desenvolvidos a cerca da cavidade tridimensional.

Os resultados obtidos estão muito próximos aos resultados experimentais e tem qualidade comparável aos resultados numéricos de Zang, Street e Koseff, 1993, e Kim e Menon, 1999, que empregaram diferentes esquemas de simulação de grandes escalas.

4.3.1 Descrição do Problema

O problema consiste na análise do escoamento forçado em uma cavidade tridimensional, dois casos foram processados, caracterizado por Re=3200 e Re=10000. O escoamento com Re=3200 tem fator de aspecto 1.0 (1:1:1). O escoamento com Re =10000, tem fator de aspecto de 0.5 (1:1:0.5). O número de Reynolds é calculado por U_BB/v (figura 4.17). Este escoamento tem um comportamento laminar até números de Reynolds da ordem de 5000, para Re a partir de 10000, o escoamento é localmente turbulento. [Zang et al., 1993].

O escoamento é induzido pelo movimento da parede superior, com velocidade U_B , sendo as demais paredes fixas. Com o objetivo de reduzir o número de elementos necessários para representar o domínio, considera-se que o escoamento tem um plano de simetria (figura 4.17) e simula-se apenas a metade do domínio. O problema caracterizado por Re=3200 foi analisado empregando o código com modelo de Smagorinsky (3dles) para o domínio completo e para a metade do domínio, assumindo a simetria. Os mesmos resultados parciais foram obtidos para os diferentes domínios, comparando-se os perfis médios de velocidade, assim como estatísticas da turbulência. Confirmando que a análise do problema considerando a simetria e, consequentemente empregando apenas metade do domínio, é uma boa aproximação.



Figura 4.17 - Esquema do domínio do problema: Cavidade Tridimensional

Condições de contorno e condições iniciais		
$v_1 = U_B, v_2 = v_3 = 0$	em x ₂ =1.0	
$v_1 = v_2 = v_3 = 0.0,$	em $x_1=0.0$, $x_1=1.0$, $x_2=0.0$ e	
x ₃ =0		
v ₃ =0.0 (simetria),	em x ₃ =x _{sim}	
$v_1 = v_2 = v_3 = p = 0$	em t=0	

4.3.2 - Cavidade Tridimensional - Resultados: Re=3200

Nesta seção, apresenta-se os resultados para o escoamento forçado da cavidade tridimensional caracterizado por Re=3200 e com fator de aspecto (1:1:1). Modelada apenas a metade do domínio, por admitir um problema com simetria (figura 4.17). Os dados e informações sobre a malha estão resumidos no quadro abaixo. Um corte da malha, bem como uma imagem tridimensional estão apresentados nas figuras 4.18 e 4.19. A malha é não uniforme nas direções dos eixos x_1 e x_2 , possuí concentração próximo às paredes, sendo uniforme na direção x_3 . O menor elemento tem dimensões da ordem de 1×10^{-2} .

Resumo de Dados do Problema	
U _B = 100 m/s	
Re = 3200	
$\Delta t = 1.5 \text{ x } 10^{-5}$	
Fator de aspecto (B:D:H)= (1:1:1)	
Domínio x1=[0,1], x2=[0,1],x3=[0,0.5](metros)	
x _{sim} =0.5m	
Número de Elementos da Malha $(x1:x2:x3) = (32:32:16)$	
$(x_i)_{min}/B = 0.994 \text{ x } 10^{-2}$	
C(velocidades de propagação do som) = 340 m/s	



Figura 4.18 – Corte da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade 3D, Re=3200

Para obter os dados para análise estatística da turbulência foram armazenados os resultados das variáveis nos pontos sobre as linhas médias horizontal e vertical do plano de simetria, a cada intervalo de tempo de integração. Não existem informações precisas sobre o período de tempo adotado para análise estatística nos resultados experimentais [Prasad e Koseff,

1989]. O presente processamento foi conduzido até 0.795 s, a análise estatística foi processada sobre o período final de 0.24 s (aproximadamente o último terço do período total processado).



Figura 4.19 – Imagem da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade 3D, Re=3200

O período total de dados acumulados do experimento [Prasad e Koseff, 1989] foi de 5.46 min, resultando em um tempo total adimensional de 47. Redimensionalizando este tempo para o problema processado, chega-se a um valor de 0.47s. O período (adimensionalizado) empregado para análise é da ordem de 50% do período total de dados, acumulados no experimento.

A seguir apresenta-se os resultados obtidos para os perfis das componentes da velocidade média, nas linhas do centro geométrico do plano de simetria da cavidade, empregando os programas de análise laminar (3dlam), com modelo de Smagorinsky (3dles) e com modelo dinâmico (3ddin). Os valores experimentais apresentados junto com os resultados do presente trabalho foram inferidos das figuras publicadas pelos autores. Apresenta-se também resultados numéricos e experimentais de [Zang et al., 1993] e [Prasad e Koseff, 1989].

As velocidades médias adimensionalizadas representadas nas figuras por V1 e V2 são calculadas como:

sendo que a a dupla barra indica média temporal. As correlações das flutuações das velocidades estão adimensionalizadas da seguinte forma (semelhante aos resultados experimentais e numéricos de outros autores [Zang et al., 1993] e [Prasad e Koseff, 1989]):

Sendo as flutuações definidas como:

Os resultados de velocidades médias são coincidentes para os três processamentos efetuados e têm boa aproximação com os resultados experimentais, conforme é possível observar na figura 4.19. Apenas o escoamento sem modelo apresenta um valor levemente menor para o pico negativo de V1. Todos os modelos implementados não representam bem este pico inferior.

As figuras 4.19, 4.21 e 4.23 apresentam os resultados obtidos no presente trabalho em conjunto com os resultados experimentais publicados em Prasad e Koseff, 1989. As figura 4.20, 4.22 e 4.24 apresentam os resultados numéricos de Zang et al., 1993, comparados com os mesmos resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989].

As distribuições das correlações de flutuações das velocidades obtidas no presente trabalho, apresentadas nas figuras 4.21 e 4.23 são muito próximas aos resultados das referências, figuras 4.22 e 4.24, sendo que o pico inferior positivo de UV1 (figura4.23) foi melhor capturado pelo modelo dinâmico.



Figura 4.19 – Perfis de velocidades médias adimensionalizadas nas linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados do presente trabalho: --- 3dles,3dlam e ____3ddin.



Figura 4.20 - Perfis de velocidades médias adimensionalizadas nas linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria, ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; _____ e ---resultados numéricos [Zang et al. 1993]



Figura 4.21 – Distribuição de V1rms e V2rms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados do presente trabalho--- 3dles,3dlam e ____3ddin.



Figura 4.22 - Distribuição de Urms e Vrms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria,, ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; _____ e ---resultados numéricos [Zang et al., 1993].



centrais vertical e horizontal do plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados do presente trabalho: --- 3dles,3dlam e 3ddin.

Figura 4.23 – Distribuição de UV sobre as linhas Figura 4.24 - Distribuição de UV sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria,, ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; e ---resultados numéricos [Zang et al., 1993]

1.0

0.8

0.6

0.4

0.2

0

1.0

y/D

ind

Os resultados apresentados nas figuras 4.19, 4.21 e 4.23 permitem a avaliação quantitativa das análises desenvolvidas, mostrando a concordância com os resultados experimentais e numéricos representados nas figuras 4.19 a 4.24. A visualização do escoamento pode ser feita através das imagens apresentadas nas figuras 4.26 a 4.29, nas quais são publicados resultados instantâneos de iso-pressões, campo de velocidades (colorido), iso-vorticidades e linhas de corrente, no plano médio da cavidade, para escoamentos obtidos com os diferentes programas (3dlam, 3dles e 3ddin).

A diferença existente entre o escoamento bidimensional e o escoamento tridimensional é discutida no estudo experimental apresentado por Prasad e Koseff, 1989. Uma avaliação desta diferença pode ser feita comparando os perfis de velocidades médias adimensionalizadas para a cavidade tridimensional e bidimensional com número de Reynolds 3200, apresentados por [Zang, et al, 1994] e reproduzidos na figura 4.25, é possível observar a alteração significativa do escoamento decorrente da tridimensionalidade.



Figura 4.25 – Perfis de velocidades médias adimensionalizadas nas linhas médias da cavidade bidimensional (esquerda) e linhas médias do plano central, para a cavidade tridimensional (direita), resultados apresentados por Zang et al., 1994.

Observando os resultados obtidos no presente trabalho, apresentados na figura 4.19 (3D) e na figura 4.15 (2D), é possível verificar a correta representação dos efeitos tridimensionais, que alteram significativamente o campo de escoamentos.

Os trabalhos publicados consultados não apresentam resultados de iso-pressões, campo de velocidades, iso-vorticidades ou linhas de corrente, para o caso tridimensional, apenas resultados bidimensionais foram encontrados. Por esta razão apresenta-se apenas os resultados obtidos no presente trabalho (figuras 4.26 a 4.49), com o objetivo de permitir uma avaliação qualitativa dos campos de velocidade, pressão e vorticidade calculados. É possível verificar que, qualitativamente, para este número de Reynolds, existem pequenas diferenças entre os resultados decorrentes da análise com o modelo dinâmico (3ddin) e com o modelo (3dles) de Smagorinsky. Observa-se ainda uma diferença um pouco mais significativa, mas ainda bastante reduzida, entre os resultados das análises com modelo (3ddin e 3dles) e sem modelo submalha (3dlam).



Figura 4.26 – Isolinhas de pressão no plano de simetria, Re=3200, resultados do presente trabalho (t=0.795s): (a) 3dlam, (b) 3dles e (c) 3ddin.







(c)

Figura 4.27 - Regiões de iso-velocidade, Re=3200, no plano de simetria, resultados do presente trabalho (t=0.795s): (a) 3dlam, (b) 3dles e (c) 3ddin.



Figura 4.28 – Isolinhas de vorticidade no plano de simetria, Re=3200, resultados do presente trabalho (t=0.795s): (a) 3dlam , (b) 3dles e (c) 3ddin .






(b)



Figura 4.29 – Isolinhas de função de corrente no plano de simetria, Re=3200, t=0.795s: (a) 3dlam , (b) 3dles e (c) 3ddin .

4.3.2 Cavidade tridimensional – Resultados, Re=10000

Nesta seção, apresentam-se os resultados para o escoamento forçado da cavidade tridimensional caracterizado por Re=10000 e com fator de aspecto (1:1:0.5). Modela-se apenas a metade do domínio, por admitir um problema com simetria (figura 4.17). Os dados e informações sobre a malha estão resumidos no quadro abaixo.

Resumo de Dados do Problema- Cavidade 3D -			
Re=10000			
U _B = 100 m/s			
Re = 10000			
$\Delta t = 0.75 \text{ x } 10^{-5}$			
Fator de aspecto (B:D:H)= (1:1:0.5)			
Domínio x1=[0,1], x2=[0,1],x3=[0,0.25](metros)			
$x_{3 sim} = 0.25m$			
Número de Elementos da Malha $(x1:x2:x3) = (64:64:16)$			
$(x_i)_{min}/B = 5.02 \text{ x } 10^{-3}$			
C(velocidades de propagação do som) = 340 m/s			



Figura 4.30 – Corte da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade 3D, Re=10000.



Figura 4.31 – Imagem da malha de elementos finitos empregada no plano de simetria, cavidade 3D, Re=10000.

Um corte da malha, bem como uma imagem tridimensional estão apresentados nas figuras 4.30 e 4.31. A malha é não uniforme nas direções dos eixos $x_1 e x_2$, possui concentração próximo às paredes, sendo uniforme na direção x_3 . O menor elemento tem dimensões da ordem de $5x10^{-3}$.

Para obter os dados para análise estatística da turbulência foram armazenados os resultados das variáveis nos pontos sobre as linhas médias, horizontal e vertical, do plano de simetria, a cada intervalo de tempo de integração. O processamento foi conduzido até 1.095 s e a análise estatística foi processada sobre o período final de 0.6265 s. Depois de obter-se um escoamento médio constante, definiu-se o período de tempo para análise estatística investigando as flutuações; foi adotado o período a partir do qual, dentro do escoamento médio constante, não ocorreram mais variações significativas das flutuações.

As figuras 4.32, 4.34 e 4.36 apresentam velocidades médias adimensionalizadas (V1 e V2), assim como V1rms, V2rms, UV1 e UV2, definidas nas equações (4.2) a (4.5), resultados



Figura 4.32 – Perfis de velocidades médias adimensionalizadas, Re=10000, nas linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria, + - resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e resultados do presente trabalho: --- 3dles e 3ddin.



Figura 4.33 - Perfis de velocidades médias adimensionalizadas, Re=10000, nas linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria, ° e
- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; e ---resultados numéricos [Zang et al, 1993]





Figura 4.34 – Distribuição de V1rms e V2rms Figura 4.35 – Distribuição de Urms e Vrms sobre as linhas centrais vertical e horizontal do sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de simetria, Re=10000: + - resultados plano de simetria, Re=10000: ° e □- resultados experimentais [Prasad e Koseff, 1989] e experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; e --resultados do presente trabalho--- 3dles e resultados numéricos [Zang et al, 1993]. 3ddin..

do presente trabalho comparados com resultados experimentais de Prasad e Koseff, 1989. As Figuras 4.33, 4.35 e 3.37 apresentam os resultados numéricos de Zang et al., 1993 comparados com os mesmos resultados experimentais das figuras 4.32, 4.34 e 4.36.





Figura 4.36– Distribuição de UV sobre as linhas Figura 4.37 - Distribuição de UV sobre as linhas centrais vertical e horizontal do plano de centrais vertical e horizontal do simetria, + - resultados experimentais [Prasad e simetria, Koseff, 1989] e resultados do presente trabalho, experimentais [Prasad e Koseff, 1989]; Re=10000: --- 3dles e 3ddin.

plano de Re=10000, 0 e ___ resultados e ---resultados numéricos [Zang et al, 1993]

Os resultados obtidos para este número de Reynolds são muito próximos aos resultados experimentais, sendo as diferenças do campo médio calculado com os diferentes modelos desprezíveis, conforme apresenta a figura 4.32. Nas correlações da turbulência existem diferenças, favoráveis ao modelo dinâmico, como por exemplo os picos inferiores de UV1 e V1rms. Comparando com os resultados de Zang, et al, 1993 (que também reproduzem os resultados experimentais de Prasad e Koseff, 1989), confirma-se a boa qualidade dos resultados obtidos.

As figuras 4.38 a 4.41 apresentam resultados de iso-pressões, campo de velocidades (colorido), iso-vorticidades e função de corrente, para escoamentos obtidos com os diferentes programas (3dles e 3ddin). Da mesma forma que no problema caracterizado por Re=3200, apresentado na secção anterior, não foram encontrados estes resultados publicados para o caso tridimensional, por esta razão, publica-se apenas os resultados do presente trabalho.



Figura 4.38 – Isolinhas de pressão, Re=10000 (t=1.095s): (a) 3dles e (b) 3ddin.

As oscilações do campo de pressões instantâneo são um pouco menos severas nos resultados obtidos com o modelo dinâmico, este resultado repete-se para outros instantes de tempo. Oscilações de pressão para este escoamento, no caso bidimensional também estão presentes nos resultados de Sohn, 1989, obtidos com um esquema baseado em equações médias de Reynolds e modelo k-ε.



Figura 4.39 – Regiões de isso-velocidade, Re=10000, no plano de simetria, (t=1.095s): (a) 3dles e (b) 3ddin..



Figura 4.40 – Isolinhas de vorticidade no plano de simetria, Re=10000, (t=1.095s): (a) 3dles e (b) 3ddin.



Figura 4.41 – Isolinhas de função de corrente no plano de simetria, Re=10000, (t=1.095s): (a) 3dles e (b) 3ddin.

4.4 Análise do Escoamento Sobre um Degrau

Com o objetivo de validar o código tridimensional desenvolveu-se a simulação de escoamentos sobre um degrau bidimensional caracterizados por baixos números de Reynolds, empregando os dois programas de simulação de grandes escalas implementados, sejam os programas com modelo de Smagorinsky e com modelo dinâmico. Os resultados são comparados entre si e com dados experimentais [Armaly et al., 1983, Kim et al, 1980] e numéricos de outros autores[Silveira Neto et al., 1993; Kaiktsis et al, 1991], para problemas semelhantes.

Este escoamento é tema de diversos trabalhos publicados, Williams e Baker, 1997, apresentam um estudo númérico comparando resultados bidimensionais e tridimensionais em escoamentos laminares. Sagaut et al, 1994, empregou diferenças finitas, com modelo de Smagorinsky e modelo dinâmico em análise bidimensional, Bobenrieth, 1994, empregou o modelo de Smagorinsky para análise bidimensional do degrau , com elevado número de Reynolds, assim como Pirani et al, 2000, que apresentam resultados para número de Reynolds 1.32x10⁵ e também Ortega e Azevedo, 1995. Sohn, 1989, apresenta resultados empregando elementos finitos e modelagem clássica da turbulência. O artigo de Silveira Neto et al, 1991, apresenta resultados para escoamentos não isotérmicos.

Até problemas caracterizados por Reynolds 1000 foi possível obter resultados coerentes com as referências e simular períodos de tempo suficientes para obter o escoamento médio estacionário. Problemas de oscilações de pressão, desde os casos laminares, levaram a redução do intervalo de tempo de integração necessário para convergência, conduzindo a um tempo de processamento superior às estimativas iniciais.

Para problemas com Reynolds mais elevados, não foi possível obter resultados satisfatórios, pois os tempos de processamento envolvidos superaram os recursos e prazos disponíveis. Resultados parciais obtidos instantaneamente são bons, mas não foi possível a simulação de um período suficiente para apresentar resultados médios e proceder a análise estatística, como no caso da cavidade tridimensional. Da mesma forma as simulações tridimensionais ficaram limitadas a resultados parciais. As razões para esta dificuldade serão discutidas no capítulo final da tese.

O problema físico a ser estudado é o mesmo apresentado na seção 4.1.1, porém empregou-se os código tridimensionais para simular os problemas, as dimensões são semelhantes ao degrau do experimento de Armaly, et al, 1983. O domínio é semelhante ao apresentado na figura 4.42, porém como o problema é bidimensional a profundidade w é de apenas um elemento e as componentes da velocidade na direção $x_3(z)$, são impostas nulas ($v_3=0$)

102

em todo o domínio. Esta estratégia de processar um problema bidimensional, com apenas um elemento de profundidade, visa reduzir as dimensões do problema computacional, tendo em vista que os problemas estão próximos aos limites máximos do equipamento disponível, em termos de memória e velocidade de processamento, que viabilize a solução.



Figura 4.42 - Esquema do domínio e dimensões características do escoamento sobre o degrau.

4.4.1 Validação do Programa: Análise do Escoamento Bidimensional a Baixos Números de Reynolds

Nesta seção apresenta-se resultados do escoamento bidimensional, sobre o degrau com baixos números de Reynolds; empregando os dois códigos, com modelo de Smagorinsky e modelo dinâmico. Esta análise tem por finalidade a validação dos programas, em virtude da disponibilidade de dados experimentais [Armaly et al., 1983] e numéricos [Ortega e Azevedo, 1995; Silveira Neto et al., 1993; Kaiktsis et al, 1991]. Neste escoamento uma importante característica a ser verificada é a relação entre o número de Reynolds e o comprimento de recolamento X_r .

Como condições de contorno, empregou-se um perfil de velocidades ($v_1=V(y)$, $v_2=0$) parabólico completamente desenvolvido na entrada e velocidades nulas ($v_1=v_2=v_3=0$) nas paredes superior e inferiores. Na saída existe a condição de contorno natural nula (t1=t2=t3=0) (equação 2.52). Como condições iniciais, empregou-se, na primeira simulação, condições iniciais homogêneas ($v_1=v_2=v_3=p=0$), nas simulações seguintes empregou-se o último campo de pressões e velocidades calculado para o número de Reynolds 100. O número de Reynolds é definido da mesma forma que nos experimentos de Armaly et al, 1995 (repetindo 4.1):

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho\left(\frac{2V \max_{3}}{2}h\right)}{\mu}$$
(4.6)

Resumo de Dados do Problema- Degrau 2D/Código3DV1max= 75 m/sNúmero de Elementos da Malha:Entrada $x_1[0,1]$:(x1:x2:x3) = (6:30:1) $x_1[1,21]$:(x1:x2:x3) = (140:60:1) $x_1[21,31]$:(x1:x2:x3) = (30:60:1)Número total de elementos:10380Número total de nós:21234C(velocidades de propagação do som) = 340 m/s





Para definir o comprimento de recolamento investiga-se a primeira camada de pontos da malha acima da parede inferior após o degrau, o ponto de recolamento é definido como o

primeiro nó da malha, após a região de separação (figura 4.42), onde a componente v1 da velocidade média assume valor positivo. O comprimento de recolamento adimensional é definido como X_r/H , onde H é altura do degrau (0.94m).

Os resultados obtidos para a relação $X_r/H \times Re$, juntamente com os valores apresentados por Armaly, et al., 1983. estão na tabela 4.1. O gráfico da figura 4.2 (seção 4.1.1) apresenta resultados semelhantes obtidos com o código bidimensional e incluí resultados de outros autores [Armaly, et al., 1983. Silveira Neto, et al., 1993 e Kaiktsis et al., 1991]

X _r /H x Re				
Re	3dles	3ddin	Armaly et al. 1983	
			experimental	
100	2.74	2.89	3.0	
400	7.60	7.90	8.0	
1000	11.09	11.25	16.0	

Tabela 4.1 – Comprimento de recolamento X_r/H em função do número de Reynolds, resultados com os programas 3dles e 3ddin.

Os resultados para os escoamentos com Re=100 e Re = 400 são bons, com os dois modelos. Sendo escoamentos laminares não espera-se uma diferença importante entre os resultados. Porém como estão sendo empregados modelos para efeitos das escalas sub-malha e a malha utilizada não é capaz de capturar todas as escalas envolvidas, estes modelos influenciam os resultados. O modelo dinâmico para Re=100 resultou em 20080 (95%) nós com coeficiente C(x,t) nulo, para o escoamento com Re=400 foram 19860 (94%) nós, nenhum elemento teve o valor da viscosidade turbulenta alterado por aplicação do limite de viscosidade turbulenta negativa. Para o escoamento com Re=1000, 12718 (60%) nós tiveram C(x,t)=0, enquanto 9 (0.09%) elementos tiveram a viscosidade turbulenta negativa limitada.

Conforme foi apresentado na seção 4.1.1, em escoamentos laminares caracterizados por números de Reynolds até 500, a simulação bidimensional apresenta bons resultados, a partir desta ordem de Re, o comprimento de recolamento passa a ser subestimado por simulações bidimensionais. O afastamento da realidade física decorre da importância de efeitos tridimensionais nesta faixa de Reynolds, como afirmam Silveira Neto et al., 1993, e Kaiktsis et al, 1991 e confirma o trabalho de Williams e Baker, 1997.

Resultados do comprimento de recolamento em simulações numéricas bidimensionais para Re maiores que 500 foram apresentados por Williams e Baker, 1997, que encontraram um valor de Xr=10, para Reynolds 800; enquanto no processamento tridimensional (incluindo paredes laterais) o valor passou para aproximadamente X_r =14, semelhante ao resultado experimental de Armaly et al, 1989.

Para obter a solução correta, o intervalo de tempo de integração teve que ser reduzido à medida que ocorria um acréscimo do número de Reynolds. No esquema implementado, o limite de tempo de integração, condição necessária para a convergência, é calculado como a relação entre o menor Δx_i da malha e a soma da velocidade de propagação do som com a velocidade máxima de referência, multiplicado por um coeficiente de segurança, usualmente adota-se um valor da ordem de 0.25. Durante a análise destes problemas ocorreram instabilidades do campo de pressões, a partir de Re=400, que somente foram corrigidas com a redução do passo de tempo de integração.

Foram estudadas diferentes malhas (figuras 4.44 e 4.45) com maior refinamento, uniformes ou com concentração de elementos próximo às paredes e observou-se que o refinamento da malha não era suficiente para solucionar o problema das instabilidades do campo de pressões. Apenas com a redução do passo de tempo de integração estes problemas foram superados.



Figura 4.44 – Detalhe da malha uniforme com 100x300 elementos na região posterior ao degrau (step2b).



Figura 4.45 – Detalhe da malha com concentração de elementos próximo às paredes superior e inferior na região posterior ao degrau (step2a).

As malhas com refinamento próximo a parede apresentaram resultados sem as oscilações de pressão, mas que tinham influência clara da distorção dos elementos (figura 4.46).



Figura 4.46 – Detalhe do campo de pressões em malha com elementos muito distorcidos.

Para evitar esta distorção seria necessário refinar a malha na direção perpendicular às paredes e as dimensões do problema tornam sua solução inviável. Este fato fica mais evidente considerando que pretende-se estender estas análise para problemas tridimensionais reais, com muitos elementos na direção perpendicular ao plano do escoamento bidimensional Porém este refinamento provocou a redução do passo de tempo de integração como conseqüência da redução do menor Δx_i da malha. Empregando o passo de tempo reduzido à malha uniforme original, obteve-se bons resultados (apresentados nesta seção). A comparação dos resultados para a malha uniforme original, empregando diferentes intervalos de tempo de integração podem ser observados nas figuras 4.47 e 4.48.



 $\Delta t = 2.5 x 10^{-5}$



 $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$

Figura 4.47 – Campos de pressão obtidos com o mesmo programa, malha uniforme e diferentes intervalos de tempo de integração, para o mesmo instante de tempo. Re=400

Os problemas encontrados foram semelhantes para os diferentes programas implementados. Na figura 4.48 é possível observar a alteração do campo de velocidade em conseqüência da redução do intervalo de tempo de integração.



 $\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$



 $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$

Figura 4.48 – Vetores de velocidade obtidos com o mesmo programa, malha uniforme e diferentes intervalos de tempo de integração, para o mesmo instante de tempo. Re=400

A tabela 4.2 apresenta os valores dos intervalos de tempo de integração adotados para obter os resultados apresentados nesta seção. A coluna da direita apresenta, para comparação os valores de intervalos de tempo que deveriam ser empregados para a simulação direta do problema. Pode-se observar que os valores que foram necessários são da mesma ordem dos valores estimados para a simulação direta.

Intervalo de tempo de Integração			
Re	Δt	DNS	
100	2.5 x 10 ⁻⁵	4 x 10 ⁻⁵	
400	1x 10 ⁻⁵	1x10 ⁻⁵	
1000	5x 10 ⁻⁶	4x10 ⁻⁶	

Tabela 4.2 – Intervalos de tempo de integração adotados comparados com valores estimados para simulação direta, para solução dos escoamentos caracterizados por diferentes números de Reynolds.

A topologia dos escoamentos para os diferentes números de Reynolds e empregando os programas com modelo de Smagorinsky (3dles) e com modelo dinâmico (3ddin), pode ser observada nas figuras 4.49 a 4.59. São apresentados, sempre para o último instante de tempo resolvido, campos instantâneos de pressões, função de corrente, vorticidade e vetores de velocidade.



Figura 4. 49 – Visualização do campo de pressões para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes Re.



3ddin Re=100



3dles Re=100



3ddin Re=400



3dles Re=400



3ddin Re=1000



3dles Re=1000

Figura 4.50– Isolinhas de função de corrente para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes Re.



3dles Re=1000

Figura 4.51 – Campo de vorticidade instantâneo para resultados com 3dles e 3ddin, diferentes Re.



Figura 4.52 – Detalhe dos vetores de velocidade, resultados com 3ddin, Re=100.



Figura 4.53 – Detalhe dos vetores de velocidade, para resultados com 3dles, Re=100.



Figura 4.54 – Detalhe dos vetores de velocidade, para resultados com 3ddin, Re=400.



Figura 4.55 – Detalhe dos vetores de velocidade, para resultados com 3dles, Re=400.

Observa-se que os escoamentos são muido semelhantes, tendo uma pequena influência dos modelos sub-malha adotados, de acordo com o esperado em baixos números de Reynolds.



Figura 4.56– Detalhe dos vetores de velocidade, resultados com 3ddin, Re=1000.



Figura 4.57– Detalhe dos vetores de velocidade, resultados com 3dles, Re=1000



Figura 4.58– Detalhe dos vetores de velocidade, resultados obtidos com 3ddin, Re=1000, após a região de separação.



Figura 4.59– Detalhe dos vetores de velocidade, resultados obtidos com 3dles, Re=1000, após a região de separação.

Para este problema, escoamento bidimensional sobre o degrau, os resultados estão corretos, confirmando a validade do método, contudo a restrição do passo de tempo de integração é muito severa.

4.4.2 Análise do Escoamento Turbulento Bidimensional

O escoamento em um degrau passa ao regime turbulento em problemas caracterizados por números de Reynolds superiores a 7000. Diversos autores estudaram este tipo de escoamento, Sagaut et al, 1996, empregou diferenças finitas, com modelo de Smagorinsky e modelo dinâmico em análise bidimensional. Bobenrieth, 1994, também empregou o modelo de Smagorinsky para análise bidimensional do degrau , com elevado número de Reynolds. Pirani et al, 2000, obtiveram resultados para número de Reynolds 1.32x10⁵, empregando o modelo de Smagorinsky, assim como Ortega e Azevedo, 1995, Silveira Neto et al, 1991 e 1993, e Sohn, 1988. Resultados experimentais podem ser encontrados em Armaly, et al, 1983 e Kim et al, 1980

Diante da necessidade apresentada pelo esquema implementado, de redução do passo de tempo de integração à medida que cresce o número de Reynolds, o tempo de processamento para os casos de escoamentos turbulentos inviabilizaram a obtenção de resultados suficientes para desenvolver uma avaliação estatística. Contudo resultados parciais podem ser apresentados.

O estudo do escoamento com número de Reynolds 10000 foi escolhido, adotando-se um regime turbulento com baixo Re, para minimizar efeitos da redução do passo de tempo de integração. Os dados do problema são os mesmos dos problemas com baixo Reynolds, relatados na seção 4.4.1. Para este número de Reynolds resultados parciais coerentes com as referências foram obtidos adotando-se 5×10^{-7} s como intervalo de tempo de integração. Para este mesmo número de Reynolds não foi possível obter bons resultados empregando intervalo de 1 $\times 10^{-6}$.

A figura 4.60 apresenta a diferença do perfil da componente v1 dos vetores de velocidades médias, ao longo da linha sobre a parede inferior do degrau, obtidos nas simulações com diferentes intervalos de tempo de integração. A média foi calculada entre os mesmos instantes iniciais e finais. É possível observar os diferentes comprimentos da região de separação, confirmando a necessidade de refinar a discretização.

Até o instante de tempo 0.4 s, para o problema resolvido empregando o modelo dinâmico, o comprimento de recolamento X_r encontra-se em 7.3. Um ótimo resultado, tendo em vista os valores experimentais publicados de 7±1 [Kim et al, 1980]. Contudo este resultado não é conclusivo, pois é necessário obter resultados de um período mais longo para definir o escoamento médio. O número de elementos onde a limitação de viscosidade turbulenta negativa foi aplicada, até o instante de tempo processado, foi de 615 (menos de 6%).



Figura 4.60 – Perfís da componente v1 dos vetores de velocidades médias, ao longo da linha sobre a parede inferior do degrau, Re=10000: $\Delta t = 1 \times 10^{-6}$; $\Delta t = 5 \times 10^{-7}$.

A seguir são apresentadas figuras 4.61 a 4.65, contendo imagens instantâneas do campo de escoamentos para o problema resolvido com o modelo dinâmico, número de Reynolds $10000, 5 \times 10^{-7}$ s de intervalo de integração.



Figura 4. 61 – Visualização do campo de pressões para resultados com 3ddin, Re = 10000, t=0.4s.



Figura 4.62 – Isolinhas de função de corrente para resultados com 3ddin, Re = 10000, t=0.4s.



Figura 4.63 – Evolução do campo de vorticidade, resultados com 3ddin, Re = 10000.



Figura 4.64 – Detalhes dos vetores de velocidade para resultados com 3ddin Re=10000.



Figura 4.65 – Detalhes do campo de vorticidade para resultados com 3ddin, Re=10000.

4.4.3 Escoamento Sobre um Degrau Tridimensional

Foram desenvolvidos experimentos de aplicação do programa para o escoamento tridimensional sobre um degrau. Da mesma forma que no problema bidimensional, empregando o código computacional tridimensional, foi necessário utilizar reduzidos passos de tempo. Este fato limitou o processamento do problema, em virtude do tempo de processamento superar os prazos e a disponibilidade de recursos computacionais. Por esta razão, apresenta-se apenas os resultados obtidos a partir do programa com modelo dinâmico, para o escoamento sobre o degrau tridimensional, sem paredes laterais, para número de Reynolds 100 e 1000 (resultados parciais).

Estudos sobre o degrau turbulento tridimensional podem ser encontrados em Silveira Neto et al., 1993 e Lesieur, 1999. Escoamentos laminares podem ser encontrados no artigo de Williams e Baker, 1997.

O domínio do problema está representado na figura 4.66, a profundidade é 2m e a malha adotada é semelhante à empregada para as simulações bidimensionais descritas nas seções 4.4.1 a 4.4.3, sendo que na direção de x₃ existem 8 elementos.



Figura 4.66 - Esquema do domínio e dimensões características do escoamento sobre o degrau 3D

Como condições de contorno, empregou-se um perfil de velocidades ($v_1=V(y)$, $v_2=0$) parabólico completamente desenvolvido na entrada e velocidades nulas ($v_1=v_2=v_3=0$) nas paredes superior e inferiores. Nos limites $x_3=0$ e $x_3=2$, é imposta a condição de velocidade $v_3=0$. Na saída existe a condição de contorno natural nula (t1=t2=t3=0) (equação 2.52). Como condições iniciais, empregou-se, na primeira simulação, condições iniciais homogêneas $(v_1=v_2=v_3=p=0)$, na simulação seguinte utiliza-se o último campo de pressões e velocidades calculado para o número de Reynolds 100. O número de Reynolds é definido da mesma forma que nos experimentos de Armaly et al, 1995 (equação 4.1)

Resumo de Dados do Problema- Degrau 3D				
V1max= 75 m/s				
Número de Elementos da Malha:				
Entrada x ₁ [0,1]:	(x1:x2:x3) =(6:30:8)			
x ₁ [1,21]:	(x1:x2:x3)=(140:60:8)			
x ₁ [21,31]:	(x1:x2:x3)=(30:60:8)			
Número total de elementos: 83040				
Número total de nós: 95553				
C(velocidades de propagação do som) = 340 m/s				

Assim como no exemplo bidimensional, escoamento com Re=100, o comprimento de recolamento adimensional encontrado foi de 2.88. As figuras 4.67 a 4.69 apresentam visualizações do escoamento tridimensional caracterizado por Re=100.



Figura 4.67 – Campo de pressões, Re=100, plano central (x3=1), degrau 3D, empregando 3ddin.

O resultado apresentado em 4.67 é semelhante ao encontrado na simulação bidimensional, figura 4.49.



Figura 4.68 – Detalhe dos vetores de velocidade, Re=100, degrau 3D, empregando 3ddin.



Figura 4.69 – Detalhe: iso-superfícies de vorticidade (w), Re=100, degrau 3D, empregando $3ddin - w_3 = 5.7x10^1$, $w_1 = 4x10^{-4}$ e $w_1 = -4x10^{-4}$.

Para o escoamento com Re=1000, não foi possível completar a simulação até permitir uma análise do ponto de recolamento, em virtude do longo tempo de processamento necessário. Mas resultados parciais podem ser observados nas figuras 4.70 a 4.75.



Figura 4.70 – Campo de pressões, Re=1000, plano central $(x_3=1)$, degrau 3D, empregando 3ddin.



Figura 4.71 – Detalhe dos vetores de velocidade, plano central, Re=1000, degrau 3D, empregando 3ddin.



Figura 4.72 – Detalhe dos vetores de velocidade, Re=1000, degrau 3D, empregando 3ddin.



Figura 4.73 – Vorticidade, plano central, Re=1000, degrau 3D, empregando 3ddin.



Figura 4.74 – Detalhe da distribuição da vorticidade, Re=1000, degrau 3D, empregando 3ddin.



Figura 4.75 – Detalhe: iso-superficies de vorticidade (w), Re=1000, degrau 3D, empregando $3ddin - w_3 = 5.7x10^1$, $w_1 = 4x10^{-4}$ e $w_1 = -4x10^{-4}$.

Apesar da pouca resolução na direção x₃, os resultados parciais obtidos estão coerentes com os resultados encontrados nas referências. As imagens apresentadas demonstram que o escoamento está se desenvolvendo da forma esperada.

5. CONCLUSÕES

Foi desenvolvido um sistema de análise numérica de escoamentos incompressíveis, turbulentos, tridimensionais, isotérmicos e transientes, empregando o Método de Elementos Finitos e Simulação de Grandes Escalas. Para modelar as escalas sub-malha, foram implementados dois modelos, o modelo clássico de Smagorinsky e o modelo dinâmico de viscosidade turbulenta.

A implementação destes sistemas teve como objetivo o estudo e aplicação da Simulação de Grandes Escalas no âmbito do Método de Elementos Finitos. Este estudo é importante para o desenvolvimento da análise de escoamentos turbulentos visando aplicações em problemas acoplados, como otimização de formas, que inicialmente motivou este trabalho e problemas de interação fluido-estrutura. Nestes tipos de problemas, assim como em outros que envolvam geometrias complexas, o método de elementos finitos é muito adequado.

A modelagem matemática do problema baseia-se nas equações de conservação de massa e quantidade de movimento, para um escoamento quase incompressível, como alternativa para superar dificuldades existentes na simulação de escoamentos incompressíveis. Esta abordagem conduz a uma equação de conservação de massa que mantém o termo da derivada da pressão no tempo. Esta hipótese implica em admitir um valor finito para a velocidade de propagação do som (que é infinito em escoamentos totalmente incompressíveis) e desprezar as variações da massa específica. Portanto, ao assumir a hipótese de quase incompressibilidade, aproxima-se mais o modelo da realidade física, onde velocidades de propagação do som infinitas não são encontradas.

Das equações de conservação para escoamento quase incompressíveis, foram deduzidas as equações de grandes escalas. Deste processo resultaram equações que contém termos não resolvidos, que foram modelados empregando o modelo de Smagorinsky e o modelo dinâmico de viscosidade turbulenta. O emprego da modelagem quase-incompressível conduziu ao emprego da viscosidade turbulenta definida de forma diferente da usualmente empregada para escoamento incompressíveis, neste esquema o termo com a energia cinética da turbulência não é incluído na definição da viscosidade turbulenta.

O modelo dinâmico baseia-se no uso de dois diferentes filtros, com escalas diferentes. Emprega informações das menores escalas resolvidas para calcular o coeficiente da viscosidade turbulenta em função do tempo e do espaço. Por esta razão é necessário um segundo processo de filtragem para construir o modelo (sendo que à discretização em elementos finitos corresponde a aplicação da primeira filtragem).

Foi desenvolvida e aplicada uma nova metodologia para o processo de segunda filtragem, esta foi denominada de segunda filtragem por elemento finito independente. Consiste em empregar técnicas de interpolação e transformação de coordenadas do Método de Elementos Finitos, para obter a segunda filtragem das variáveis nos pontos da malha. Sendo que a segunda filtragem equivale uma interpolação linear dos valores, calculados em oito pontos vizinhos ao nó de interesse, para obter o valor filtrado neste ponto. O custo adicional em tempo de processamento, comparado ao modelo de Smagorinsky implementado esteve entre 9 e 18%, para os problemas analisados.

Para discretização espacial e temporal empregou-se o método de Taylor-Galerkin. O elemento finito utilizado foi o hexaédrico de oito nós, com funções de interpolação lineares para as componentes da velocidade e constante no elemento para a pressão . Para reduzir o tempo de processamento, adotou-se integração reduzida com funções analíticas no domínio do elemento.

Antes de iniciar o desenvolvimento dos programas tridimensionais, implementou-se o modelo de Smagorinsky em um programa de análise de escoamentos bidimensionais [Petry, 1993]. Este também emprega as equações de escoamentos quase-incompressíveis, com elementos quadriláteros e funções de interpolação lineares para velocidades e pressão, adota um esquema explícito de dois passos para integração.

Resultados, utilizando este programa bidimensional, foram obtidos para o escoamento em um degrau com números de Reynolds de 40000. Não ocorreram problemas semelhantes aos encontrados nas simulações deste escoamento com o programa tridimensional, e o passo de tempo de integração pode ser mantido, de acordo com a mesma condição de estabilidade do presente trabalho. Este programa também foi empregado para avaliar a importância dos termos cruzados e termos de Leonard, usualmente desprezados na simulação de grandes escalas. Confirmou-se a pouca importância destes termos no esquema implementado.

Resultados empregando os três programas tridimensionais, sem nenhum modelo, com modelo de Smagorinsky e com o modelo dinâmico, foram apresentados. A análise mais profunda foi desenvolvida sobre o escoamento forçado em uma cavidade tridimensional, com números de Reynolds 3200 e 10000. Estes resultados comprovam a consistência da análise obtida através do método implementado.

As simulações de escoamentos sobre o degrau para diferentes números de Reynolds também apresentaram resultados compatíveis com as referências numéricas e experimentais consultadas. Porém, os problemas encontrados nas simulações do escoamento sobre o degrau, que impuseram uma redução no passo de tempo de integração à medida que aumentou-se o número de Reynolds, demonstraram a inadequação do esquema empregado no programa tridimensional para escoamentos com elevados números de Reynolds. Esta restrição do passo de tempo conduziu a tempos de processamento que inviabilizaram, em virtude de excederem os recursos computacionais e prazos disponíveis, a aplicação dos sistemas desenvolvidos para problemas mais complexos.

Observe-se que este fato não ocorreu nas simulações com o código bidimensional. A principal diferença entre os dois esquemas está no emprego de funções de interpolação linear para para a pressão e velocidades, no código bidimensional, e função de interpolação linear para velocidades e constante no elemento para a pressão, no código tridimensional. Considere-se ainda que os resultados mais perturbados pelo emprego do passo de tempo de integração elevado, com relação ao passo de tempo requerido para a simulação, foi o campo de pressões. Estas observações demonstram ser necessário reformular o código para resolver esta inadequação. O caminho proposto é empregar funções de igual ordem, lineares, para pressão e velocidades no esquema tridimensional. Usualmente, nas simulações de escoamentos incompressíveis via elementos finitos, emprega-se funções de interpolação de menor ordem para a pressão, com relação às funções de velocidades. Este procedimento não é necessário quando se modela o problema através das equações de escoamentos quase incompressíveis, como foi observado por Kawahara e Hirano, 1983 e utilizado em Petry, 1993.

O objetivo das alterações entre os esquemas para duas e três dimensões era exatamente reduzir o tempo de processamento, fator crítico para viabilizar a análise de escoamentos turbulentos, tridimensionais e transientes. Contudo, embora a metodologia adotada tenha conduzido a bons resultados das simulações, mostrou-se inadequada para o processamento de problemas com altos números de Reynolds, por exigir um intervalo de tempo de integração muito pequeno, resultando em tempos de processamento muito grandes.

Um ponto crítico no desenvolvimento do trabalho foi a dimensão do problema computacional, malhas com um grande número de elementos e muitos passos de tempo a serem processados. Esta característica limitou o andamento dos trabalhos. Outras sugestões para minimizar o tempo de processamento dos problemas são a inclusão de um esquema de intervalo de integração por sub-domínios.

Finalmente, destaca-se que este trabalho teve como principais contribuições o desenvolvimento de um estudo sobre a Simulação de Grandes Escalas, empregando o Método de Elementos Finitos, para análise de escoamentos turbulentos tridimensionais. Foram obtidos resultados coerentes com as referências experimentais e numéricas para escoamentos sobre o degrau e em cavidade forçada, com diferentes números de Reynolds. A aplicabilidade do esquema empregado foi analisada e sugestões de aprimoramento apresentadas. Foi proposta uma

125

nova metodologia para o processo de segunda filtragem do modelo dinâmico sub-malha, confirmando-se a correção dos resultados com custo computacional compatível.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Armaly, B.F., Durst, F., Pereira, J.C.F., Schönung, B., 1983. "Experimental and Theoretical Investigation of Backward-Facing Step Flow", **Journal of Fluid Mechanics**, v. 127, pp. 473-496.

Awruch, A.M., Petry, A.P., 1997. "Sobre a Análise de Escoamentos Viscosos e Incompressíveis Através do Método de Elementos Finitos Usando as Variáveis Primárias", Relatório de Pesquisa - RP 122/97, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil, 73 páginas.

Azevedo, R. L. 1999. "Análise de Problemas de Interação Fluido-Estrutura Usando o Método dos Elementos Finitos com um Acoplamento Monolítico". Tese de Doutorado. Programa de Pos-Graduacao em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS Brasil, Dezembro de 1999.

Bardina, J.; "Toward a General Turbulence Model", 1989. AIAA 20th Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference, p 1-10, Buffalo, NY, 12-14 junho, 1989.

Belytschko, T. Bindeman, L.P., 1993. "Assumed Strain Stabilization of Eight Node Hexaedral Element", **Comp. Meth. in Appl . Mech. and Engng.**,v105, p 225-260.

Blessmann, J., 1998. Aerodinâmica das construções 1990. Sagra, Porto Alegre.
Bobenrieth, R.F. M., 1994. "Large Eddy Simulation of Turbulent Flow in the
Bakward-Facing Step", Supercomp 94, Centro Nacional de Supercomputação, Porto Alegre.

Breuer, M., Rodi, W., 1994. "Large Eddy Simulation of Turbulent Flow through a Straight Square Duct and 180[°] Bend", **Direct and Large Eddy Simulation I**, p 273-285, P.R.Voke et al (eds.), Kluwer Academic Publishers, Netherlands.

Budega, G., Oñate, E, 1995. "Optimum Aerodynamic Shape Design Including Mesh Adaptativity", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 20, pp. 915-934.

Burgreen,G.W., Baysal, O., 1996. "Three-Dimensional Aerodynamic Shape Optimization Using Discrete Sensitvity Analysis", **AIAA Journal**, vol. 34, no. 9, pp. 1761 - 1770.

Carey, G.F., Oden, J.T., 1984. Finite Elements: Fluid Mechanics, In: Becker, E.B., Carey, G.F., Oden, J.T. Finite Elements, v.6 Englenwood Cliffs, N.J., Prentice-Hall.

Cedar, R.D., Stow, P., 1985. "A Compatible Mixed Design and Analysis Finite Element Method for the Design of Turbomachinery Blades", International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 5, pp. 331-345.

Choi, D., Merkle, C. L., 1985. "Applications of Time Iterative Schemes to Incompressible Flow". AIAA Journal, V.23, pp. 1518-1524,

Clark, R.A.; Ferziger, J.H.; Reynolds, W.C., 1979. "Evaluation of Sub-Grid Scale Turbulence Models Using an Accurately Simulated Turbulent Flow", **Journal of Fluid Mechanics**, V 91, n1, p 1-16.

Codina, R., 1998. "Comparison of Some Finite Element Methods for Solving the Diffusion-Convection-Reaction Equation". Comput. Methods Appl . Mech. Engrg. ,v156, p 185-210.

Cosentino, G.B., Holst, T.L., 1986. "Numerical Optimization Design of Advanced Transonic Wing Configurations", **Journal of Aircraft**, vol. 23, no. 3, pp. 192-199.

Craig, K. J., De Kock, D. J., Syman, J. A., 1999. "Using CFD and Mathematical Optimization to Investigate Air Pollution Due to Stacks. Int. J. Numer. Meth. in Engng., V. 44, pp 551-565.

Denaro, F. M., 1996. "Towards a new Model-Free Simulation of High-Reynolds-Flows: Local Average Direct Numerical Simulation". Int. J. Num. Meth. Fluids., v. 23, pp. 123-142.

Donea, J, 1984. "A Taylor-Galerkin Method for Convective Transport Problems", International Journal for Numerical Methods in Engineering, v 20, pp 101-119.

Engelmam, M.; Sani, R. L.; Gresho, P. M., Bercovier, M., 1982. "Consistent vs. Reduced Integration Penalty Methods for Incompressible Media Using General Old and New Elements". Int. J. Numer. Methods in Fluids, V. 2, pp 25-42.

Ferziger, J.H.,1993. "Simulation of complex turbulent flow: recent advances and prospects in wind engineering", Journall of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, v.46 & 47, p.195-212, Elsiever.

Findikakis, A.N.; Street, R.L., 1982. "Mathematical Description of Turbulent Flows", **Journal of Hydraulics Division**, ASCE, V108, No.HY8, paper 17265, p887-903.

Fox, R.W., McDonald.A.T., 1995 **Introdução à Mecânica dos Fluidos**, 4^ª edição, Editora Guanabara Koogan Ltda., Rio de Janeiro, Brasil.

Franca, L., Frey, S. L., 1992. "Stabilized Finite Element Methods: II. The Incompressible Navier-Stokes Equations". **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, v. 99, pp. 209-233.

Franca, L., Frey, S. L., Madureira, A. L., 1994. "Two- and Three-Dimensional Simulations of the Incompressible Navier-Stokes Equations Based on Stabilized Method",

Proceedings of the Second European Computatonal Fluid Dynamics Conference, 5-8 September 1994, Stuttgart, Germany. pp. 121-128.

Franca, L., Hughes, T. J. R., 1993. "Convergence Analyses of Galerkin Least-Squares Methods for Symmetric Advective-Diffusive Forms of the Stokes and Incompressible Navier-Stokes Equations". **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, v. 105, pp. 285-298.

Germano, M. Piomelli, U., Moin, P. CabotW.H., 1991. "A dynamic sub-grid-scale eddy viscosity model", **Phys.Fluids** A3 (7), 1760-1765.

Ghia, U., Ghia, K. N., Shin, C. T., 1982. "High-*Re* Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multi-Grid". J. Comput. Phys., v. 48, pp. 387-411.

González, L.A.S., 1993. "Análise de Escoamentos de Fluidos Quaseincompressíveis e de Vibrações Induzidas em Objetos Imersos", Dissertação de Mestrado, Curso de Pós-graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS Brasil, julho de 1993.

Gresho,P.M., Chan,S.T.,Lee,R.L., Upson,G.D., 1984. "A Modified Finite Element Method for Solving the Time Dependent, Incompressible Navier-Stokes Euquations". PartI: Theory.", International Journal for Numerical Methods in Fluids, V.4, 557-598.

Grötzbach, G., 1987. "Direct numerical and large eddy simulation of turbulent channel flows", Encyclopedia of Fluid Mechanics, vol 6, Gulf, Houston, pp. 1337-1391.

Gunzburger, M.D., 1989. "Finite Element Methods for Viscous Incompressible Flows - A Guide to Theory, Practice and Algorithms", Academic Presss, Inc.

Gunzburger, M.D., Hou, L.S., Svobodny, 1993a. "Optimal Control and Optimization of Viscous, Incompressible Flows", **Incompressible Computational Fluid Dynamics**, edited by Gunzburger, M.D e Nicolaides, R.A., Cambridge University Press.

Gunzburger, M.D., Hou, L.S., Svobodny, 1993b. "The Approximation of Boundary Control Problems for Fluid Flows with an Application to Control by Heating and Cooling", **Computers Fluids,** vol 22, no. 2/3, pp 239-251.

Haftka, R.T., Gürdal, Z., Kamat, M.P., 1990. Elements of Structural Optimization, Second Edition, Kluwer Academic Publishers.

Hatamaka, K., Kawahara, M., 1995. "A Numerical Study of Vortex Shedding Around a Heat Cooled Circular Cylinder by the Three Step Taylor-Galerkin Method". International Journal for Numerical Methods in Fluids, V.21, pp, 857-867. Hawken, D. M.; Tamaddom-Jahromi, H. R.; Towmsend, P., Webster, M. F, 1990. "A

Taylor-Galerkin-Based Algorithm for Viscous Incompressible Flow". International Journal for Numerical Methods in Fluids, V.10, pp. 327-351.

Hinze, J.O., 1975. Turbulence, McGraw-Hill, New York, 2nd ed.

Hou, G.J-W., Taylor III, A.C., Korivi, 1994, "Discrete Shape Sensitivity Equations for Aerodynamic Problems", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol 37, pp 2251-2266.

Hughes, T. J. R., Tezduyar, T. E. "Finite Element Method for First Order Hyperbolic Systems With Particular Enphasis in the Compressible Euler Equations". **Comp. Meth. in Appl**. **Mech, and Engng.**, V. 45, pp 217-284, 1984.

Hughes, T. J. R., 1987. The Finite Element Method, Prentice-Hall, New Jersey.

Huyakorn, P. S; Taylor, C.; Lee, R. L., Gresho, P. M.,1978. "A Comparison of Various Mixed-Interpolations Finite Elements in the Velocity-Pressure Formulation of the Navier-Stokes Equations". **Computer & Fluids**, V.6, pp 25-35.

Jamenson, A., 1988. "Aerodynamic Design via Control Theory", NASA CR-181749, also ICASE Report No. 88-64, NASA Langley Research Center, Hampton, VA.

Jansen, K. E., 1999. "A Stabilized Finite Element Method for Computing Turbulence". Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., v. 174, pp. 299-317.

Kaiktsis, L., Karniadakis, G., Orzag, S.A., 1991. "Onset of three-dimensionality, equilibria, and early transition in flow over a Backward-Facing Step", Journal of Fluid Mechanics, v. 231, pp. 501-528.

Kawahara, M., Hirano, H.,1983. "A Finite Element Method for High Reynolds Number Viscous Fluid Flow Using Two Step Explicit Scheme". International Journal for Numerical Methods in Fluids, V.3, pp.137-163.

Kawahara, M., Shimada, Y., 1994. "Gradient Method of Optimal Control Applied to the Operation of a Dam Water Gater", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 19, pp. 463-477.

Kawamoto,S. Kawabata,S. E Tanahashi,T. , 1993. "Numerical Analysy of Wind around Building Using High-Speed GSMAC-FEM - Validation of Differential Stree Model"; **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics,** v46 & 47, p 115-120, Elsiever, 1993.

Kessler, R., K.S. Yang, 1996. "Direct Numerical Simulation of Turbulent Obstacle Flow", **Second ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Eddy Simulation**, proceedings, v 1, p C1.1, Grenoble, France, septembre, 1996.
Kim, W., Menon, S., 1999. "An Unsteady Incompressible Navier-Stokes Solver for Large Eddy Simulation of Turbulent Flows". **Int. J. Numer. Meth. Fluids**, v. 31, pp. 983-1017.

Lange, C. F., Hancock, R. E. W., Samuel, J., Finlay, W. H. 2001 "In vitro aerosol delivery and regional airway surface liquid concentration of a liposomal cationic peptide", J. Pharm. Sci. 90:1647-1657

Launder, B.E. E Spalding, D.B., 1972. "Lectures in Mathematical Models of Turbulence", Academic Press, Londres, 1972.

Lee, S. 1998."Numerical Study of Wake Structures Behind a Square Cylinder at High Reynolds Number.", **Wind and Structures**, v1, no. 2 127-144.

Leiss, E.L., 1990. "Vector and Parallel Computing: a Practical Introdution", Notas do Curso, Centro Nacional de Supercomputação, UFRGS, Brasil.

Leonard, A., 1974. "Energy Cascade in Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows", Advances in Geophysics, 18A, p.237-248.

Leschziner, M.A., 1993. "Computational modelling of complex turbulent flow -

expectations, reality and prospects"- Journal of Wind Engineering and Industrial

Aerodynamics, v46 & 47, p 37-51, Elsiever, 1993.

Lesieur, M. Comte, P., Métais, O.,1995. "Numerical simulations of coherent vortices in turbulence", **ASME - Appl Mech Rev**, v 48, n 4.

Lesieur, M., 1999. "Spectral Large-Eddy Simulations and Vortex Dynamics in Turbulence". JSME International Journal, Series B, v. 42, n. 2, pp. 143-153.

Lilly, D.K., 1992. "A proposed moddification of the Germano subgrid-scale closure method", **Phys.Fluids A4** (3), 633-635.

Lorence, C.B., Hall, K.C., 1996. "Sensitivity Analysis of the Aeroacoustic Response of Turbomachinery Blade Rows", **AIAA Journal**, vol. 34, no. 8, pp. 1545-1554.

Maliska, C.R, 1995. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** Livro Técnico Científico Editora, Rio de Janeiro.

Markatos, N.C., 1986. "The Mathematical Modelling of Turbulent Flows", Applied Math. Modelling, v.10, p.190- 220.

Marvin, J.G., Coakley, T.J.; 1990. **"Turbulence Modeling for Hypersonic Flows**", Ames Research Center, Moffet Field, California, junho 1990.

Menon, S., Yeung, P-K., Kim, W-W, 1996. "Effect on Subgrid Models on the Computed Interscale Energy Transfer in Isotropic Turbulence", **Computers and Fluids**, v. 25, n. 2, p. 165-180. Mohammadi, B., 1997. "A new optimal shape design procedure for inviscid and viscous turbulent flows", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v 25, pp 183-203.

Murakami,S., 1993. "Comparison of Various Turbulence Models Applied to a Bluff Body", **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v46 & 47, p.21-36, Elsevier Science Publishers.

Orozco, C.E., Ghattas, O.N., 1996. "Infeasible Path Optimal Design Methods with Applications to Aerodynamic Shape Optimization", **AIAA Journal**, vol. 34, no. 2, pp 217-224.

Ortega, M.A., Azevedo, J.L.F., 1995. "Large Eddy Simulation of an Open Flow Along a Backward-Facing Step", Fourth Pan American Congress of App.Mech.-PACAM IV, Buenos Aires, Argentina.

Oshima, M., Kobayashi, T., Taniguchi, N., Tsubokura, M., 1996. "Development of Filtering Operation for Dynamic SGS Model Using Finite Element Method". The Second ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Eddy Simulation. Septembre 16-19, 1996. Grenoble, Franca.

Padilla, E. L. M., Silveira Neto, A., 2000. "Implementação Numérica da Modelagem Dinâmica da Turbulência em Coordenadas Cilíndricas". **IV Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional.** 01-03 de Maio de 2000, Uberlândia, MG. pp. 573-580.

Patankar, S.V., 1980. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Washington, Hemisphere.

Petry, A.P., 1993. "Análise Numérica da Interação Fluido-Estrutura através do Método de Elementos Finitos", Dissertação de Mestrado, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 1993.

Petry, A.P., 1994. "Vetorização de um Programa de Análise Numérica da Interação Fluido-Estrutura", Relatório de Pesquisa, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil, 1994.

Petry, A.P., Awruch, A.M., 1992. "Solução das Equações de Navier-Stokes Transientes Usando um Método Explícito", **ENIEF 92**, Anais, pp. 214-222, San Carlos de Bariloche, Argentina.

Petry, A.P., Awruch, A.M., 1995. **Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos**, Relatório de Pesquisa - RP 118/95, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil., 53 páginas.

Petry, A.P., Awruch, A.M., 1997a.. Estudo Sobre Dinâmica dos Fluidos Computacional na Análise e Projeto de Turbomáquinas, Caderno Técnico, Departamento de 132 Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil, , 57 páginas.

Petry, A.P., Awruch, A.M., 1997b. "Simulação de Escoamentos Turbulentos pelo Método de Elementos Finitos Através da Simulação de Grandes Vórtices", **ENIEF 97**, Anais, San Carlos de Bariloche, Argentina.

Petry, A.P., Grohes, A.G., Awruch, A.M., 1994. Vetorização de um Programa de Análise Numérica da Interação Fluido-Estrutura, Relatório de Pesquisa - RP 113/94, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil, 61 páginas.

Pirani, M. J., Manzanares Filho, N., Silveira Neto, A., 2000. "Escoamento Turbulento em Grades de Placas Planas Utilizando o Metodo dos Volumes Finitos e Simulacao de Grandes Escalas". IV Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional. 01-03 de Maio de 2000, Uberlândia, MG. pp. 70-77.

Prasad. A. K., Koseff, J. R., 1989. "Reynolds Number and End-wall Effects on a Liddriven Cavity Flow". **Phys. Fluids A**, v. 1, n. 2, pp 208-218.

Reddy, J.N., Gartling, D.K.. 1994. The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics, CRC Press.

Reuther, J., Alonso, J.J., Rimlinger, M.J., Jamenson, A., 1999, "Aerodynamic shape optimization of supersonic aircraft configurations via adjoint formulation on distributed memmory parallel computers", **Computers and Fluids**, 28: 675-700.

Rocha, M.M., Souza, A.M.L. 2000. "Comparação das respostas longitudinais ao vento de uma torre de concreto armado segundo as normas brasileira e canadense", **Jornadas Sudamericanas de Ingenieria Estructural** (29.: 2000: Punta del Este, UY). Montevideo : Univ. de la Republica/Fac. de Ingenieria.

Rodi, W., 1980. **Turbulence Model and their Application in Hidraulics - A State of Art Review -** Institute für Hydromechanik and Sonderforschungsbereich 80, University of Karlsruhe, Karlsruhe, Federal Republic of Germany, 1980.

Rogallo, R.S.; Moin, P., 1984. Numerical Simulation of Turbulent Flows, Ann. Rev. Fluid Mechanics, v 16 p.99-137.

Sadhu, Debi Pada. Unsteady aerodynamic loads of vertical axis wind turbine. In: **Encontro Nacional de Ciências Térmicas** (3. : 1990 : Itapema, Sc). Anais. Florianópolis : UFSC, 1990. vol. 1, p. 227-232.

Sagaut, P. Le, T. H., 1996. "Some Investigations on the Sensitivity of Large Eddy Simulation". **The Second ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Eddy Simulation**. Septembre 16-19, 1996. Grenoble, Franca.

Sani, R. L. ; Gresho, P. M ; Lee R. L., Griffiths, D. F., 1981a. "The Cause (?) and Cure of the Spurions Pressure Generated by Certain FEM Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations: Part 1." International Journal for Numerical Methods in Fluids, V.1, pp 17-43.

Sani, R. L.; Gresho, P. M; Griffiths, D. F., Engelman, M., 1984b. "The Cause (!) and Cure of the Spurious Pressure Generated by Certain FEM Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations: Part 2". **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, V.1, pp 171-204.

Schlichting, H., 1968. "Boundary Layer Theory", McGraw-Hill, New York, 1968.

Schumann, U.; Grötzbach, G. E Kleiser, L. 1980. "Direct Numerical Simulation of Turbulence", in Prediction Methods for Turbulent Flows, Hemisphere, Washington, pp. 123-258, 1980.

Shultz, S.L., 1997. "**Elementos Finitos Tri-Lineares com Integração Reduzida e Controle de Modos Espúrios na Análise Linear de Placas e Cascas**", Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Silveira Neto, A., Grand, D., Lesieur, M., 1991. "Simulation Numérique bidimensionalle d'un écolement turbulent stratifié derrière une marche", **Int.J. Heat Mass Transfer**, v. 34, n.8, pp. 1999-2011.

Silveira Neto, A., Grand, D., Métais, O., Lesieur, M., 1993. "A Numerical Investigation of Coherent Vortices in Turbulence Behind a Backward-Facing Step", Journal of Fluid Mechanics, v. 256, pp. 1-25.

Sohn, J. L., 1988. "Evaluation of FIDAP on Some Classical Laminar and Turbulent Benchmarks". Int. J. Numer. Meth. Fluids, v. 8, pp. 1469-1490.

Stow, P., 1989. "The Development of Advanced Computational Methods for Turbomachinery Blade Design", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 9, pp. 921-941.

Teixeira, P.R.F., Santos, M.A.V., Azevedo, R.L., Awruch, A.M., 1995. "Vetorização de um Programa para Simulação Numérica de Escoamentos Compressíveis", **Boletim da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional**, pp 72-96, v 5, n2, série II.

Tenekes, H.; Lumley, J.L., 1972. A First Course in Turbulence, MIT Press.

Tezduyar, T.E., Park Y.J., 1986. "Discontuinity-Capturing Finite Element Formulations for Nonlinear-Diffusion-Reaction Equations". **Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engng.**, V. 59, pp. 307-325

Vanderplaats, G.N., Moses, F., 1973. "Structural Optimization by Methods of Feasible Directions", **Computers & Structures**, vol. 3, no.4, pp. 739-755.

Verstappen, R.W.C.P., Veldman, A.E.P., 1997. Numerical; "Methods for DNS of Flow Past a Square Cylinder", **Eleven Symposium on Turbulent Shear Flows**, v 3, pp P3-83, Grenoble, France.

Wang, Z-X., Tortorelli, D.A. Dantzig, J.A., 1996. "Sensitivity Analysis and Optimization of Coupled Thermal and Flow Problems with Applications to Contraction Design", **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 23, pp. 991-1020.

White, F.M., 1974. "Viscous Fluid Flow", McGraw-Hill, New York.

Williams, P.T., Baker, A.J., 1997. "Numerical Simulations of Laminar Flow over a 3D Backward-Facing Step", International Journal for Numerical Methods in Fluids, v.24, pp. 1159-1183.

Zang, Y., Street, R. L., Koseff, J. R., 1993. "A Dynamic Mixed Subgrid-Scale Model and its Application to Turbulent Recirculating Flows". **Phys. Fluids A**, v. 5, n. 12, pp. 3186-3196.

Zang, Y., Street, R. L., Koseff, J. R., 1994. "A Non-staggered Grid, Fractional Step Method for Time-Dependent Incompressible Navier-Stokes Equations in Curvilinear Coordinates". J. of Comput. Physics., v. 114, pp. 18-33.

Zienkiewcz, O. C. ; Taylor, R. L., Too, J. M. "Reduced Integration Technique in General Analysis of Plates and Shells". **Int. J. of Num. Meth. Engng.**, V.3, pp 275, 1971.