

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

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS
UTILIZANDO SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS
E ADAPTAÇÃO DE MALHAS

Tales Luiz Popiolek

Tese apresentada ao corpo docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia.

Porto Alegre – RS
Setembro, 2005

Esta Tese de Doutorado foi julgada adequada para a obtenção do título de DOUTOR EM ENGENHARIA CIVIL e aprovada em sua forma final pelo orientador e pelo Programa de Pós-Graduação.

Prof. Armando Miguel Awruch
Orientador

Prof. Fernando Schnaid
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil

BANCA EXAMINADORA

- Prof. Armando Miguel Awruch
D.Sc., COPPE/UFRJ
- Prof. Aristeu da Silveira Neto (UFU/MG)
Ph.D., INPG, França
- Prof. Jorge Hugo Sivestrini (PUC/RS)
Ph.D., INPG, França
- Prof^a Maria Angela Vaz dos Santos (PUC/RS)
Dra., PPGEC/UFRGS
- Prof. Sérgio Luiz Frey (PROMEC/UFRGS)
Dr., PUC/RJ

Pense, Pesquise

Enquanto

Não

Souber

Executar.

Dantas et al.

Dedico este trabalho, com todo o amor e carinho, aos meus filhos, pela compreensão que sempre tiveram comigo e pelos seus comportamento e dedicação.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Armando Miguel Awruch, pela atenciosa orientação, pela dedicação, por dividir seus conhecimentos, pelo incentivo e pelo apoio para escrever cinco artigos (três em eventos e dois em periódicos) e a presente tese; enfim, agradeço pela amizade e a participação no grupo de pesquisa.

Ao Prof. Paulo Roberto de Freitas Teixeira, por gentilmente ceder parte do código computacional, por prestar esclarecimentos sobre o funcionamento do mesmo e pelas longas discussões ligadas ao tema desenvolvido.

À Fundação Universidade Federal de Rio Grande – FURG, especialmente aos membros do Colegiado do Departamento de Matemática, por ter me liberado das atividades de docente e aos professores que me substituíram nas atividades, durante o tempo de afastamento.

À Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, ao Departamento de Engenharia Mecânica, ao Departamento de Engenharia Civil, ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil e aos professores, pelo acolhimento que me foi proporcionado.

Ao Centro Nacional de Supercomputação – CESUP, que viabilizou o uso do CRAY T90 e pelo apoio técnico de seus servidores.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, pelo apoio financeiro.

À Vera, ao Junior, à Juliana e ao Pedro, pelo amor, carinho, amizade e compreensão que sempre tiveram comigo, principalmente durante a realização da tese de doutorado, que me fez ausente, mesmo estando aos seus lados.

Agradeço a todos os colegas e amigos que, de certa forma, anonimamente, contribuíram no incentivo pessoal e pela convivência do dia a dia.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE TABELAS	xi
LISTA DE SÍMBOLOS	xii
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvi
1 INTRODUÇÃO	01
1.1 DA TURBULÊNCIA	02
1.2 DA ADAPTAÇÃO DE MALHAS	11
1.3 OBJETIVOS, METODOLOGIA E ORGANIZAÇÃO	17
2 FORMULAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO	21
2.1 EQUAÇÕES PARA SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS (LES)	23
2.1.1 Modelo de Smagorinsky	26
2.1.2 Modelo dinâmico	28
2.2 EQUAÇÕES PARA SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS DA TURBULÊNCIA COM MODELOS DE VISCOSIDADE TURBULENTA	32
3 ESTRATÉGIA DE ADAPTAÇÃO AUTOMÁTICA DE MALHAS	34
3.1 INDICADORES DE ERRO	34
3.2 CRITÉRIO DE ADAPTAÇÃO DE MALHAS	36
3.3 REFINAMENTO DE ELEMENTOS	40
3.4 DESREFINAMENTO DE ELEMENTOS	49
3.5 REALOCAÇÃO NODAL	49

3.6 ESTRUTURA DE DADOS	54
3.7 ALGORITMO PARA ADAPTAÇÃO AUTOMÁTICA DE MALHAS	58
4 ALGORITMO NUMÉRICO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES	60
5 APLICAÇÕES NUMÉRICAS	66
5.1 ESCOAMENTO TRIDIMENSIONAL NUMA CAVIDADE	66
5.2 ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL NUM CANAL COM DEGRAU	75
5.3 ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL NUM CANAL COM DEGRAU	89
5.4 ESCOAMENTO AO REDOR DE UMA ESFERA	93
5.5 ESCOAMENTO SOBRE UM CILINDRO	104
5.6 TRANSPORTE DE POLUENTE NUM SALTO NA VARIÁVEL ESCALAR.....	121
5.7 DISPERSÃO DE POLUENTE NUM AMBIENTE URBANO	129
6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	137
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	141

LISTA DE FIGURAS

3.2.1: Função densidade de distribuições normais.	38
3.3.1: Refinamento regular do tetraedro.	40
3.3.2: Refinamento regular, subdivisão dos quatro primeiros elementos filhos.	41
3.3.3: Subdivisão do octaedro central de um refinamento regular.	41
3.3.4: Refinamentos irregulares: (a) quando uma aresta é subdividida; (b) quando duas arestas de uma mesma face são subdivididas; e (c) quando duas arestas opostas são subdivididas.	42
3.3.5: Refinamentos irregulares: (a) quando as três arestas de uma mesma face são subdivididas; (b) quando as três arestas subdivididas têm um ponto em comum; e (c) demais casos, com três arestas subdivididas.	43
3.3.6: Elemento original e tipos de refinamentos utilizados no esquema de adaptação de malhas.	44
3.3.7: Tetraedro inicial.	47
3.3.8: Malhas refinadas regularmente, respectivamente, com um, dois e três níveis de refinamentos.	47
3.3.9: Malhas refinadas, respectivamente, com um, dois e três níveis de refinamentos. ...	48
3.5.1: Malha inicial de uma esfera.	52
3.5.2: Os três níveis de refinamentos sucessivos da malha de uma esfera, respectivamente, MR1, MR2 e MR3.	52
3.5.3: Os três níveis de refinamentos sucessivos da malha de uma esfera, respectivamente, MRS1, MRS2 e MRS3.	53
3.6.1: Definição das entidades da estrutura de dados: elementos, faces, arestas e nós.	55
5.1.1: Discretização do domínio computacional.	67
5.1.2: Campo de velocidade, $Re = 1000$	69
5.1.3: Linhas de corrente, $Re = 1000$	69
5.1.4: Isolinhas de pressão, $Re = 1000$	70
5.1.5: Perfil das componentes de velocidade média nas linhas centrais do plano de simetria: (a) linhas horizontal e (b) linha vertical.	70

5.1.6: Linha de corrente, ponto inicial da partícula (0,63; 0,60; 0,46), $Re = 1000$	71
5.1.7: Linha de corrente, ponto inicial da partícula (0,6; 0,5; 0,005), $Re = 1000$	72
5.1.8: Linha de corrente, ponto final da partícula (0,6; 0,5; 0,005), $Re = 1000$	72
5.1.9: Campo de velocidade no vórtice secundário: a) instante de baixas oscilações. b) instante de altas oscilações.	73
5.1.10: Velocidade média: a) vertical e horizontal. Resultados: ___ presente trabalho e □ dados experimentais de Zang et al.	74
5.1.11: Intensidade de turbulência: a) vertical e b) horizontal. Resultados: ___ presente trabalho e ◇ dados experimentais de Zang et al.	74
5.1.12: Tensões de Reynolds: a) vertical e b) horizontal. Resultados: ___ presente trabalho e △ dados experimentais de Zang et al.	75
5.2.1: Domínio computacional do problema.	76
5.2.2: Detalhes da discretização do domínio computacional, 3D.	77
5.2.3: Comprimento de recolamento do vórtice principal, 2D.	79
5.2.4: Comprimento de recolamento do vórtice principal, 3D.	79
5.2.5: Comprimento de recolamento do vórtice principal, 2D e 3D.	80
5.2.6: Linha de corrente, respectivamente, para o Reynolds 100, 250, 400, 600, 800 e 1000.	81
5.2.7: Isolinhas de pressão, respectivamente, para Reynolds 100, 250, 400, 600, 800 e 1000.	82
5.2.8: Isolinhas de temperatura para Reynolds, respectivamente, 600, 800 e 1000.	83
5.2.9: Linhas de corrente, modelo dinâmico para Reynolds 600, 800 e 1000.	83
5.2.10: Linhas de corrente, modelo dinâmico para Reynolds 100.	85
5.2.11: Linhas de corrente, modelo dinâmico para Reynolds 800.	85
5.2.12: Isolinhas do campo de temperatura, modelo dinâmico para Reynolds 800.	86
5.2.13: Solução para o regime turbulento – Reynolds 10000 e tempo 150 s, respectivamente, campo de velocidade, linhas de corrente, vorticidade, pressão e temperatura.	87
5.2.14: Solução para o regime turbulento – Reynolds 10000, respectivamente, campo de velocidades médias, linhas de corrente e campo de pressões médias.	88
5.2.15: Solução para o regime turbulento – Reynolds 40000 e tempo 150 s,	

respectivamente, campo de velocidade, linhas de corrente, campos de vorticidade, pressão e temperatura.	89
5.2.16: Solução para o regime turbulento – Reynolds 40000, respectivamente, campo de velocidades médias, linhas de corrente e campo de pressão médias.	88
5.3.1: Detalhes da malha inicial, no plano de simetria.	90
5.3.2: Linhas de corrente obtidas através da malha grosseira.	91
5.3.3: Detalhes da malha refinada, no plano de simetria.	91
5.3.4: Detalhes da malha refinada e suavizada.	92
5.3.5: Linhas de corrente, obtidas através da malha refinada e suavizada.	92
5.4.1: Malha inicial do plano de simetria xy	94
5.4.2: Detalhes da malha inicial na superfície da esfera e nos planos de simetria xy e xz	95
5.4.3: Contribuição dos refinamentos devido a baixas velocidades, plano de simetria xy	95
5.4.4: Contribuição dos refinamentos devido aos gradientes de pressão, plano de simetria xy	96
5.4.5: Contribuição dos refinamentos devido aos gradientes de concentração, plano de simetria xy	95
5.4.6: Contribuição dos refinamentos devido aos gradientes da velocidade, plano de simetria xy	96
5.4.7: Contribuição dos refinamentos devido à mudança de direção da velocidade, plano de simetria xy	96
5.4.8: Malha com a contribuição de todos os indicadores de erro, plano de simetria xy . .	97
5.4.9: Detalhes da malha refinada com a contribuição de todos os indicadores de erro. .	
5.4.10: Detalhes da malha com dois níveis de refinamentos.	98
5.4.11: Detalhes da malha com três níveis de refinamentos.	98
5.4.12: Detalhes das linhas de corrente no plano de simetria xy	99
5.4.13: Detalhes do campo de concentração no plano de simetria xy	100
5.4.14: Detalhes da vorticidade no plano de simetria xy	100
5.4.15: Detalhes do campo de pressão no plano de simetria xy	100

5.4.16: Detalhes das linhas de corrente em 3D.	101
5.4.17: Detalhes do campo de concentração em 3D.	101
5.4.18: Detalhes do campo de vorticidade em 3D.	102
5.4.19: Detalhes do campo de pressão em 3D.	102
5.4.20: Representação gráfica do coeficiente de pressão.	102
5.5.1: Domínio computacional e condições de contorno.	104
5.5.2: Discretização do domínio computacional.	105
5.5.3: Malha refinada e suavizada, contendo 9215 nós e 30433 elementos.	108
5.5.4: Detalhes da malha refinada e suavizada.	108
5.5.5: Linhas de corrente, $Re = 40$	108
5.5.6: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro aquecido, para $Re = 100$ e $Ri = 0,25$: (a) linhas de corrente e (b) linha isotérmicas.	109
5.5.7: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro aquecido para $Re = 100$ e $Ri = 0,5$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.	109
5.5.8: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro aquecido para $Re = 100$ e $Ri = 1,0$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.	109
5.5.9: Malhas refinadas usando o indicador de erro dos gradientes de temperatura. Seqüência (a), (b), (c), (d) e (e) são separadas por um intervalo de tempo de 1,0 segundo.	112
5.5.10: Isotermas calculadas com as malhas mostradas na Figura 5.5.9.	113
5.5.11: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro resfriado para $Re = 100$ e $Ri = -1,0$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.	114
5.5.12: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro resfriado para $Re = 100$ e $Ri = -0,5$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.	115
5.5.13: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro resfriado para $Re = 100$ e $Ri = 0,0$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.	115
5.5.14: Malha no plano xy	118
5.5.15: Detalhes da malha junto à superfície do cilindro, em 3D.	118
5.5.16: Isosuperfícies de vorticidade, $w = 0,56$, (a) detalhes de topo e (b) detalhes em perspectiva.	119
5.5.17: Isosuperfícies de vorticidade, $w = 0,80$, (a) detalhes de topo e	

(b) detalhes em perspectiva.	120
5.5.18: Isosuperfícies de concentração, $C = 0,12$, (a) detalhes de topo e (b) detalhes em perspectiva.	120
5.6.1: Domínio computacional do problema e condições de contorno.	121
5.6.2: Malha inicial, plano xy	122
5.6.3: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $q = 0^\circ$ e $Pe = 50$	123
5.6.4: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $q = 26,57^\circ$ e $Pe = 50$	123
5.6.5: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$	124
5.6.6: Isolinhas de concentração do poluente, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$	124
5.6.7: Malha final utilizada para obter a solução em regime permanente, caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$	125
5.6.8: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$	125
5.6.9: Isolinhas de concentração do poluente, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$	126
5.6.10: Malha refinada utilizada para obter a solução em regime permanente, tempo $t = 4,16$ s, caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 20$	126
5.6.11: As soluções transientes, ao longo do tempo, o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 20$: (a) malha refinada e (b) isolinhas de concentração do poluente.	128
5.7.1: Domínio computacional de simulação do ambiente urbano.	132
5.7.2: Malha refinada e suavizada: (a) domínio computacional completo e (b) detalhes junto à cavidade da rua e às duas construções.	133
5.7.3: Isolinhas do campo de concentração do poluente adimensionalizada.	133
5.7.4: Concentração do poluente na parede da construção à montante da fonte.	134
5.7.5: Concentração do poluente na parede da construção à jusante da fonte.	135
5.7.6: Concentração do poluente na parte superior da construção à jusante da rua.	135
5.7.7: Concentração do poluente no eixo horizontal central da cavidade da rua.	135
5.7.8: Concentração do poluente no eixo vertical central da cavidade da rua.	136
5.7.9: Concentração do poluente junto ao solo da cavidade da rua.	136

LISTA DE TABELAS

3.3.1: Qualidade dos elementos e das faces de contorno, referentes aos tipos de refinamentos utilizados nas adaptações de malhas.	45
3.3.2: Qualidade geométrica dos elementos das malhas refinadas regularmente.	48
3.3.3: Qualidade geométrica dos elementos das malhas refinadas regularmente e irregularmente.	48
3.3.4: Qualidade geométrica dos elementos da malha MRI2.	48
3.5.1: Qualidade média dos elementos das malhas e das faces dos elementos da superfície da esfera.	53
5.4.1: Qualidade geométrica média dos elementos da malha e das faces dos elementos de contorno.	99
5.4.2: Comparação de alguns parâmetros do escoamento sobre uma esfera.	103
5.5.1: Número de Strouhal, para $Re = 1000$	116

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Áreas da face de um elemento tetraédrico
c	Velocidade de propagação do som
C	Concentração de poluente
C_{ij}	Tensões cruzadas
C_d	Coefficiente dinâmico
C_s	Constante de Smagorinsky
D_t	Difusividade turbulenta
D_{ij}	Coefficiente de condutividade ou dispersão
e	Escala dissipativa de energia
E	Escala de energia
f_i	Função peso da entidade i
$f(?_i)$	Função densidade de distribuições normais
g	Aceleração da gravidade
g_i	Representa sub-áreas ou sub-volumes de uma entidade
Gr	Número de Grashof
h	Dimensão característica de um elemento
K	Concentração adimensionalizada
L	Comprimento característico
L_{ij}	Tensões de Leonard
\mathbf{M}	Matriz massa
M_{ij}	Tensor do modelo dinâmico
\mathbf{N}	Função de interpolação linear
\mathbf{n}_j	Vetor unitário normal ao contorno
p	Pressão
\mathbf{P}_E	Função de interpolação constante
Pe	Número de Peclet
Pr	Número de Prandtl
Pr_t	Número de Prandtl turbulento
$Q2D$	Qualidade geométrica das faces de um tetraedro

$Q3D$	Qualidade geométrica de um elemento tetraédrico
Re	Número de Reynolds
Ri	Número de Richardson
R_{ij}	Tensões de Reynolds
$ \bar{S} $	Módulo da taxa de deformação das grandes escalas
S_{ij}	Tensor da taxa de deformação das grandes escalas
Sc	Número de Schmidt
Sc_t	Número de Schmidt turbulento
St	Número de Strouhal
S_{u_i}	Termo fonte da equação da quantidade de movimento
S_f	Termo fonte da equação de quantidade escalar
t	Tempo
T	Temperatura
T^*	Temperatura adimensionalizada
T_w	Temperatura na parede
T_∞	Temperatura no infinito
T_{ij}	Tensor das tensões de escala sub-teste
u_i	Componentes do vetor velocidade
U_{ref}	Velocidade de referencia
U_i	Variável de conservação da equação de quantidade de movimento
\bar{u}_i	Velocidades filtradas
u_i'	Velocidades sub-malhas
U	Velocidade característica
ν	Escala dissipativa de velocidade
Vol	Volume de um elemento tetraédrico
V_i	Representação genérica de uma variável
x, y, z	Coordenadas cartesianas
x_i	Coordenadas espaciais
X_P	Coordenadas de um nó P
X_i	Coordenadas do centróide de uma entidade
w	Escala de vorticidade
W	Escala de vorticidade

$(\bar{\cdot})$	Representa o primeiro processo de filtragem
$\langle \bar{\cdot} \rangle$	Representa o segundo processo de filtragem
\mathbf{r}	Massa específica
\mathbf{f} ou \mathbf{j}	Quantidade escalar
\mathbf{q}_i	Indicador de erro
\mathbf{q}_{sd}	Desvio padrão dos indicadores de erro
\mathbf{a}	Difusividade térmica
\mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2	Parâmetros arbitrários
\mathbf{j}_i	Ângulo entre dois vetores de velocidade
\mathbf{b}	Fator de segurança
$\bar{\Delta}$	Largura do filtro a nível de malha
\mathbf{e}	Dissipação viscosa
\mathbf{h}	Escala dissipativa de comprimento
\mathbf{w}	Vorticidade
\mathbf{m}	Coefficiente de viscosidade dinâmica
\mathbf{m}_\dagger	Coefficiente de viscosidade turbulenta
\mathbf{n}	Coefficiente de viscosidade cinemática
\mathbf{l}	Coefficiente de viscosidade volumétrica
\mathbf{t}	Escala dissipativa de tempo
\mathbf{t}_{ij}	Tensor das tensões de escalas sub-malha
\mathbf{t}_{jf}	Tensor de fluxo de quantidade escalar
\mathbf{d}	Altura da camada limite
\mathbf{d}_{ij}	Delta de Kroenecker

RESUMO

No presente estudo, são apresentadas soluções numéricas de problemas de Engenharia, na área de Dinâmica dos Fluidos Computacional, envolvendo fluidos viscosos, em escoamentos incompressíveis, isotérmicos e não isotérmicos, em regime laminar e turbulento, podendo envolver transporte de massa. Os principais objetivos deste trabalho são a formulação e a aplicação de uma estratégia de adaptação automática de malhas e a inclusão de modelos de viscosidade turbulenta, integrados com um algoritmo utilizado para simular escoamentos de fluidos viscosos bi e tridimensionais, no contexto de malhas não estruturadas. O estudo é dirigido no sentido de aumentar o conhecimento a respeito das estruturas de escoamentos turbulentos e de estudar os efeitos físicos no transporte de quantidades escalares propiciando, através de técnicas de adaptação automática de malhas, a obtenção de soluções numéricas precisas a um custo computacional otimizado. As equações de conservação de massa, de balanço de quantidade de movimento e de quantidade escalar filtradas são utilizadas para simular as grandes escalas de escoamentos turbulentos e, para representar as escalas sub-malha, são utilizados dois modelos de viscosidade turbulenta: o modelo de Smagorinsky clássico e o modelo dinâmico. Para obter soluções numéricas com precisão, é desenvolvida e implementada uma estratégia de adaptação automática de malhas, a qual é realizada simultaneamente e interativamente com a obtenção da solução. O estudo do comportamento da solução numérica é fundamentado em indicadores de erro, com o propósito de mapear as regiões onde certos fenômenos físicos do escoamento ocorrem com maior intensidade e de aplicar nestas regiões um esquema de adaptação de malhas. A adaptação é constituída por processos de refinamento/desrefinamento e por um processo de suavização laplaciana. Os procedimentos para a implementação dos modelos de viscosidade turbulenta e a estratégia de adaptação automática de malhas são incorporados ao código computacional de elementos finitos tridimensionais, o qual utiliza elementos tetraédricos lineares. Aplicações de escoamentos de fluidos viscosos, incompressíveis, isotérmicos e não isotérmicos em regime laminar e turbulento são simuladas e os resultados são apresentados e comparados com os obtidos numérica ou experimentalmente por outros autores.

Palavras-chave: Elementos finitos; simulação de grandes escalas; adaptação de malhas.

ABSTRACT

Numerical solutions of engineering problems involving Computational Fluid Dynamics with viscous incompressible isothermal or non isothermal laminar and turbulent flows, including eventually mass transport, are presented in this work. Formulation and application of an automatic adaptive mesh strategy and an eddy viscosity model integrated to an algorithm to simulate viscous two and three-dimensional flows in the context of unstructured meshes are the main objectives of this work. Knowledge of turbulent flows structures, physical effects in the transport of scalar quantities and the development of numerical solutions with an optimized computational cost using automatic adaptive meshes are studied here. The filtered governing equations are used to simulate large turbulent scales and two models for the eddy viscosity, the classical Smagorinsky model and the dynamic model, are used to represent sub-grid scales. In order to obtain numerical solutions with optimized computational costs, an automatic adaptive mesh strategy, which is carried out simultaneously and interactively with the solution, was developed and implemented. The numerical solution behaviour is analyzed using error indicators to map regions where some physical phenomena, having high intensities, take place and then the adaptive process is applied to these regions. Mesh adaptation is performed using refinement/unrefinement techniques and a laplacian smoothing process. The turbulent models as well as the mesh adaptation procedure were implemented in a three dimensional finite element code using linear tetrahedral elements. Several examples, involving viscous incompressible isothermal or not isothermal laminar and turbulent flows, are presented and results obtained here are compared with those obtained numerically or experimentally by others authors.

Key-words: Finite elements; large eddy simulation; adaptive meshes.

1 INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, consideráveis progressos têm sido feitos no desenvolvimento e nas aplicações da Dinâmica dos Fluidos Computacional para a simulação de escoamentos compressíveis e incompressíveis. O natural interesse por aplicações práticas ligadas a escoamentos de fluidos, somado à disponibilidade dos avanços tecnológicos computacionais, propiciou o desenvolvimento de novos métodos e técnicas para a solução numérica de equações diferenciais parciais, que governam a dinâmica de escoamentos de fluidos e o transporte de quantidades escalares.

As equações de conservação de massa, de balanço de quantidade de movimento e quantidade escalar, em conjunto com as condições iniciais e de contorno, formam um sistema completo para sua utilização na Dinâmica dos Fluidos Computacional. Atualmente, com os métodos já desenvolvidos, os sistemas de equações diferenciais podem ser resolvidos numericamente, para uma grande parte das aplicações nas áreas de engenharia. A solução numérica direta das equações diferenciais, para escoamentos turbulentos complexos, não é ainda possível na maioria dos certos casos, devido aos graus de liberdade necessários para captar as pequenas escalas do movimento, pois superam a capacidade dos computadores atualmente disponíveis; no entanto, para aplicações com o número de Reynolds moderado, boas soluções podem ser alcançadas.

Normalmente, para resolver os modelos matemáticos desta natureza, são utilizados métodos numéricos, como o Método de Elementos Finitos, o Método de Diferenças Finitas, o Método de Volumes Finitos e, com menor frequência, o Método dos Elementos de Contorno. O aumento da capacidade dos computadores e a perspectiva de poder simular problemas de grande complexidade têm incentivado pesquisadores, no sentido de desenvolver novas técnicas (ligadas à discretização de domínios computacionais, como adaptação de malhas; e a modelos específicos para determinados escoamentos, como em escoamentos turbulentos), que proporcionam um incremento adicional na eficiência dos métodos numéricos.

Entre as técnicas que proporcionam robustez aos métodos numéricos, destacam-se: (a) as estratégias de adaptação automática de malhas, associadas ao comportamento dos fenômenos

físicos do escoamento, as quais têm como meta principal construir malhas otimizadas, objetivando determinar soluções numéricas de melhor qualidade a um relativo baixo esforço computacional; (b) os modelos de turbulência, os quais propiciam simular escoamentos com elevado número de Reynolds, representando a transferência de energia entre as grandes e pequenas escalas dos escoamentos, ou o relacionamento entre valores médios e flutuantes dos escoamentos.

Por natureza física, uma grande parte das aplicações da dinâmica de fluidos, apresenta consideráveis complexidades. A simulação numérica destas aplicações, devido aos fenômenos físicos, a seus efeitos e ao número de graus de liberdade, é um verdadeiro desafio. Em vista disto, uma gama de trabalhos têm sido publicados, integrando modelos matemáticos, métodos numéricos, modelos de turbulência e técnicas de adaptação de malhas. Mesmo assim, o problema não está totalmente resolvido, havendo ainda um espaço inesgotável para pesquisar e desenvolver novos modelos, novas técnicas e, enfim, novas abordagens para simular as mais diversas aplicações da Dinâmica dos Fluidos Computacional.

1.1 DA TURBULÊNCIA

Uma grande parte dos escoamentos inerentes à natureza, bem como em aplicações práticas nas mais diversas áreas da ciência, são caracterizados como turbulentos. Sob este ponto de vista, é de vital importância analisar e compreender as estruturas dos escoamentos e os efeitos que governam o fenômeno turbulência. Segundo Tennekes e Lumley (1972), um escoamento turbulento pode ser conceituado através das seguintes características: (a) irregularidade: problemas turbulentos são impossíveis de serem tratados estatisticamente e por aproximações determinísticas; (b) difusividade: a difusividade produz uma rápida mistura, aumenta a transferência de calor e massa, e tem grande influência na separação da camada limite; (c) elevado número de Reynolds: muitas vezes a turbulência origina-se de instabilidades de escoamentos laminares, quando o número de Reynolds aumenta; (d) flutuação de velocidade tridimensional: a turbulência é rotacional e tridimensional, e com altos níveis de flutuação na vorticidade; (e) dissipação: escoamentos turbulentos são sempre dissipativos e necessitam de um suprimento contínuo de energia para não decair; (f) contínuo: a turbulência é um fenômeno contínuo; as menores escalas que ocorrem no escoamento turbulento são maiores do que as escalas de comprimento molecular; e (g) escoamentos

turbulentos são escoamentos: a turbulência não é uma característica do fluido, mas do escoamento do fluido.

Um conceito mais atual trata a turbulência como um escoamento organizado com estruturas coerentes de várias escalas de comprimento. Segundo Lesieur (1997), uma estrutura coerente pode ser conceituada como uma região do espaço, onde, para um dado tempo, tem o mesmo tipo de organização, com relação a alguma quantidade do escoamento (velocidade, vorticidade, pressão, massa específica, temperatura, etc.). Também caracteriza um vórtice coerente como uma região de espaço, onde a concentração de vorticidade é suficiente para que as trajetórias de fluido girem ao redor dele, mantém sua forma característica por um período maior do que o tempo de rotação local e é imprevisível. Neste sentido, um vórtice coerente é uma estrutura coerente. Detalhes adicionais podem ser encontrados em Lesieur (1997) e Möller e Silvestrini (2004).

Uma das características mais importantes da dinâmica dos escoamentos turbulentos é a multiplicidade de escalas. As maiores escalas são controladas pela geometria e pelas condições de contorno do domínio computacional e, em cascata, até as menores escalas, as quais são controladas pela viscosidade molecular do fluido.

Um dos primeiros estudos experimentais, onde as instabilidades de escoamentos turbulentos foram observadas e analisadas, foi realizado por Reynolds em 1883, o qual observou que o escoamento no interior de um tubo tem dois comportamentos distintos: um regime laminar e outro, turbulento. Reynolds também verificou a existência de um parâmetro de controle da transição entre o regime laminar e o turbulento, que definiu como sendo:

$$Re = \frac{UD}{\nu} \quad (1.1.1)$$

onde U e D são, respectivamente, a velocidade característica do fluido e o diâmetro do tubo, e ν é a viscosidade cinemática do fluido. Reynolds verificou que, no regime turbulento, à medida que Re aumentava o escoamento no interior do tubo, tornava-se mais sinuoso (turbulento).

Outra contribuição importante proposta por Reynolds, foram as equações médias de Reynolds, para simular escoamentos turbulentos, onde definiu as tensões de Reynolds, através das flutuações da velocidade em torno de seu valor médio. Na mesma época (século XIX), Boussinesq propôs estudar escoamentos turbulentos como sendo laminares, alterando a viscosidade molecular, através da introdução do conceito de viscosidade turbulenta (*eddy viscosity* em inglês). Definiu as tensões de Reynolds como sendo proporcionais às taxas de deformação, com um coeficiente de proporcionalidade denominado de viscosidade turbulenta.

Prandtl, em 1925, para melhorar a qualidade da solução do perfil de velocidade média, propôs o conceito de comprimento de mistura, calculando a viscosidade turbulenta variável no espaço e no tempo. Prandtl considerou o comprimento de mistura proporcional à distância da parede.

Como num escoamento turbulento a multiplicidade de escalas se faz presente, é importante ter uma idéia real da ordem de grandeza das escalas que governam o movimento. As escalas são relacionadas com o tempo, o comprimento, a velocidade, a energia e a vorticidade. As grandes escalas de um escoamento turbulento estão relacionadas com a geometria do domínio e, a partir das escalas características de comprimento (L), de velocidade (U), são definidas as escalas de tempo ($t = L/U$), energia ($E = U^2$) e a escala de vorticidade ($W = U/L$). Observe-se que a escala de vorticidade é o inverso da escala de tempo.

Conforme a hipótese de equilíbrio universal de Kolmogorov, os parâmetro fundamentais para o movimento de pequenas escalas são a taxa de dissipação (ϵ) e a viscosidade cinemática (ν). As escalas dissipativas de Kolmogorov de tempo, comprimento, velocidade, energia e vorticidade, são definidas como sendo, respectivamente, (Schlichting, 1968, Tennekes e Lumley, 1972 e Silveira Neto, 1998):

$$t = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2}, \quad h = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}, \quad u = (\nu\epsilon)^{1/4}, \quad e = v^2 = (\nu\epsilon)^{1/2} \quad \text{e} \quad w = \frac{1}{t} = \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/2}. \quad (1.1.2)$$

Observe-se que o número de Reynolds, em função das escalas de comprimento e velocidade de Kolmogorov, é unitário.

Considerando a hipótese de equilíbrio, a dissipação viscosa é proporcional à taxa de transferência de energia cinética de grandes escalas e , assim, a dissipação viscosa pode ser expressa como:

$$\mathbf{e} = \frac{U^2}{t} = \frac{U^3}{L}. \quad (1.1.3)$$

Com a expressão de dissipação viscosa (Eq. 1.1.3) e as escalas dissipativas de Kolmogorov (Eq. 1.1.2), podem ser definidas as seguintes relações entre as escalas da turbulência, conforme Schlichting (1968), Tennekes and Lumley (1972) e Silveira Neto (1998):

$$\frac{t}{L} = \frac{1}{Re^{1/2}}, \quad \frac{h}{L} = \frac{1}{Re^{3/4}}, \quad \frac{u}{U} = \frac{1}{Re^{1/4}}, \quad \frac{e}{E} = \frac{1}{Re^{1/2}}, \quad \text{e} \quad \frac{w}{W} = Re^{1/2}. \quad (1.1.4)$$

Analisando as relações entre as escalas de escoamentos turbulentos das Eqs. (1.1.4), verifica-se que as escalas de tempo, comprimento, velocidade e energia dos menores vórtices são muito menores do que nos maiores vórtices, e a diferença cresce, à medida que o número de Reynolds aumenta. No entanto, a vorticidade dos menores vórtices é maior do que a dos maiores. Da relação de energia, observe-se que a energia dos menores vórtices é muito menor do que a energia dos vórtices de grandes escalas e , conseqüentemente, num escoamento turbulento, a maior parte de energia está associada ao movimento de grande escala. As escalas dissipativas de Kolmogorov mostram que a escala de comprimento afasta-se mais rapidamente (a diferença entre a maior e a menor escala de comprimento é relativamente grande) do que as escalas de tempo e velocidade, à medida que Reynolds aumenta.

O número de graus de liberdade para simular numericamente escoamentos turbulentos, através das equações de Navier-Stokes, pode ser estimado com base na relação entre as grandes escalas e as escalas dissipativas. Das Eqs. (1.1.4) tem-se que $L/h = Re^{3/4}$; logo, para um escoamento turbulento tridimensional, o número de graus de liberdade necessário para captar todas as escalas de turbulência é estimado como sendo a relação entre as escalas de comprimento (L/h) elevado ao cubo, ou seja:

$$N_{gl} = Re^{9/4}. \quad (1.1.5)$$

A turbulência só se manifesta para elevados números de Reynolds, conseqüentemente, o número de graus de liberdade para realizar uma simulação numérica é extremamente elevado.

Com base nas principais características que se manifestam num escoamento turbulento, o fenômeno turbulência fica mais fácil de ser entendido, quando visto sob estes aspectos. Além disto, estas características são de grande importância e servem de base para a fundamentação dos modelos de escoamentos turbulentos.

A solução numérica de um escoamento turbulento pode ser obtida através da Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation* – DNS) das equações de Navier-Stokes, já que, através destas equações, podem ser obtidas todas as escalas de um escoamento turbulento. Como a turbulência ocorre com elevados números de Reynolds e o número de graus de liberdade é estimado em função dele, conforme Eq. (1.1.5), verifica-se que, para a maior parte dos problemas práticos complexos, esta metodologia torna-se computacionalmente inviável.

Escoamentos turbulentos também podem ser simulados usando as equações médias de Reynolds (*Reynolds Average Navier-Stokes Equations* – RANS). Esta aproximação é baseada na separação do valor instantâneo de uma variável específica em seu valor médio e em um valor flutuante, com relação ao valor médio. As componentes das tensões de Reynolds são originadas pelas substituições dos valores médios, mais os flutuantes das componentes de velocidade nas equações da conservação da quantidade de movimento. Detalhes a respeito desta abordagem podem ser encontrados nos textos tradicionais, tais como em Hinze (1959), Schlichting (1968) e Tennekes e Lumley (1972).

As equações médias de Reynolds têm mais incógnitas do que equações, e devido a isto é necessário usar um modelo de fechamento para definir as componentes das tensões de Reynolds. Vários modelos têm sido empregados por diferentes autores, nas últimas três décadas, e muitos destes modelos são descritos por Launder e Spalding (1972) e (1974), Rodi (1984) e Markatos (1986), entre outros.

Alternativamente, outra metodologia para simular escoamentos turbulentos é a Simulação de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation* – LES). Esta metodologia foi, inicialmente, proposta por Smagorinsky (1963), e consiste na separação de grandes escalas das escalas inferiores à resolução da malha (*Subgrid-Scales* – SGS). As equações para a simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos são obtidas através de um processo de filtragem das equações da quantidade de movimento e de quantidades escalares (temperatura e concentração). O processo de filtragem gera, além das variáveis primárias filtradas, correspondentes às grandes escalas, as tensões de escalas sub-malha, devido aos termos não lineares das equações governantes. As grandes escalas do escoamento são associadas às baixas frequências e são controladas pela geometria do domínio e pelas condições de contorno. As escalas sub-malha são associadas às altas frequências e elas, muitas vezes, podem ser consideradas com comportamento isotrópico e homogêneo, mantendo-se independentes com relação ao escoamento principal.

Como nas equações médias de Reynolds, na simulação de grandes escalas também é necessário o uso de um modelo de fechamento e, devido às características das SGS (homogeneidade, isotropia, apresentam uma variação não significativa para diferentes escoamentos e contém uma pequena quantidade de energia) elas são mais apropriadas para serem representadas por um modelo de turbulência, Piomelli e Yu (1996). Assim sendo, na LES, as grandes escalas são simuladas diretamente, enquanto os efeitos das escalas sub-malha são modeladas por um modelo de fechamento, como apresentam Mason e Callen (1986) e Piomelli (1993).

Na essência, as equações médias de Reynolds e as equações de simulação de grandes escalas são semelhantes; no entanto, os modelos de fechamento utilizados são diferentes e caracterizam cada uma das metodologias. Como apresentado por Silveira Neto et Al. (2002), na RANS, é modelada a transferência de quantidade de movimento e de energia entre o escoamento médio e suas flutuações, enquanto na LES, é modelada a transferência de quantidade de movimento e energia entre as grandes escalas e as escalas sub-malha da turbulência.

Assim, de forma sucinta, foram abordados os três métodos de análise de escoamento turbulentos para a Dinâmica dos Fluidos Computacional: DNS, LES e RANS. As equações básicas para cada um dos métodos são diferentes, usando, respectivamente, as equações

originais de Navier-Stokes, as equações de Navier-Stokes filtradas e as equações médias de Reynolds. Conseqüentemente, devido às características inerentes a cada um dos métodos, a resolução da malha necessária para captar a multiplicidade de escalas de escoamentos turbulentos é também diferente. Como já foi abordada, a DNS necessita de uma malha fina quanto à micro-escala de Komogorov (Eq. 1.1.5). Desta forma, torna-se inviável sua aplicação em uma grande parte dos problemas práticos de engenharia, devido às limitações computacionais de memória e velocidade disponíveis até o presente. Assim, as simulações de escoamentos turbulentos, nas áreas de engenharia, ficam restritas aos modelos com base nas equações médias de Reynolds e nas simulações de grandes escalas.

Na LES, as grandes escalas do escoamento turbulento são resolvidas diretamente, enquanto as escala sub-malha, cujos efeitos aparecem nos termos de tensões, são modeladas. Visto que as escalas sub-malha transportam uma pequena quantidade de energia e por serem mais homogêneas e isotrópicas que as grandes escalas, sua modelagem fica mais simples do que modelar todas as escalas do movimento, como ocorre nas equações médias de Reynolds. Em outras palavras, utilizar a LES significa ter modelos mais universais que os baseados na RANS, os quais dependem do tipo de escoamento. Em conseqüência, os resultados numéricos de simulações de grandes escalas tendem a ser menos dependentes da eficiência do modelo. Isto caracteriza uma das vantagens da LES e, além disto, por resolver diretamente apenas as grandes escalas do movimento, ele necessita de um menor esforço computacional do que a DNS.

Na simulação de grandes escalas, a maior parte das escalas dos escoamentos turbulentos são resolvidas diretamente e as escalas sub-malha são modeladas. Esta metodologia proporciona uma ferramenta de grande futuro para a análise de escoamentos turbulentos. A mais importante característica, e fundamental para o modelo para as escalas sub-malha, é a habilidade de captar e reproduzir a transferência de energia entre as escalas resolvidas e as escalas sub-malha. A maior parte dos modelos para as tensões de escalas sub-malha são baseadas na suposição de viscosidade turbulenta e na teoria de comprimento de mistura. Segundo Knight et al. (1998), o modelo para as tensões de escalas sub-malha tem dois objetivos: primeiro, ele deve ser capaz de modelar a cascata de energia turbulenta das grandes escalas até as escalas sub-malha; segundo, o modelo deve possuir a capacidade de simular as interações não lineares entre as grandes e pequenas escalas.

A mais popular aproximação empregada como modelo de sub-malha da LES tem sido o modelo proposto por Smagorinsky (1963). O modelo de Smagorinsky tornou-se popular devido a sua simplicidade e à habilidade de prever a transferência de energia global. No entanto, o modelo sobreestima a viscosidade turbulenta nas proximidades de paredes, a qual pode ser controlada artificialmente com uma função de amortecimento (*damping*) como a função de Van Driest (Lee, 1998).

O modelo de Smagorinsky, por analogia com a viscosidade molecular, a qual é uma propriedade do fluido, o modelo representa a turbulência por uma viscosidade turbulenta como uma propriedade local do fluido, quando, na realidade, a viscosidade turbulenta é uma propriedade do escoamento. Assim, como Markatos (1986) observa, o comprimento de mistura das pequenas escalas da turbulência é tratado de forma análoga ao livre caminho médio molecular da teoria cinética dos gases. Esta descrição é baseada num conceito errado, mas tem proporcionado bons resultados em simulações de escoamentos turbulentos em várias áreas da engenharia.

Conforme Zang et al. (1993), o modelo de Smagorinsky apresenta alguns inconvenientes como: (a) necessita informar a constante C_s , a qual é dependente do escoamento; (b) prevê um incorreto comportamento assintótico próximo à parede, ou em um escoamento laminar; (c) não permite a transferência de energia das pequenas escalas para as grandes escalas; e (d) assume que os eixos principais do tensor das tensões sub-malha são alinhados com os do tensor da taxa de deformação.

Murakami (1997), observa que não é fácil selecionar um adequado valor de C_s para analisar o campo do escoamento ao redor de corpos, com propriedades de choque, separação, camada de cisalhamento livre, desprendimento de vórtices, etc. Comenta que a desvantagem de usar um valor constante para C_s torna-se um problema sério na Dinâmica dos Fluidos Computacional aplicada à engenharia do vento.

Devido à limitação da constante de Smagorinsky, várias alternativas têm sido propostas como, por exemplo, as de Germano et al. (1991), Lilly (1992), Zang et al. (1993), Vreman et al. (1994), Ghosal et al. (1995), Salvatti e Banerjee (1995) e Meneveau et al. (1996), entre outros autores.

O modelo dinâmico proposto por Germano et al. (1991), utilizado para a simulação de grandes escalas, tem o propósito de calcular a variável (C) do modelo em função do tempo e do espaço, substituindo a constante (C_s^2) do modelo de Smagorinsky.

O modelo dinâmico é fundamentado em dois processos de filtragens, aplicados sucessivamente às equações de Navier-Stokes. O filtro a nível de malha e o filtro teste geram, respectivamente, o tensor de escalas sub-malha e o tensor sub-teste, os quais são calculados explicitamente em função das grandes escalas (resolvidas através da LES). Utilizando um modelo de viscosidade turbulenta, Eq. (1.1.6), para representar os tensores e uma identidade algébrica que os relaciona, Germano et al. (1991) definem uma expressão para o parâmetro C , em função do espaço e do tempo.

O modelo dinâmico, como descrevem Germano et al. (1991), Piomelli (1993), Zang et al. (1993), e Piomelli e Lui (1995), tem várias características importantes, tais como: (a) o coeficiente de viscosidade turbulenta torna-se nulo em escoamentos laminares; (b) a viscosidade turbulenta pode ser negativa, significando que o modelo é capaz de simular a transferência de energia das pequenas escalas para as grandes escalas (*backscatter*); e (c) o modelo tem um adequado comportamento assintótico próximo aos contornos sólidos.

No entanto, o modelo dinâmico apresenta algumas características inconvenientes, as quais têm sido revisadas através de contribuições de outros pesquisadores. Para obter o parâmetro C de forma consistente, Lilly (1992) aplica o método dos mínimos quadrados em substituição à contração aplicada por Germano et al (1991). A partir de então, o modelo dinâmico de Germano et al. (1991) passa a ser utilizado com a modificação proposta por Lilly (1992).

A grande flutuação no parâmetro C do modelo dinâmico pode levar a instabilidades computacionais. Em vista disto, várias modificações têm sido introduzidas ao modelo, a fim de superar este inconveniente. O defeito pode ser corrigido aplicando um filtro de corte, como proposto por Nakayama e Vengadesan (2002), Piomelli e Liu (1995) e Sagaut et al. (1994), ou através de modificações da expressão para a obtenção do parâmetro C .

O modelo de Germano et al. (1991), modificado por Lilly (1992), necessita que os eixos principais das tensões sub-malha devam ser alinhadas com o tensor da taxa de deformação, pois, no caso contrário, causa uma excessiva transferência de energia das

pequenas escalas para as grandes escalas (C negativo). Para amenizar este inconveniente, Zang et al. (1993) propõe um modelo dinâmico misto, combinando linearmente o modelo dinâmico e o modelo de escalas de similaridade de Bardina (apresentado em Murakami, 1998). O modelo dinâmico misto não requer o alinhamento dos eixos dos tensores de tensões turbulentas e de taxa de deformação. No mesmo sentido, Vreman et al. (1994) apresenta uma alternativa para a formulação do modelo dinâmico misto. Em ambas as formulações, as tensões sub-malha desaparecem em escoamentos laminares e em paredes sólidas, exibindo um comportamento assintótico correto. De qualquer modo, no modelo dinâmico misto, a transferência de energia das pequenas escalas para as grandes escalas ainda ocorre, mas de forma minimizada.

Outras alternativas de modificações do modelo dinâmico de escalas sub-malha podem ser buscadas em Meneveau et al. (1996), que apresenta um modelo dinâmico lagrangeano; Ghosal et al. (1995) propõe um modelo dinâmico localizado, e Salvetti e Banerjee (1995) apresentam um modelo dinâmico de dois parâmetros. Detalhes adicionais podem ser buscados na bibliografia acima referenciada e comparações entre modelos podem ser encontrados em Murakami (1998), que faz uma revisão sobre os modelos de turbulência.

1.2 DA ADAPTAÇÃO DE MALHAS

O Método de Elementos Finitos fundamenta-se na discretização do domínio computacional do problema em pequenas células de geometria simples, chamadas de elementos. Sobre o elemento são aplicados métodos de aproximação, com o propósito de simular matematicamente o comportamento global do problema. O conjunto de elementos é chamado de malha de elementos finitos e a geração desta pode ser de forma estruturada ou não estruturada. Da malha, são definidas as entidades geométricas, denominadas de elemento, face, aresta e nó. Normalmente, em sistemas de coordenadas bidimensionais, para discretizar os domínios computacionais, são utilizados elementos triangulares ou quadriláteros e, em sistemas tridimensionais, são utilizados elementos tetraédricos ou hexaédricos e, muitas vezes, elementos mistos.

A solução de simulações numéricas de sistemas originados de equações diferenciais parciais está relacionada com a discretização do domínio computacional e/ou ao grau do

polinômio de interpolação utilizado. Portanto, proporcionar uma solução de qualidade significa gerar uma malha razoavelmente fina e/ou utilizar um polinômio de interpolação de alta ordem. Este procedimento gera um custo computacional elevado, devido ao armazenamento de informações e aos métodos numéricos, que levam à solução de um sistema de equações algébricas.

Considerando estes aspectos, inúmeros trabalhos têm sido desenvolvidos, visando acoplar modelos matemáticos, métodos numéricos e métodos de adaptação automática de malhas. Os desenvolvimentos de métodos de adaptação de malhas têm, como meta, alcançar uma solução numérica de alta qualidade e a um custo computacional relativamente baixo, principalmente quando comparado com soluções obtidas sem esta metodologia.

Os métodos adaptativos têm, como princípio fundamental, de relacionar as adaptações de malhas aos fenômenos físicos do sistema que está sendo solucionado. Neste sentido, as adaptações são estrategicamente concentradas nas regiões onde os fenômenos físicos ocorrem com maior intensidade e, em consequência, obtém-se uma solução numérica de melhor qualidade.

O controle da qualidade da solução numérica e o mapeamento da importância dos fenômenos físicos são eficazmente gerenciados por indicadores de erro, definidos pelas próprias variáveis primárias do problema e por um critério de adaptação, que é responsável pela análise dos indicadores de erro, identificando as regiões do domínio computacional que necessitam de uma malha mais refinada.

A discretização da malha inicial do domínio, a qual servirá de base para obter as principais características do escoamento e para as adaptações, é construída por geradores de malha. As malhas não estruturadas oferecem maior flexibilidade na aceitação dos métodos de adaptação que alteram a discretização da malha inicial, tal como mostrado por Probert et al. (1991), Richter e Leyland (1995), Oden et al. (1986), Argyris (1990), Grosso et al. (1997), Bey (1995), Jimack et al. (2002), Kallinderis e Vijayan (1993), Biswas e Strawn (1994), Connel e Holmes (1994) e Speares e Bergins (1997), entre outros.

Para realizar uma adequada adaptação de malhas de elementos finitos, é de vital importância mapear o domínio computacional do problema, em função das características físicas locais do escoamento. É fundamental identificar as regiões onde os fenômenos físicos

ocorrem com maior intensidade, ou aonde as soluções são críticas e, nestas regiões, aplicar um método de adaptação de malhas para melhorar a qualidade da malha, proporcionando, assim, obter uma solução com uma melhor precisão. Partindo desta idéia, fica evidenciado que só é possível realizar uma adequada adaptação automática de malhas, quando executada simultaneamente e interativamente com a solução numérica.

O mapeamento das principais características físicas do escoamento é realizado através de expressões matemáticas denominadas de indicadores de erro, os quais são definidos em função das variáveis de estado que governam a dinâmica do escoamento. Normalmente, são utilizados gradientes de velocidade, temperatura, concentração, pressão, massa específica; também número de Courant, vorticidade, baixas velocidades; e, enfim, variáveis ou expressões que representam um fenômeno físico, que deve ser calculado adequadamente. Sobre este tema, detalhes podem ser encontrados em Babuska e Miller (1984), Demkowicz et al. (1984), Zienkiewicz e Zhu (1987), Ainsword et al. (1989), Argyris et al (1990) e Fuenmayor e Oliver (1996), entre outros.

Observe-se que os indicadores de erro são calculados em todos os nós da malha e pode ser utilizada, como base de análise, a entidade elemento, como em Oden et al. (1986), Argyris (1990), Grosso et al. (1997), Bey (1995) e Jimack et al. (2002), entre outros. A entidade aresta é utilizada por Kallinderis e Vijayan (1993), Biswas e Strawn (1994), Connel e Holmes (1994) e Speares e Bergins (1997), entre outros. Em geral, quando são visados, preferencialmente, refinamentos isotrópicos é utilizada a entidade elemento como base e, quando são desejados refinamentos direcionais (não isotrópicos), é utilizada a entidade aresta, como base de cálculo dos indicadores de erro. De qualquer forma, refinamentos isotrópicos também podem ser realizados preferencialmente com a análise vinculada à entidade arestas.

Normalmente, as estratégias de adaptação automática de malhas são construídas por um ou mais indicadores de erro, por um critério de adaptação e por um ou mais métodos de adaptação de malhas.

O critério de adaptação é uma das ferramentas básicas em processos adaptativos, pois ele é responsável pela análise dos indicadores de erro e, em função desta análise, identifica as regiões da malha onde os fenômenos físicos são mais acentuados, com o propósito de melhorar a qualidade dela (através de refinamentos) e assim proporcionar a obtenção de uma solução numérica de melhor qualidade.

Na maior parte dos trabalhos publicados, que tratam do critério de adaptação, como em Oden et al. (1986), Devloo et al. (1988), Demkowicz et al. (1991) e Argyris (1990), é calculado um valor máximo, ou um valor médio, ou uma norma dos dados gerados pelo indicador de erro e , em seguida, todo o elemento que possuir um indicador de erro superior a um dado valor é submetido a um processo de adaptação. De forma diferenciada, Kallinderis e Vijayan (1993) apresentam um critério de adaptação fundamentado, estatisticamente, no desvio padrão de distribuições normais.

Na literatura, vários métodos de adaptação de malhas têm sido apresentados, como o método h , que se caracteriza pelo refinamento/desrefinamento de malhas; o método r , que emprega um esquema de realocação nodal (suavização); o método de remalhamento, onde a malha é reconstruída; o método p , que se fundamenta na melhoria das funções de forma, aumentando ou diminuindo o grau do polinômio de interpolação; e o método de troca de aresta em 2D ou de faces em 3D.

O método h engloba os métodos de refinamento/desrefinamento. O método de refinamento é classificado como um processo de enriquecimento de malhas, consistindo na subdivisão de elementos através de inserção de novos nós, arestas, faces e elementos. Na estratégia de adaptação de malhas, o refinamento se faz necessário nas regiões com elevados indicadores de erro, ou seja, de baixa precisão. Já o processo de desrefinamento caracteriza-se pela inversão do processo de refinamento e, normalmente, é aplicado a grupos de elementos gerados pelo refinamento de um único elemento. Neste caso, o desrefinamento é aplicado onde os indicadores de erro têm um valor pequeno.

Em aplicações da Dinâmica dos Fluidos Computacional, pode ser utilizado apenas o processo de refinamento, como em Bank et al. (1983), Löhner et al. (1985), Nambiar et al. (1993), em 2D; e Golias e Tsiboukis (1994), Bey (1995), Speares e Berzins (1997) e Mavriplis (2000), entre outros, em 3D. Entretanto, em escoamentos transientes, é conveniente aplicar os processos de refinamento e desrefinamento simultaneamente, como são apresentados nos trabalhos de Oden et al. (1986), Löhner et al. (1987) e Ritcher e Leyland (1995), em 2D; e Kallinderis e Vijayan (1993), Bornemann et al (1993) e Biswas e Strawn (1994), em 3D.

A aplicação do processo de refinamento tem o objetivo de melhorar a qualidade da solução numérica nas regiões de elevados indicadores de erro; e o processo de desrefinamento

é aplicado em regiões onde uma alta densidade de elementos é desnecessária, ou seja, em regiões de baixos indicadores de erro. Observe-se que a malha inicial grosseira é o nível zero; logo, seus elementos não podem ser desfragmentados. O processo de refinamento deve ser adequadamente otimizado, para não levar a um excessivo aumento dos graus de liberdade do sistema. De qualquer modo, o aumento do número de elementos é sempre compensado pela qualidade da solução numérica obtida.

Em geral, no esquema de refinamento, são adotados vários tipos de subdivisão de elementos. Dentre estes tipos, muitas vezes, é estabelecida uma subdivisão padrão, denominada de refinamento regular. Os demais refinamentos, chamados de irregulares, são realizados nos elementos vizinhos aos elementos refinados regularmente, propiciando assim o fechamento da malha, sem a existência de nós pendurados (malha consistente). O trabalho de Bank et al. (1983) é constantemente referenciado, por ter apresentado esta idéia de refinamento. Embora tenha sido apresentado inicialmente para o refinamento de malhas bidimensionais, posteriormente, foi estendido para malhas tridimensionais.

Sucessivos níveis de refinamento podem gerar elementos distorcidos, devido aos refinamentos irregulares. No entanto, o aspecto geométrico dos elementos pode ser melhorado, aplicando um esquema de suavização (realocação nodal), como apresentado em Feitag e Ollivier-Gooch (1997), ou adotando uma estratégia de refinamento, como o de Connel e Holmes (1994), onde elementos gerados por refinamentos irregulares não podem mais ser refinados.

As mais diversas formas de subdivisão de elementos podem ser encontradas na literatura. Entre os trabalhos que utilizam malhas bidimensionais com elementos triangulares podem ser representados por Bank et al. (1983), Rivara (1997), Plaza (2000) e Löhner (1987). Detalhes de tipos de subdivisões de elementos tetraédricos podem ser buscados em Bornemann et al. (1993), Speares e Brezins (1997) e Thoutireddy et al. (2002). Cuidados especiais devem ser tomados na estratégia de refinamentos, quanto ao tipo de subdivisões utilizadas nos refinamentos irregulares para o fechamento da malha, pois, em alguns casos, pode ocorrer propagação de refinamentos desnecessários.

O método p é um processo de enriquecimento da qualidade da malha em regiões de baixa precisão, isto é, regiões de elevados indicadores de erro. O método caracteriza-se em manter a mesma malha e utilizar funções de forma (polinômios) de diferentes graus. A

estratégia do método consiste em utilizar um polinômio de interpolação de maior grau nas regiões de elevados indicadores de erro; por outro lado, nas demais regiões, um polinômio de baixa ordem é suficiente. Segundo Bey et al. (1995), este método tem melhor desempenho em regiões de baixos e moderados gradientes, visto que, em regiões de soluções críticas, podem resultar soluções oscilatórias, além de comprometer a precisão da solução final.

As desvantagens da utilização do método p estão relacionadas com a manutenção da malha inicial e com a utilização de polinômios de função de forma de alta ordem, o que implica num aumento do custo computacional. Detalhes podem ser encontrados em Demkowicz et al. (1984) e Devloo (1988).

O método r , denominado de realocação nodal ou suavização, fundamenta-se no deslocamento de nós de regiões de baixos indicadores de erro, para regiões de elevados indicadores de erro. Este procedimento proporciona que elementos de menor tamanho fiquem concentrados em regiões onde os fenômenos físicos do problema são mais intensos e, conseqüentemente, podem ser calculados com maior precisão. Informações adicionais e detalhes podem ser encontrados em Oden et al. (1986), Ait-Ali-Yahia et al. (1996), Habashi et al. (2000), Ivanenko e Azarenok (2002), e Bono e Awruch (2004). Este método, em várias situações, pode causar distorções nos elementos de contornos, bem como em regiões próximas a elevados indicadores de erro. O método r tem a desvantagem de preservar o número de graus de liberdade da malha inicial.

O método de realocação nodal, ou técnica de suavização laplaciana, é, freqüentemente, utilizado para suavizar a transição de elementos de diferentes tamanhos e para melhorar a qualidade geométrica dos elementos pós-refinados, como apresentado por Vilsmeier e Hänel (1995) e Riccius et al. (1997). Das técnicas de suavização laplacianas, Zhou e Shimada (2000) destacam: a suavização laplaciana (*laplacian smoothing*), onde o nó é movimentado para o centróide de seus vértices vizinhos; a suavização Laplaciana com função peso (*length, area or volume weighted laplacian smoothing*), onde os nós são realocados com a influência de uma função peso, onde a função pode ser o comprimento de uma aresta, ou a área de um elemento 2D, ou o volume de um elemento 3D; e a suavização laplaciana com limitação (*smart laplacian smoothing or constrained laplacian smoothing*), onde alguma forma de controle de qualidade geométrica de elementos é calculada, antes e depois da suavização laplaciana. As

duas primeiras técnicas de suavizações citadas, em algumas circunstâncias, podem gerar elementos inversos ou elementos inválidos.

O método de adaptação de malhas por remalhamento caracteriza-se pela reconstrução parcial ou total da malha. Os trabalhos apresentados por Peraire et al. (1987), Löwner (1989) e Dannelongue e Tanguy (1990) têm utilizado a reconstrução total da malha. No entanto, Probert et al. (1991) apresentou uma estratégia para reconstruir a malha somente nas regiões de elevados gradientes.

O método de troca de arestas (em 2D), ou de faces (em 3D), tem sido utilizado para melhorar a qualidade geométrica de malhas, onde as posições e o número de nós são mantidos fixos, mas as conectividades dos elementos que compartilham da aresta ou face são alteradas. Jimack et al. (2002) utilizam a troca de arestas para melhorar a qualidade geométrica de elementos; e Freitag e Ollivier-Gooch (1997) utilizam troca de arestas e faces em malhas tridimensionais com elementos tetraédricos.

Os métodos de adaptação abordados podem ser combinados, com o propósito de obter uma malha de elementos finitos otimizada e, assim, garantir uma solução numérica de melhor qualidade. Muitas vezes, o método de refinamento e o método de remalhamento são combinados com o método de realocação nodal, para obter elementos com melhor qualidade geométrica e para suavizar a transição de elementos de diferentes tamanhos. Também o método de refinamento é frequentemente combinado com o método p .

Em vista disto, pesquisadores têm combinado estrategicamente dois ou mais métodos de adaptação de malhas, buscando construir uma malha adequada ao problema que está sendo simulado. Neste sentido, Devloo et al. (1988), Demkowicz et al (1991), Bey et al. (1995) e Oden et al. (1995) integram os métodos h e p . Os métodos h e r foram combinados por Nambiar et al. (1993), Riccius et al. (1997) e Jimack et al. (2002). Probert et al. (1991) combina o método de remalhamento parcial com o método de realocação nodal. Os métodos h , r e troca de aresta são utilizados por Jimack et al. (2002), enquanto Freitag e Ollivier-Gooch (1997) usam troca de arestas e faces, e a realocação nodal.

Para viabilizar uma estratégia de adaptação automática de malhas, grandes quantidades de informações devem ser organizadas e gerenciadas, principalmente quando se trata de simulações de problemas tridimensionais. Devido à complexidade de se tratar discretizações

tridimensionais, faz-se necessário o desenvolvimento de algoritmos eficientes e ainda contar com uma estrutura de dados otimizada, em termos de baixa armazenagem e baixo custo computacional. Estes fatos têm incentivado o desenvolvimento de novas estruturas de dados, compatíveis com o código computacional, buscando eficiência, rapidez e um baixo custo.

Na literatura, são apresentadas diferentes estruturas de dados para a adaptação de malhas tridimensionais, sendo que as mais representativas são as propostas por Kollinderis e Vijayan (1993), Biswas e Strawn (1994), Connel e Holmes (1994), Bey (1995), Speares e Berzins (1997) e Grosso et al. (1997), entre outras.

1.3 OBJETIVOS, METODOLOGIA E ORGANIZAÇÃO

O presente trabalho parte de um código computacional tridimensional desenvolvido por Teixeira (2001), utilizado para analisar escoamentos de fluidos viscosos, incompressíveis e isotérmicos. Na implementação do algoritmo, foi utilizado o Método de Elementos Finitos e, para integrar as equações governantes, foi usado o esquema de Taylor-Galerkin, de dois passos, para a discretização no tempo e no espaço. O elemento finito de discretização do domínio computacional é o tetraedro.

Os principais objetivos deste trabalho são a formulação e a aplicação de uma estratégia de adaptação automática de malhas e a inclusão de modelos de viscosidade turbulenta, integrados com um algoritmo utilizado para simular escoamentos de fluidos viscosos, bi e tridimensionais, incompressíveis, laminares, turbulentos, isotérmicos, não isotérmicos e envolvendo o transporte de quantidades escalares.

Para alcançar os objetivos, na equação de balanço de quantidade de movimento é introduzido o termo fonte, ou seja, a força de empuxo produzida pelos efeitos de gradientes de temperatura, propiciando a simulação de escoamentos não isotérmicos, regime de convecção mista.

Além das equações do código básico (equação de conservação de massa, equação de balanço de quantidade de movimento e de energia), é introduzida a equação de transporte de massa (concentração), com o objetivo de simular problemas de dispersão de poluentes.

Objetivando simular escoamentos turbulentos, é introduzida a metodologia de simulação de grandes escalas (LES), onde as grandes escalas são resolvidas diretamente e, para simular a transferência de energia entre as grandes e as pequenas escalas, são implementados dois modelos de viscosidade turbulenta, o modelo de Smagorinsky (1963) e o modelo dinâmico de Germano et al. (1991), modificado por Lilly (1992).

Além disto, para viabilizar soluções numéricas com uma melhor qualidade e a um custo computacional otimizado, foi implementada e incorporada ao código computacional, uma estratégia de adaptação automática de malhas, aplicada a escoamentos permanentes e transientes, sejam eles laminares ou turbulentos.

No Capítulo 2, é apresentada a formulação matemática das equações governantes: equação de conservação de massa, equação de quantidade de movimento, equação de quantidade escalar (temperatura e concentração), equações para a simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos e os modelos de viscosidade turbulenta de Smagorinsky e o dinâmico.

A estratégia de adaptação automática de malhas, mostrada no Capítulo 3, é constituída de indicadores de erro, critério de adaptação de malhas, um esquema de subdivisão de elementos (onde são detalhados os esquemas de refinamentos e desrefinamentos), realocação nodal (suavização laplaciana com restrição – onde o nó somente é realocado se não produzir elementos inversos) e estruturas de dados.

De forma simplificada, no Capítulo 4, é apresentado o algoritmo numérico das equações governantes, utilizando para discretizar no tempo e no espaço, o esquema semi-implícito de Taylor-Galerkin de dois passos.

Para validar a eficiência do código computacional para a simulação de grandes escala (LES), com os modelos de viscosidade turbulenta de Smagorinsky e o Dinâmico, no Capítulo 5, são apresentados resultados de aplicações envolvendo escoamentos turbulentos. Da mesma forma, para validar a performance da estratégia de adaptação automática de malhas, são realizadas aplicações de escoamentos laminares, sendo que a solução é obtida através de simulação das equações de Navier-Stokes (DNS), e os escoamentos turbulentos através da LES. Para o fechamento das aplicações, são apresentados os resultados de simulação de

dispersão de poluentes em um ambiente urbano, onde as soluções são comparadas com resultados experimentais.

No Capítulo 6, são apresentadas as conclusões relativas aos temas abordados na presente tese; e algumas sugestões para futuros trabalhos, os quais considera-se ser importante para a continuidade dos assuntos aqui estudados. Já no último Capítulo, são apresentadas as referências bibliográficas que foram consultadas, muitas das quais influenciaram na condução e no desenvolvimento dos temas abordados.

Os procedimentos desenvolvidos foram implementados na linguagem FORTRAN 90/95. Também foram utilizados *softwares* auxiliares para gerar as malhas das discretizações dos domínios computacionais das aplicações, bem como *softwares* gráficos para o tratamento e as apresentações dos dados das soluções numéricas. As simulações numéricas das aplicações foram processadas no supercomputador CRAY T90, do Centro Nacional de Supercomputação da Região Sul, da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (CESUP-RS/UFRGS) e em microcomputadores Pentium IV (2.0 GHz e 3.2 GHz). Os pré-processamentos e os pós-processamentos foram executados nos microcomputadores acima citados, pois estes equipamentos apresentam grande facilidade no gerenciamento e na integração entre diferentes *softwares* e porque estes equipamentos apresentam adequada performance.

2 FORMULAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

O escoamento turbulento é um dos fenômenos físicos que ocorre freqüentemente na natureza e, devido a seus efeitos, estes fenômenos são de grande interesse prático nas mais diversas áreas da engenharia. A turbulência é caracterizada como um escoamento de fluido tridimensional, altamente desordenado, intermitente, rotacional, difusivo e dissipativo, entretanto; conceitos mais atuais tratam a turbulência como um escoamento organizado, com estruturas coerentes de várias escalas de comprimento. Um escoamento turbulento é considerado o tipo de escoamento de fluido de maior complexidade e de difícil formulação matemática, sendo atualmente um problema desafiante.

Escoamentos turbulentos, no entanto, podem ser representados matematicamente pelas equações diferenciais de Navier-Stokes. Neste sentido, as equações tridimensionais, que governam os escoamentos de fluidos newtonianos levemente compressíveis, transientes, isotérmicos ou não isotérmicos, são definidas através das equações de conservação de massa, de balanço de quantidade de movimento e de quantidade escalar (temperatura ou concentração), conforme apresentadas a seguir:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{r} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_j} \mathbf{d}_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{m} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \mathbf{I} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] - S_{u_i} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \mathbf{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} u_j \mathbf{f}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{x_j} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_j} \right) - S_f = 0 \quad (2.3)$$

onde u_j representa as componentes do campo de velocidade nas direções das coordenadas cartesianas x_j ; \mathbf{r} é a massa específica do fluido; p corresponde à pressão; c é a velocidade do som; \mathbf{m} e \mathbf{I} são, respectivamente, a viscosidade dinâmica e a viscosidade volumétrica do

fluido, sendo que $\mathbf{I} = -\frac{2}{3} \mathbf{m}$; \mathbf{f} é a quantidade escalar, que pode ser temperatura ou concentração; \mathbf{d}_{ij} corresponde ao delta de Kroenecker; $D_{.xj}$ são os coeficientes de condutividade ou dispersão; e S_{ui} e S_f são, respectivamente, o termo fonte ou sumidouro da equação de balanço quantidade de movimento e da equação de quantidade escalar.

Na equação de continuidade, Eq. (2.1), foi admitida a hipótese de que o fluido é levemente compressível, considerando que $\frac{\partial p}{\partial \mathbf{r}} = c^2$ e que $\mathbf{r} \equiv cte$ em todo o domínio.

Comprovadamente, é possível obter soluções numéricas, considerando a multiplicidade de escalas de um escoamento turbulento, através da utilização das equações de Navier-Stokes. Esta abordagem é denominada de Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation – DNS*). Entretanto, para captar adequadamente os efeitos das menores escalas de escoamentos turbulentos – escalas associadas às altas frequências (elevado número de Reynolds), é necessário discretizar o domínio computacional em uma malha demasiadamente fina (visto que o número de graus de liberdade está associado à relação entre as grandes escalas e as escalas dissipativas de Kolmogorov, Eq. (1.1.4)). Com este procedimento, a solução torna-se praticamente impossível, devido à capacidade de memória necessária para o armazenamento das informações, bem como pelo tempo necessário para o processamento da solução numérica. Contudo, simulações numéricas diretas são viáveis, quando se trata de escoamentos turbulentos cujo número de Reynolds seja moderado.

Uma das alternativas para resolver as equações de Navier-Stokes, para escoamentos turbulentos, é através da hipótese de Reynolds, a qual separa as variáveis em uma parte média e outra flutuante, originando as equações médias de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes – RANS*). Detalhes de sua obtenção podem ser encontrados em Schlichting (1968) e Tennekes e Lumley (1972). Usando esta metodologia, o modelo que mais tem se destacado é o $k - \epsilon$, que pode ser encontrado em Launder e Spalding (1974) e Sohn (1988). No entanto, este tipo de abordagem não faz parte deste trabalho.

De forma semelhante, mas com diferente metodologia, as equações diferenciais parciais governantes podem ser submetidas a operadores denominados de filtros, com o propósito de separar as variáveis em grandes escalas e pequenas escalas, onde as grandes escalas são associadas às menores frequências do escoamento e estas grandezas são originadas pela

geometria do domínio computacional e pelas condições de contorno. As grandes escalas, ou os grandes vórtices fazem parte do escoamento principal, sendo responsáveis pela maior parte do transporte de energia do sistema (conforme relação entre as escalas de energia, Eq. 1.1.4). Por sua vez, as pequenas escalas são associadas aos movimentos de altas frequências e são responsáveis por uma pequena parte do transporte de energia. As pequenas escalas são consideradas com comportamento isotrópico e são mais homogêneas que as grandes escalas, isto é, as pequenas escalas são independentes da direção do escoamento principal e variam muito pouco de um escoamento para outro. Assim sendo, as pequenas escalas são mais passíveis a uma modelagem matemática do que as grandes escalas de escoamentos turbulentos.

2.1 EQUAÇÕES PARA SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS (LES)

As equações governantes para Simulação de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation* – LES) de escoamentos turbulentos são obtidas a partir das equações de conservação de massa, de balanço de quantidade de movimento e de quantidade escalar, Eqs. (2.1), (2.2) e (2.3). Esta metodologia separa cada uma das variáveis de campo, aqui representadas por f , em duas partes, como segue:

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.1.1)$$

onde \bar{f} representa as componentes de grandes escalas e f' corresponde às componentes de pequenas escalas – escalas inferiores à resolução da malha (*subgrid scale* – SGS).

Segundo Leonard (1974), e Findikakis e Street (1982), as variáveis de campo de grandes escalas (\bar{f}) podem ser definidas através de uma convolução das variáveis de campo (f), conforme expressão:

$$\bar{f}(x_i) = \int_{\Omega} G(x_i - x_i') f(x_i') dx \quad (2.1.2)$$

onde $G(x_i - x_i')$ é uma função filtro de malha na direção i e a integral é estendida sobre o domínio W . A função filtro de malha utilizada é definida por:

$$G(x_i - x_i') = \begin{cases} \prod_{i=1}^n \frac{1}{D_i} & \text{se } |x_i - x_i'| < \frac{D_i}{2} \\ 0 & \text{se } |x_i - x_i'| > \frac{D_i}{2} \end{cases} \quad (2.1.3)$$

onde n é o número de dimensões, Δ_i representa a largura do filtro (escala de comprimento) na direção i . Note-se que $G(x_i - x_i')$ é grande apenas quando $(x_i - x_i')$ é menor do que uma escala de comprimento. A escala de comprimento é um valor sobre o qual a média é calculada. Observe-se que vórtices maiores que a escala de comprimento são considerados grandes vórtices, e vórtices menores que a escala de comprimento são pequenos vórtices. Este filtro de malha é denominado de *box*, no idioma inglês. Outros tipos de filtros podem também ser usados, como indicado em Findikakis e Street (1982).

Levando em consideração a definição do operador de filtragem acima, Eq. (2.1.2), juntamente com a função filtro em nível de malha, Eq. (2.1.3), e aplicado às Eqs. (2.1), (2.2) e (2.3), obtêm-se, respectivamente, as seguintes equações filtradas para a Simulação de Grandes Escalas da turbulência:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \mathbf{r} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} \bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \mathbf{d}_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{m} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \mathbf{l} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} - \mathbf{t}_{ij} \right] - \bar{S}_{u_i} = 0 \quad (2.1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \bar{\mathbf{f}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} \bar{u}_j \bar{\mathbf{f}}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{x_j} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}}{\partial x_j} - \mathbf{t}_{jf} \right) - \bar{S}_f = 0 \quad (2.1.6)$$

sendo o tensor de tensões de escalas sub-malhas e o tensor de fluxo de quantidade escalar definidos, respectivamente, como:

$$\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{r}(\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (2.1.7)$$

$$\mathbf{t}_{jf} = \mathbf{r}(\overline{u_j \mathbf{f}} - \bar{u}_j \bar{\mathbf{f}}) \quad (2.1.8)$$

onde a barra sobre as variáveis indica o efeito da filtragem (filtro de malha); \bar{u}_i são as componentes do campo de velocidade das grandes escalas nas direções das coordenadas x_i , $\bar{\mathbf{f}}$, que representa o campo escalar das grandes escalas; \bar{S}_{u_i} e \bar{S}_f são, respectivamente, os termos fonte filtrados das equações de quantidade de movimento e de quantidade escalar; e \bar{p} é a pressão filtrada, sendo que as demais variáveis já foram anteriormente especificadas. O tensor de tensões sub-malha, \mathbf{t}_{ij} , e o tensor de fluxo de quantidade escalar, \mathbf{t}_{jf} , representam a interação física entre as estruturas de grandes escalas e as escalas sub-malhas não resolvidas.

Se a decomposição for aplicada à correlação de velocidade $\overline{u_i u_j}$, \mathbf{t}_{ij} pode ser escrito como a soma das tensões de Leonard, L_{ij} ; as tensões cruzadas, C_{ij} ; e as tensões de Reynolds, R_{ij} ; ou seja $\mathbf{t}_{ij} = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij}$ (Clark et al., 1979). As expressões para as tensões L_{ij} , C_{ij} e R_{ij} são as seguintes:

$$L_{ij} = \mathbf{r}(\overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j)$$

$$C_{ij} = \mathbf{r}(\overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i \bar{u}_j}) \quad (2.1.9)$$

$$R_{ij} = \mathbf{r} \overline{u'_i u'_j}$$

onde u'_i são as velocidades sub-malhas não resolvidas. As tensões de Leonard representam as interações entre as escalas filtradas, portanto podem ser calculadas explicitamente; as tensões

cruzadas correspondem à influência das escalas filtradas e escalas sub-malha; e as tensões de Reynolds são os efeitos das escalas sub-malha.

As equações diferenciais parciais, Eqs. 2.1.4, 2.1.5 e 2.1.6, não podem ser resolvidas numericamente, visto que o número de incógnitas é maior que o número de equações. Além disto, não são conhecidas relações com consistência física entre as diferentes escalas. Entretanto, para resolver este tipo de sistemas de equações, são formulados modelos que representam as interações entre as grandes e as pequenas escalas. Na literatura, este tipo de procedimento é denominado de “problema de fechamento”.

Devido à dificuldade de encontrar um único modelo matemático viável, que descreva todas as escalas de escoamentos turbulentos, frequentemente, é utilizada a metodologia de simular diretamente as grandes escalas (via equações diferenciais parciais filtradas) e de modelar as pequenas escalas. A modelagem das pequenas escalas é justificada fisicamente pelo comportamento destas escalas, isto é, são consideradas estatisticamente isotrópicas e mais homogêneas que as grandes escalas. Assim sendo, modelar as pequenas escalas é mais coerente do que modelar globalmente a multiplicidade de escalas dos escoamentos turbulentos.

A solução numérica das equações governantes filtradas, utilizadas na metodologia de Simulação de Grandes Escalas, requer um modelo de fechamento. Em vista disto, a seguir são apresentados dois modelos de viscosidade turbulenta.

2.1.1 Modelo de Smagorinsky

Considerando que as soluções das grandes escalas de escoamentos turbulentos, calculadas através de Simulação de Grandes Escalas, representam a maior parte do transporte turbulento, isto propicia que as pequenas escalas sejam modeladas, (Moin, 1982), uma vez que as pequenas escalas são estatisticamente mais homogêneas, além de apresentarem propriedades isotrópicas. Portanto, com base na relação entre as escalas de Kolmogorov e as grandes escalas, $\frac{e}{E} = \frac{1}{Re^{1/2}}$, uma menor parte da quantidade do movimento (energia) do sistema é modelada.

O modelo de viscosidade turbulenta de Smagorinsky (1963) tem sido freqüentemente utilizado para representar os efeitos das pequenas escalas em Simulações de Grandes Escalas. O modelo assume que a parte anisotrópica das tensões de Reynolds, de escalas sub-malha, são proporcionais ao tensor da taxa de deformação, definidas pela seguinte expressão:

$$\mathbf{t}_{ij} = -2 \mathbf{m} \bar{S}_{ij} \quad (2.1.10)$$

onde o tensor da taxa de deformação filtrada é dado por:

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.1.11)$$

e \mathbf{m} , que representa a viscosidade turbulenta das pequenas escalas, é definido por:

$$\mathbf{m} = r (C_s \bar{\Delta})^2 |\bar{S}| \quad (2.1.12)$$

sendo que a magnitude do tensor de tensões de deformação das grandes escalas é calculada por:

$$|\bar{S}| = \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (2.1.13)$$

onde C_s é a constante de Smagorinsky e $\bar{\Delta}$ representa a largura do filtro a nível de malha, o qual, normalmente, em 3D, é tomado como sendo $\bar{\Delta} = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$. É importante lembrar que a largura do filtro separa o espectro das grandes e pequenas escalas. O valor da constante de Smagorinsky pode variar de 0.1 a 0.22 e o valor a ser utilizado depende do tipo de escoamento. Detalhes podem ser encontrados em Smagorinsky (1963) e Deardorff (1971).

O tensor de fluxo de quantidade escalar (\mathbf{t}_{jf}) é definido pela seguinte expressa:

$$t_{jf} = -D_t \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \quad (2.1.14)$$

com:

$$D_t = \frac{\mathbf{m}_t}{\mathbf{s}_t} \quad (2.1.15)$$

onde \mathbf{s}_t é o número de Prandtl turbulento, quando a quantidade escalar for a temperatura, e \mathbf{s}_t é o número de Schmidt turbulento, quando se trata de concentração. Como o número de Prandtl turbulento (Pr_t) e o número de Schmidt turbulento (Sc_t) não variam significativamente de escoamento para escoamento, estes valores podem ser tomados como constantes. Conforme Brzoska et al. (1997), $Sc_t = 0,8$ e, segundo Lesieur M. (1987) e Silveira Neto et al. (1993), $Pr_t = 0,6$; Balas e Özhan (2000) consideram $Pr_t = 0,7$.

2.1.2 Modelo dinâmico

O modelo de viscosidade turbulenta de Smagorinsky mantém C_s constante no tempo e no espaço. No entanto, a constante pode e deve variar em diferentes aplicações, ficando a critério e do conhecimento do pesquisador decidir qual é o melhor valor a ser adotado.

De forma semelhante, no modelo dinâmico proposto por Germano et al. (1991) e modificado por Lilly (1992), é adotado o modelo clássico de Smagorinsky, porém, a constante passa a ser variável no tempo e no espaço. Em síntese, o modelo dinâmico fundamenta-se em avaliar os coeficientes do modelo de escalas inferiores à resolução da malha através de informações contidas no campo solucionado pela Simulação de Grandes Escalas. O modelo tem como meta calcular o coeficiente C de forma sistemática e sem interferência do usuário. Sob esta abordagem, a viscosidade turbulenta é definida como sendo:

$$\mathbf{m}_t = rC \bar{D}^2 / \bar{S} \quad (2.1.16)$$

onde C é um coeficiente em função do tempo e do espaço; $\bar{\Delta}$ é a largura do filtro no primeiro processo de filtragem, proporcional ao tamanho da malha; $|\bar{S}|$ representa um escalar, definido como a magnitude do tensor de tensões da taxa de deformação das grandes escalas da turbulência, conforme Eq. (2.1.10).

O modelo dinâmico caracteriza-se pela aplicação de dois processos de filtragem, com o objetivo de modelar as tensões de Reynolds de escalas sub-malha. Considerando as Eqs. (2.1.4) e (2.1.5), e aplicando um segundo processo de filtragem para o modelo dinâmico, obtém-se:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial t} + \mathbf{r} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \langle \bar{u}_i \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} \langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle) + \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x_j} \mathbf{d}_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{m} \left(\frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \bar{u}_j \rangle}{\partial x_i} \right) + \mathbf{l} \frac{\partial \langle \bar{u}_k \rangle}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} - T_{ij} \right] - \langle \bar{S}_{u_i} \rangle = 0 \quad (2.1.18)$$

com:

$$T_{ij} = \mathbf{r} \left(\langle \overline{u_i u_j} \rangle - \langle \bar{u}_i \rangle \langle \bar{u}_j \rangle \right) \quad (2.1.19)$$

onde $\langle . \rangle$ representa o segundo processo de filtragem espacial, denominado de filtro teste e T_{ij} é o tensor das tensões sub-teste.

O fechamento dos sistemas de equações gerados pelos dois diferentes processos de filtragem, filtro a nível de malha e filtro teste, são, respectivamente, os seguintes:

$$\mathbf{t}_{ij} = -2 \mathbf{r} C \bar{D}^2 / \bar{S} / \bar{S}_{ij} \quad (2.1.20)$$

e

$$T_{ij} = -2 \mathbf{rC} \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle^2 \langle \bar{\mathbf{S}} \rangle \langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \rangle \quad (2.1.21)$$

com:

$$\langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \bar{u}_j \rangle}{\partial x_i} \right) \quad (2.1.22)$$

e

$$\langle \bar{\mathbf{S}} \rangle = \left(2 \langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \rangle \langle \bar{\mathbf{S}}_{ij} \rangle \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.1.23)$$

onde $\langle \bar{\Delta} \rangle$ é a escala do filtro teste e as demais variáveis já foram anteriormente especificadas.

Observe-se que o filtro teste é sempre aplicado ao campo resolvido pela Simulação de Grandes Escalas. Assim, as quantidades $\langle \bar{\cdot} \rangle$ são obtidas filtrando (suavizando) as variáveis de grandes escalas do escoamento.

As tensões turbulentas resolvidas por este modelo, são as que representam as contribuições das tensões de escalas sub-malha, provenientes de escalas de comprimento entre o filtro de malha e o filtro teste, ou seja, das menores escalas resolvidas.

Como pode ser observado, o elemento chave da concepção do modelo dinâmico é a utilização dos dados espectrais contidos no campo resolvido das grandes escalas, introduzindo um novo processo de filtragem, com uma escala de comprimento maior que o filtro a nível de malha. Normalmente, o tamanho do filtro teste é o dobro do tamanho do filtro em nível de malha.

O modelo dinâmico de viscosidade turbulenta calcula, explicitamente, as tensões, através da expressão abaixo, denominada de identidade de Germano (Germano et al., 1991):

$$L_{ij} = T_{ij} - \langle \mathbf{t}_{ij} \rangle. \quad (2.1.24)$$

Substituindo a Eq. (2.1.7) e a Eq. (2.1.19) na Eq. (2.1.24), obtém-se:

$$L_{ij} = \mathbf{r} \left(\langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle - \langle \bar{u}_i \rangle \langle \bar{u}_j \rangle \right). \quad (2.1.25)$$

Combinadas as Eqs. (2.1.20), (2.1.21) e (2.1.24), um sistema de equações para C é obtido, conforme a seguinte expressão:

$$L_{ij} = -2C M_{ij} \quad (2.1.26)$$

com:

$$M_{ij} = \mathbf{r} \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle^2 \langle \bar{S} \rangle \langle \bar{S}_{ij} \rangle - \mathbf{r} \langle \bar{\mathbf{D}}^2 \bar{S} \rangle \langle \bar{S}_{ij} \rangle. \quad (2.1.27)$$

Para resolver o sistema de equações (2.1.26) de forma consistente e, ao mesmo tempo, minimizar o erro da solução, Lilly (1992) propôs a aplicação do método de aproximação por mínimos quadrado, obtendo assim a seguinte expressão:

$$C = -\frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}. \quad (2.1.28)$$

O modelo dinâmico tem várias características importantes, conforme apresentadas por Germano et al. (1991), Zang et al. (1993) e Piomelli (1993), tais como: (a) a viscosidade turbulenta é nula em escoamentos laminares; (b) a viscosidade turbulenta pode ser negativa, significando que o modelo é capaz de simular a transferência de energia das pequenas escalas para as grandes escalas (*backscatter*); (c) e o modelo tem um adequado comportamento assintótico próximo aos contornos sólidos. Este modelo tem sido utilizado para resolver uma grande variedade de escoamentos turbulentos.

Na próxima secção, são apresentadas as equações governantes para escoamentos turbulentos, onde são considerados os modelos de viscosidade turbulenta.

2.2 EQUAÇÕES PARA SIMULAÇÃO DE GRANDES ESCALAS COM MODELOS DE VISCOSIDADE TURBULENTA

As equações governantes para a Simulação das Grandes Escalas, mostradas anteriormente, incluindo-se os modelos de viscosidade turbulenta nas equações de quantidade de movimento e de quantidade escalar, são assim definidas:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \mathbf{r} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} \bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \mathbf{d}_{ij} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mathbf{m} + \mathbf{m}_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \mathbf{l} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \mathbf{d}_{ij} \right] - \bar{S}_{u_i} = 0 \quad (2.2.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r} \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathbf{r} \bar{u}_j \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D_{x_j} + D_t) \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right) - \bar{S}_f = 0 \quad (2.2.3)$$

onde a viscosidade turbulenta para o modelo clássico de Smagorinsky é definida como sendo:

$$\mathbf{m}_t = \mathbf{r} (C_s \bar{D})^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (2.2.4)$$

e, para o modelo dinâmico, é dada por:

$$\mathbf{m}_t = \mathbf{r} C \bar{D}^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (2.2.5)$$

com

$$D_t = \frac{\mathbf{m}_t}{\mathbf{s}_t} \quad (2.2.6)$$

Observe-se que, na Eq. (2.2.6), quando a quantidade escalar for a temperatura, S_t representa o número de Prandtl turbulento; e S_t é o número de Schmidt turbulento, quando for um problema de transporte de massa. Como os números de Prandtl e Schmidt turbulentos não variam significativamente de um escoamento para outro, estes valores são tomados como constantes. Sobre este assunto, detalhes podem ser encontrados em Lesieur (1987) e Silveira Neto (1993).

Como pode ser observado nas Eqs. (2.2.2) e (2.2.3), as variáveis que representam a difusividade molecular e turbulenta das respectivas equações são adicionadas, no entanto representam propriedades físicas diferentes. No caso, m é uma propriedade do fluido e m_t é uma propriedade do escoamento turbulento e pode variar localmente. De forma semelhante, para a equação de transporte da quantidade escalar, D_{x_i} é uma propriedade do fluido e D_t está vinculada à intensidade de turbulência e pode variar significativamente no interior do escoamento, e de um escoamento para outro.

No modelo dinâmico, as variáveis do primeiro processo de filtragem, filtro a nível de malha, são obtidas através da Simulação de Grandes Escalas e, em função destas variáveis, são obtidas as variáveis do segundo processo de filtragem, filtro teste. Neste trabalho, as variáveis do segundo processo de filtragem, para um específico nó ' i ', são obtidas através da média aritmética da soma das variáveis do primeiro processo de filtragem, que pertencem aos nós vizinhos ao nó ' i '.

Na literatura não existe uma regra rígida para obter as variáveis do segundo filtro. Findikakis e Street (1982) usam uma expressão em série de Taylor, e Petry (2002) utiliza somente os nós mais distantes dos elementos que compartilham o nó em que estão sendo calculadas as variáveis. Padilla e Silveira Neto (2004) analisam a influência de diferentes tipos de filtros.

Nas simulações com o modelo dinâmico, neste trabalho não foi considerada a transferência de energia das pequenas escalas para as grandes escalas, conforme Popielek et al. (2005), pois coeficientes de viscosidade turbulenta negativos podem levar a instabilidades numéricas.

3 ESTRATÉGIA DE ADAPTAÇÃO AUTOMÁTICA DE MALHAS

O objetivo da estratégia de adaptação automática de malhas é viabilizar a construção dinâmica de uma malha otimizada, em função das principais características físicas do problema simulado, a fim de conduzir a uma solução numérica de alta qualidade, a um custo computacional minimizado.

Neste sentido, o domínio computacional das aplicações são discretizados com elementos tetraédricos, em uma malha não estruturada; e um programa de elementos finitos é utilizado para obter as soluções numéricas. A escolha do método de elementos finitos e de malhas não estruturadas é devida à facilidade de acoplar uma estratégia de adaptação automática de malhas, com o código computacional utilizado para obter a solução numérica. Assim, as adaptações da malha podem ser realizadas simultaneamente e interativamente com a solução.

Em síntese, a estratégia de adaptação automática de malhas consiste em avaliar qualitativamente a solução numérica obtida sob uma malha inicial ou intermediária, através da utilização de indicadores de erro; e, em função da análise dos indicadores de erro, em identificar os elementos da malha que devem ser refinados ou desrefinados, com o propósito de melhorar a qualidade e a otimização da malha e, por consequência, em viabilizar a obtenção de uma solução numérica de melhor qualidade.

3.1 INDICADORES DE ERRO

Um bom esquema de adaptação de malhas necessita de adequados indicadores de erro, a fim de estudar o comportamento do escoamento e os fenômenos físicos envolvidos. Os indicadores de erro são calculados em função das variáveis primitivas das equações que governam o sistema estudado, como velocidades, pressão, temperatura, concentração etc. Normalmente, eles levam em consideração uma única variável, mas quando se deseja avaliar o problema de uma forma mais ampla, devido a sua complexidade, utilizam-se dois ou mais indicadores.

Enfatiza-se que os indicadores de erro servem de base para mapear globalmente o comportamento das soluções e, posteriormente, através da análise destes estimadores, para identificar as sub-regiões do domínio computacional, onde o indicador de erro possui maior intensidade e, nestes locais, aplicar um esquema de refinamento, com o propósito de obter uma solução de melhor qualidade. Por outro lado, quando o indicador de erro apresentar um comportamento suave, a malha pode ser desrefinada nestes locais.

Dentre os inúmeros indicadores de erro, são abordados os que levam em consideração as baixas velocidades, a mudança de direção de velocidade, os gradientes de velocidade, os gradientes de pressão, os gradientes de concentração e os gradientes de temperatura, semelhantes aos apresentados por Argyris et al. (1990). Estes são os principais fenômenos físicos que ocorrem nas aplicações aqui simuladas; portanto, devem ser convenientemente analisados, para identificar os locais onde os mesmos se apresentam com maior ou menor intensidade e aí aplicar o esquema de adaptação de malhas.

O indicador de erro, que identifica a variação da intensidade (baixas velocidades) dos vetores de velocidades no elemento, é definido por:

$$\mathbf{q}_i = \left(\sum_{j=1}^4 |u_{ij}| \right)^{-1} \quad i = 1, 2, \dots, nel \quad (3.1.1)$$

onde u_{i1} , u_{i2} , u_{i3} e u_{i4} são as resultantes das velocidades nodais do i -ésimo elemento da malha e nel é o número total de elementos.

A expressão que quantifica a mudança de direção da velocidade no interior do elemento é dada por:

$$\mathbf{q}_i = \sum_{j=1}^3 \mathbf{j}_{ij} \quad i = 1, 2, \dots, nel \quad (3.1.2)$$

onde \mathbf{j}_{ij} é o ângulo entre o vetor de velocidade resultante do vértice 1 com cada um dos vetores resultantes dos demais vértices do i -ésimo tetraedro.

O indicador de erro, que se fundamenta nos gradientes da velocidade, é calculado como segue:

$$\mathbf{q}_i = \left(\frac{\partial u_l}{\partial l} + \frac{\partial u_t}{\partial t} \right) h_i^2 \quad i=1,2,\dots,nel \quad (3.1.3)$$

onde l é a direção do vetor gradiente de velocidades, u_l e u_t são, respectivamente, as componentes de velocidade média ao longo de l e da normal t , e h_i (que, no caso deste trabalho, é a altura média do elemento) é o comprimento característico do i -ésimo elemento.

Também é utilizado o indicador de erro calculado em função dos gradientes de escalares no interior do elemento (como gradientes de temperatura, concentração, pressão, etc.), definido por:

$$\mathbf{q}_i = \left(\sum_{k=1}^4 \frac{\partial \mathbf{f}_k}{\partial x_j} \right)^{1/2} h_i^2 \quad i=1,2,\dots,nel \quad (3.1.4)$$

onde ϕ_k são os valores nodais da variável escalar, x_j representa as três direções cartesianas em que é decomposto o gradiente do escalar e h_i é o comprimento característico do i -ésimo elemento da malha.

Nas aplicações, muitas vezes são utilizados, independentemente, vários indicadores, onde cada um deles mapeia os fenômenos inerentes à variável que o define. O indicador de erro é calculado para todos os elementos da malha e, em seguida, o conjunto de dados é analisado por um critério de adaptação de malhas, com o propósito de identificar minuciosamente os elementos que devem ser refinados ou desrefinados.

3.2 CRITÉRIO DE ADAPTAÇÃO DE MALHAS

Uma das ferramentas-chave do esquema de adaptação de malhas é o critério de adaptação, que é responsável pela análise dos fenômenos físicos (representados pelos indicadores de erro) e, em função desta análise, identificar seletivamente os elementos da

malha onde os fenômenos são mais acentuados. Em consequência disto, estes elementos devem ser refinados, com o objetivo de melhorar a qualidade da malha e de proporcionar a obtenção de uma solução numérica com melhor precisão. Da mesma forma, é realizada uma análise para identificar os elementos onde os fenômenos físicos ocorrem suavemente e, nestas regiões, se for o caso, realizar um esquema de desrefinamento da malha, com o propósito de minimizar/otimizar o custo computacional.

Nos últimos anos, vários critérios de adaptação de malhas têm sido propostos e, entre eles, podem-se mencionar os apresentados por Oden et al. (1986), Devloo et al. (1987) e Ramakrishnan et al. (1990). Normalmente, para a maioria dos critérios, é calculado um valor máximo, ou um valor médio, ou uma norma dos dados gerados pelo indicador de erro (denominado de \mathbf{y}); em seguida, são analisados todos os elementos da malha e aqueles cujo indicador $\mathbf{q}_i > \mathbf{a}_1 \mathbf{y}$ é submetido a um esquema de refinamento e $\mathbf{q}_i < \mathbf{a}_2 \mathbf{y}$, a um esquema de desrefinamento, onde \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 representam dois parâmetros arbitrários.

No entanto, neste trabalho, é utilizado um critério de adaptação de malha que se fundamenta na ferramenta estatística de distribuições normais, como apresentado em Kallinderis e Vijayan (1993). O objetivo do critério de adaptação é quantificar o indicador de erro (que significa de forma direta quantificar a qualidade dos elementos da malha que contém tais indicadores) e, em função dele, refinar todo o elemento que possua um indicador de erro superior a um determinado limite, ou desrefinar todo o elemento que possua um indicador de erro inferior a um outro determinado limite, ambos calculados pelo próprio critério. Observe-se que, na análise estatística de distribuições normal aplicada ao processo de adaptação de malhas, quanto maior for o indicador de erro, menor é a qualidade do elemento que o contém e, quanto menor for o indicador de erro, mais excessiva é a qualidade do elemento. Neste critério de adaptação, primeiramente é calculado o desvio padrão (\mathbf{q}_{sd}) do conjunto de dados obtido via indicador de erro, conforme a seguinte expressão:

$$\mathbf{q}_{sd} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{nel} (\mathbf{q}_i - \bar{\mathbf{q}})^2}{nel}} \quad (3.2.1)$$

onde nel é o número de elementos da malhas, \mathbf{q}_i representa o indicador de erro do i -ésimo elemento e $\bar{\mathbf{q}}$ corresponde à média aritmética.

Este critério de adaptação de malhas considera que um indicador de erro é uma função contínua e pode ser representado pela função densidade da probabilidade de distribuições normais, dada pela expressão:

$$f(\mathbf{q}_i) = \frac{1}{\sqrt{2\mathbf{p}} \mathbf{q}_{sd}} e^{-\frac{(\mathbf{q}_i - \bar{\mathbf{q}})^2}{2\mathbf{q}_{sd}^2}}. \quad (3.2.2)$$

Levando em consideração as propriedades da função densidade da probabilidade, a qual pode ser representada graficamente, conforme Figura 3.2.1, pode-se identificar e classificar os elementos de uma malha em três grupos, em função dos indicadores de erro. O primeiro grupo é formado pelos elementos cujos indicadores de erro $\mathbf{q}_i < (\bar{\mathbf{q}} - \mathbf{a}_2 \mathbf{q}_{sd})$, são considerados de alta qualidade. O segundo grupo são os elementos de boa qualidade e se encontram na região central da curva, ou seja, $(\bar{\mathbf{q}} - \mathbf{a}_2 \mathbf{q}_{sd}) \leq \mathbf{q}_i \leq (\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{a}_1 \mathbf{q}_{sd})$. O terceiro grupo de elementos é formado pelos elementos de má qualidade, por apresentarem indicadores de erro $\mathbf{q}_i > (\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{a}_1 \mathbf{q}_{sd})$. As variáveis \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são parâmetro arbitrários.

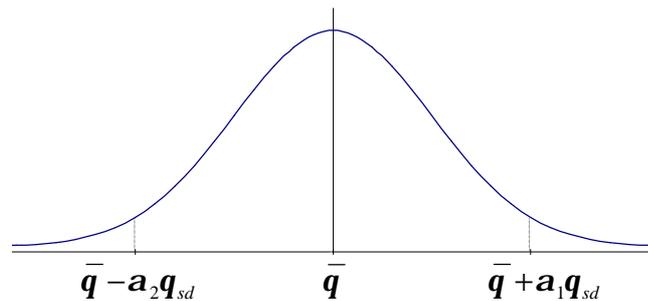


Figura 3.2.1: Função densidade de distribuições normais.

Assim sendo, a identificação dos elementos, que devem ser submetidos ao processo de refinamento, é realizada pela seguinte expressão lógica:

$$\mathbf{q}_i > (\bar{\mathbf{q}} + \mathbf{a}_1 \mathbf{q}_{sd}) \quad i=1,2,\dots,nel \quad (3.2.3)$$

isto é, todo o elemento i , cujo indicador de erro, q_i , satisfaz a Eq. (3.2.3), deve ser refinado. O parâmetro arbitrário, a_1 , controla qualitativa e quantitativamente os refinamentos. Note-se que, à medida que a_1 aumenta, menor é o número de elementos que deverão ser refinados, pois, teoricamente, os elementos a serem refinados encontram-se à direita de $\bar{q} + a_1 q_{sd}$.

Por outro lado, para identificar os elementos que devem ser desrefinados, é utilizada a seguinte expressão:

$$q_i < (\bar{q} - a_2 q_{sd}) \quad i=1,2,\dots,nel. \quad (3.2.4)$$

Significa que, todo o elemento que possui um indicador de erro inferior a $(\bar{q} - a_2 q_{sd})$ é submetido a um esquema de desrefinamento. Neste caso, o parâmetro arbitrário a_2 controla a qualidade excessiva dos elemento da malha.

A aplicação deste critério de adaptação de malhas não preconiza que a distribuição dos indicadores de erro deva ser normal. Pois, se a distribuição não for normal, isto significa que os percentuais de elementos à direita de $\bar{q} + a_1 q_{sd}$ e à esquerda de $\bar{q} - a_2 q_{sd}$ são diferentes daqueles previstos teoricamente para uma distribuição normal. Isto não tem nenhum significado indesejável, a não ser pela quantidade de elementos que devem ser, respectivamente, refinados e desrefinados.

Estatisticamente, os elementos que se encontram na região central da curva de distribuição normal são de tamanho ideal. O refinamento dos elementos à direita de $\bar{q} + a_1 q_{sd}$ tem o propósito de melhorar a qualidade dos novos elementos, de tal forma que passam pertencer ao grupo de elementos da região central da curva normal. Da mesma forma, os desrefinamentos dos elementos de excessiva qualidade, a esquerda de $\bar{q} - a_2 q_{sd}$, tem como meta enquadrar os elementos desrefinados na região central da curva de distribuição normal.

3.3 REFINAMENTO DE ELEMENTOS

Uma das principais fases da estratégia de adaptação de malhas é a subdivisão dos elementos. Cuidados especiais devem ser tomados para propiciar a construção de uma malha consistente e cujos elementos apresentem boa qualidade geométrica. A consistência está relacionada com a não existência de nós pendurados e a qualidade geométrica dos elementos, calculada através da Eq. (3.3.1) ou (3.3.2), está relacionada com a forma dos elementos. A qualidade geométrica está vinculada com a malha inicial, a qual se presume ser de boa qualidade, e com os tipos de refinamentos regulares e irregulares utilizados no esquema de adaptação da malha.

Seguindo estes cuidados, os elementos tetraédricos, identificados para serem refinados pela análise estatística do indicador de erro, são subdivididos em oito novos elementos. Esta subdivisão é chamada de refinamento regular do tipo 1:8. O elemento a ser refinado é chamado de “pai” e os elementos resultantes da subdivisão são chamados de “filhos”. A qualidade geométrica dos elementos filhos deve ser, sempre que possível, semelhante à do pai, do qual estes filhos se originaram.

O refinamento regular é realizado, conforme mostrado na Figura 3.3.1, através dos seguintes passos: (a) Primeiramente, as seis arestas do elemento pai são subdivididas pelo ponto médio, gerando seis novos nós. (b) Em seguida, com cada um dos nós dos vértices do elemento pai e três nós (recém criados) pertinentes às três arestas que compartilham cada um dos vértices, gera-se um elemento; assim, são criados os quatro primeiros elementos filhos. (c) Do octaedro restante, determina-se os dois nós que geram a menor diagonal. (d) Determinada a menor diagonal, que define uma nova aresta, os outros quatro elementos filhos ficam definidos geometricamente pelo arranjo dos nós do octaedro. A escolha da menor diagonal do octaedro central, como comenta Bornemann et al. (1993), leva a construir elementos de melhor qualidade geométrica.

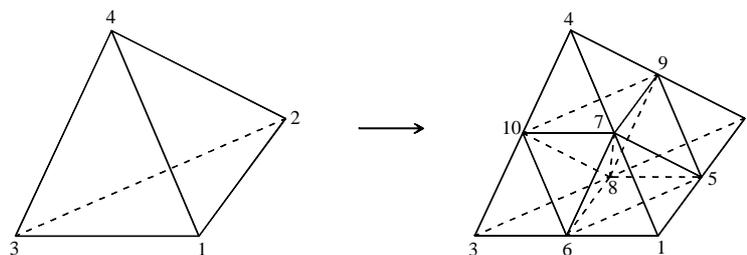


Figura 3.3.1: Refinamento regular do tetraedro.

Nas Figuras 3.3.2 e 3.3.3 são apresentados, separadamente, os elementos filhos, gerados por um refinamento regular.

No refinamento regular, arestas são subdivididas pelo ponto médio, por um nó. Isto significa que os elementos vizinhos, por estas arestas, posteriormente, também devem ser refinados. Em vista disto, toda a vez que uma aresta é subdividida, os elementos que compartilham dela recebem esta informação. Como pode ser observado, o controle da subdivisão de arestas e dos elementos que compartilham destas arestas deve ser rigoroso e bem estruturado, para não perder de vista as entidades (elementos, faces, arestas e nós) geradas no processo de refinamento.

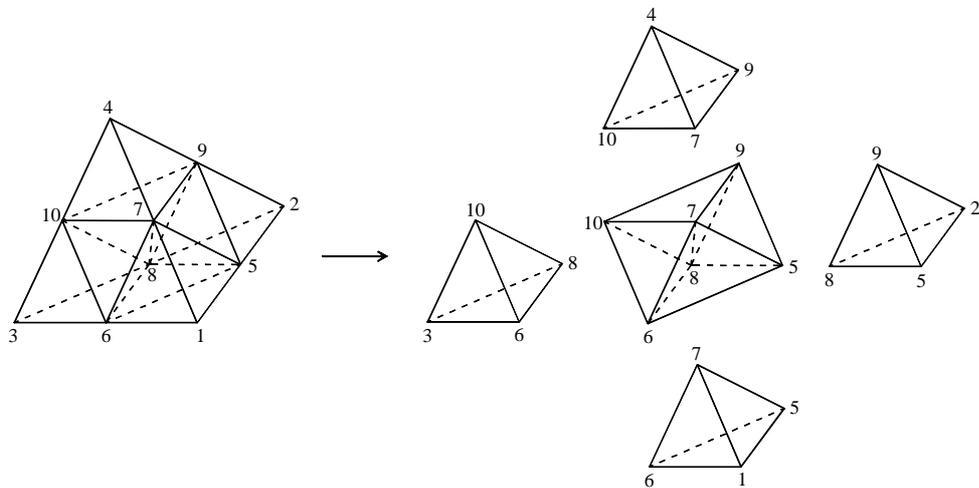


Figura 3.3.2: Refinamento regular, subdivisão dos quatro primeiros elementos filhos.

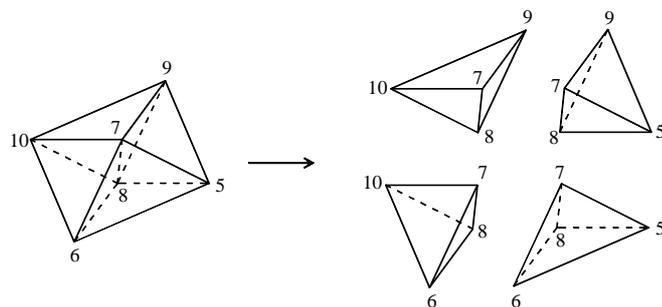


Figura 3.3.3: Subdivisão do octaedro central de um refinamento regular.

Uma vez efetuados os refinamentos regulares dos elementos identificados para tal, os demais elementos são visitados para identificar quais deles tiveram arestas subdivididas. Em seguida, repetidamente, enquanto houver elementos que ainda não foram refinados e possuem

quatro ou mais arestas subdivididas, estes elementos também são submetidos a um refinamento regular. É de notar que novos nós são criados, para realizar estes refinamentos. Informações adicionais são apresentadas na seção destinada à estrutura de dados.

Executados os procedimentos de refinamentos regulares, restam somente os elementos que possuem no máximo três arestas subdivididas. Nestes elementos são efetuados refinamentos denominados de irregulares, realizados sem criar nós. Os refinamentos irregulares são utilizados para o fechamento do esquema de refinamento, propiciando construir uma malha consistente e, ao mesmo tempo, suavizando a transição entre elementos refinados e não refinados.

Assim, se um elemento tem uma única aresta subdividida, então ele é refinado em dois novos elementos, denominado de refinamento irregular do tipo 1:2; um exemplo deste tipo de refinamento é representado na Figura 3.3.4a. Por outro lado, quando o elemento possui duas arestas subdivididas, duas situações podem ocorrer, as quais estão exemplificadas nas Figuras 3.3.4b e 3.3.4c. A primeira, se as duas arestas subdivididas pertencem a uma mesma face, é realizado o refinamento irregular do tipo 1:3. A segunda situação é quando as arestas subdivididas são opostas; neste caso, o refinamento irregular é do tipo 1:4. Finalmente, quando um elemento possui três arestas subdivididas, o refinamento irregular é do tipo 1:4. Três exemplos deste tipo de refinamento estão mostrados na Figura 3.3.5: (a) quando as três arestas subdivididas pertencem a uma mesma face; (b) quando as três arestas subdivididas possuem um nó comum; e (c) as demais situações.

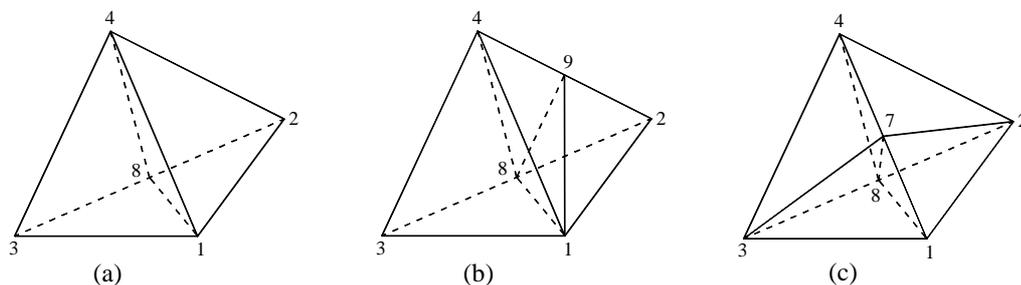


Figura 3.3.4: Refinamentos irregulares: (a) quando uma aresta é subdividida; (b) quando duas arestas de uma mesma face são subdivididas; e (c) quando duas arestas opostas são subdivididas.

Bey (1995) observa que, para o elemento tetraédrico, existem $2^6 - 1$ possíveis arranjos de refinamentos, os quais podem ser classificados em dez grupos (considerando a condição de

simetria). No presente trabalho, são implementados sete grupos, perfazendo um total de quarenta e um arranjos de refinamentos irregulares e mais o refinamento regular.

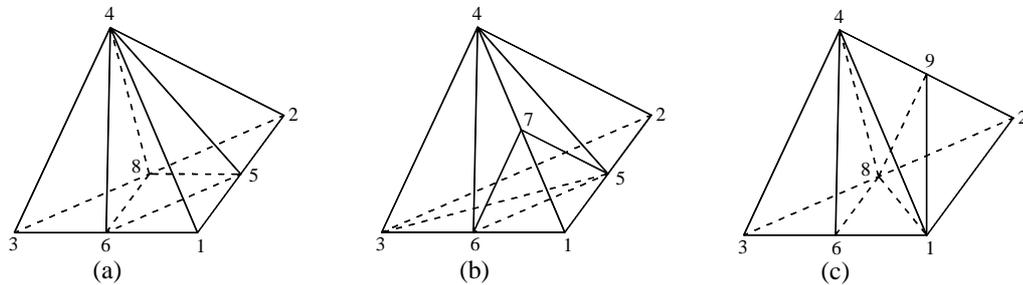


Figura 3.3.5: Refinamentos irregulares: (a) quando as três arestas de uma mesma face são subdivididas; (b) quando as três arestas subdivididas têm um ponto comum; e (c) demais casos, com três arestas subdivididas.

Com o esquema de refinamento adotado, tem-se conseguido malhas consistentes, de boa qualidade e sem propagação de refinamentos regulares e irregulares nas regiões de transição de densidade de elementos, isto é, sem efeito dominó. No entanto, os refinamentos irregulares produzem elementos de qualidade inferior, quando comparados com os elementos não refinados e com os elementos originados por refinamentos regulares. De qualquer forma, a qualidade destes elementos pode ser melhorada, aplicando um processo de realocação nodal, como apresentado a seguir.

A qualidade geométrica da face de um tetraedro, ou de um triângulo em 2D, conforme Lo (1989) e Nambiar et al. (1993), pode ser medida em função da seguinte expressão:

$$Q2D = \frac{4\sqrt{3}A}{\sum_{i=1}^3 l_i^2} \quad (3.3.1)$$

onde A é a área da face do tetraedro e l_i são os comprimentos das arestas da face do tetraedro.

De forma semelhante, a qualidade geométrica de um elemento tetraédrico pode ser quantificada conforme a expressão abaixo:

$$Q3D = \frac{36\sqrt{2}Vol}{\sum_{i=1}^6 l_i^3} \quad (3.3.2)$$

onde Vol é o volume do tetraedro e l_i são os comprimentos das arestas do tetraedro. Esta equação é normalizada de tal forma que resulta valores entre $0 \leq Q3D \leq 1$. Zero, quando o elemento é totalmente degenerado; e um, quando o tetraedro é equilátero. A Eq. (3.3.1) também é normalizada e possui as mesmas características da Eq. (3.3.2).

Para formar uma idéia correta da qualidade geométrica dos elementos e das faces do contorno das malhas, em função das expressões utilizadas para quantificar esta propriedade (respectivamente, através das Eqs. 3.3.2 e 3.3.1), na Figura 3.3.6 são apresentados o elemento tetraédrico e todos os tipos de subdivisões utilizados no esquema de refinamento deste trabalho.

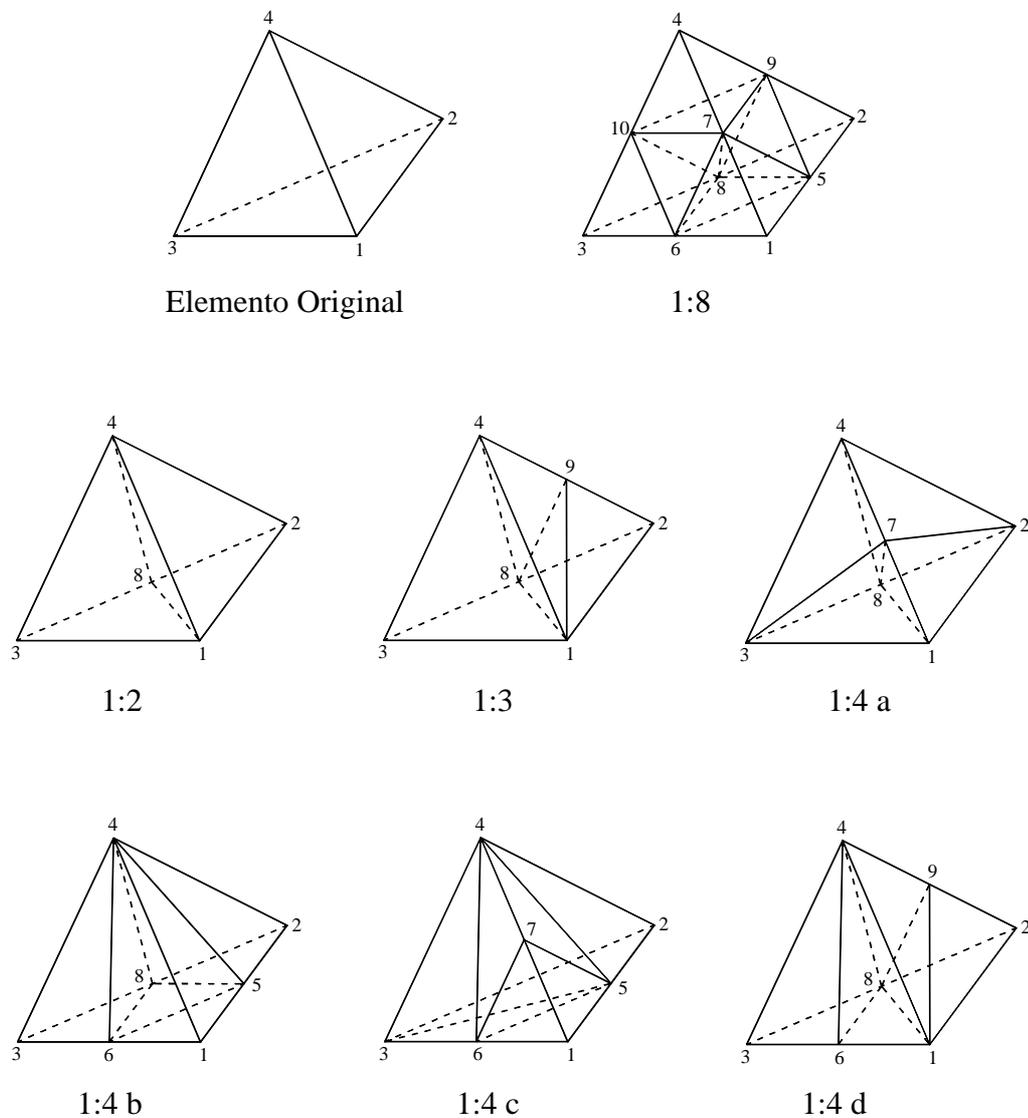


Figura 3.3.6: Elemento original e tipos de refinamentos utilizados no esquema de adaptação de malhas.

Na Tabela 3.3.1 são apresentados todos os tipos de subdivisões, respectivamente, com a quantidade de elementos gerados, a qualidade geométrica (Q3D), a qualidade geométrica das faces de contorno (Q2D), as médias da qualidade geométrica dos elementos (MQ3D) e a qualidade geométrica das faces de contorno (MQ2D).

O elemento inicial tem qualidade geométrica máxima, como pode ser verificado na Tabela 3.3.1. Em função disto, é importante associar a qualidade geométrica com a forma geométrica das faces e dos elementos gerados pela subdivisão e, através disto, construir um parâmetro de medida para analisar a qualidade de uma malha.

Tabela 3.3.1: Qualidade dos elementos e das faces de contorno, referentes aos tipos de refinamentos utilizados nas adaptações de malhas.

Tipo de subdivisão	Qdade de elementos	Q3D	Qdade de faces	Q2D	MQ3D	MQ2D
Elemento	1	1,000	4	1,000	1,000	1,000
1:2	2	0,678	2	1,000	0,678	0,833
			4	0,750		
1:3	1	0,678	2	1,000	0,569	0,794
	1	0,561	5	0,750		
	1	0,469	1	0,600		
1:4 a	4	0,516	8	0,750	0,516	0,750
1:4 b	1	0,646	4	1,000	0,582	0,850
	3	0,561	6	0,750		
1:4 c	1	1,000	4	1,000	0,641	0,805
	1	0,678	3	0,750		
	1	0,469	3	0,600		
	1	0,417	---	---		
1:4 d	2	0,561	2	1,000	0,515	0,770
	2	0,469	6	0,750		
	---	---	2	0,600		
1:8	4	1,000	16	1,000	0,883	1,000
	4	0,776				

Tomando-se o caso do refinamento regular do tipo 1:8, o qual é considerado a melhor subdivisão do elemento tetraédrico, verifica-se que são gerados quatro elementos de qualidade geométrica máxima e quatro elementos de qualidade inferior, mas assim mesmo são considerados de boa qualidade. O mesmo ocorre com os elementos da subdivisão 1:2; embora a qualidade geométrica pareça baixa eles são classificados como sendo de boa qualidade. Como pode ser verificado, as equações utilizadas para o cálculo das qualidades geométricas dos elementos e das faces são demasiadamente sensíveis às deformações nos elementos.

De qualquer forma, todo o esquema de adaptação de malhas, por subdivisão de elementos, tem como conseqüência a perda da qualidade dos elementos da malha. Contudo, este problema pode ser contornado, em parte, se aplicado um esquema de suavização.

Na Figura 3.3.7, é mostrado um tetraedro equilátero, o qual serviu de base para dois esquemas de refinamentos de fundamental importância. No primeiro, mostrado na Figura 3.3.8, foram realizados três níveis de refinamentos sucessivos (gerando as malhas: MRR1, MRR2 e MRR3, contendo cada uma delas, respectivamente, 8, 64 e 512 elementos), sendo que todos os elementos foram refinados regularmente, isto é, do tipo 1:8. Por outro lado, no segundo esquema (mostrado na Figura 3.3.9), o primeiro nível de refinamento é regular e nos demais níveis foram realizados refinamentos regulares somente no elemento do canto esquerdo da malha anterior e os demais refinamentos no nível o são em conseqüência do fechamento da malha, onde os refinamentos são irregulares, de tipos 1:2 e 1:4. As malhas refinadas MRR1, MRI2 e MRI3 contêm, respectivamente, 8, 20 e 32 elementos.

Com a intenção de analisar a qualidade geométrica dos elementos das malha refinadas, nos dois esquemas apresentados, foi utilizada a Eq. (3.3.2), a fim de calcular os valores de Q3D, para todos os elementos de cada uma das malhas. Na Tabela 3.3.2, são apresentados os valores de Q3D: máximo, médio e mínimo, do tetraedro inicial, MI, e em cada um das malhas refinadas regularmente (primeiro esquema), respectivamente, MRR1, MRR2 e MRR3. Observe-se que o menor valor de Q3D origina-se das subdivisões dos octaedros internos aos refinamentos do tipo 1:8. No entanto, estes elementos são considerados de boa qualidade, visto que uma pequena variação na geometria de um tetraedro equilátero para um não equilátero, o valor de Q3D decresce rapidamente.

Na Tabela 3.3.3, são apresentados os valores de Q3D: máximo, médio e mínimo do tetraedro inicial, MI e em cada uma das malhas refinadas regularmente e irregularmente

(segundo esquema), respectivamente, MRR1, MRI2 e MRI3. Como se pode observar, a qualidade da malha, quando contém refinamentos irregulares do tipo 1:2 e 1:4, apresenta uma menor qualidade, de qualquer forma, é uma malha de boa qualidade e pode ser utilizada, sem qualquer restrição, em simulações de escoamentos de fluidos.

Para um melhor detalhamento, na Tabela 3.3.4, é apresentada a qualidade geométrica dos elementos da malha MRI2. Nos refinamentos regulares, como pode ser observado nos dados da Tabela 3.3.4, os quatro elementos filhos, gerados a partir dos vértices do tetraedro pai, sempre têm qualidade geométrica superior àqueles elementos gerados pela subdivisão do octaedro central, do refinamento do tipo 1:8.

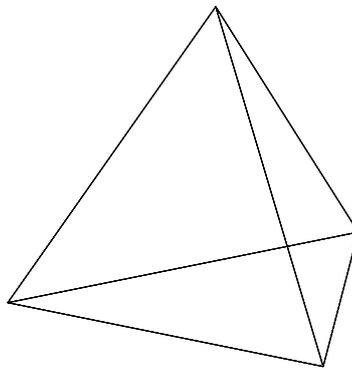


Figura 3.3.7: Tetraedro inicial.

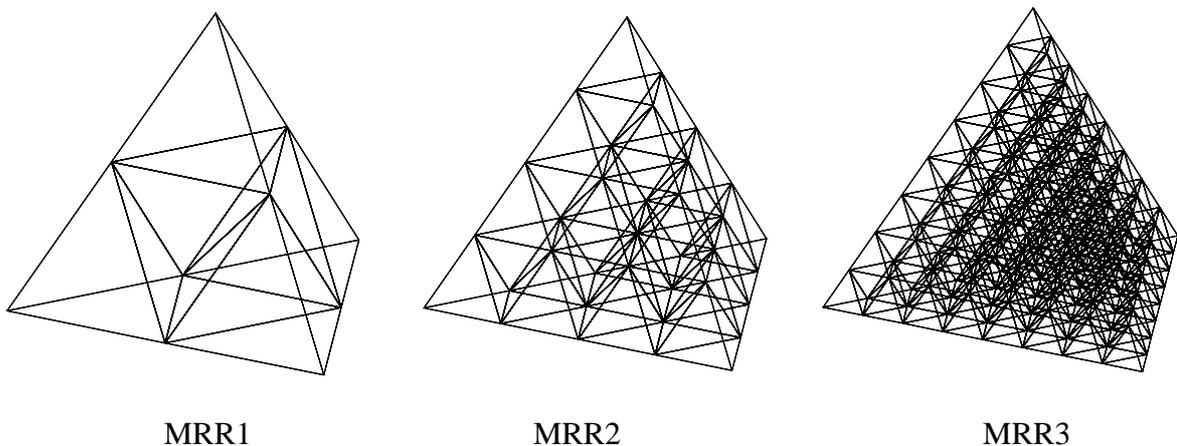


Figura 3.3.8: Malhas refinadas regularmente, respectivamente, com um, dois e três níveis de refinamentos.

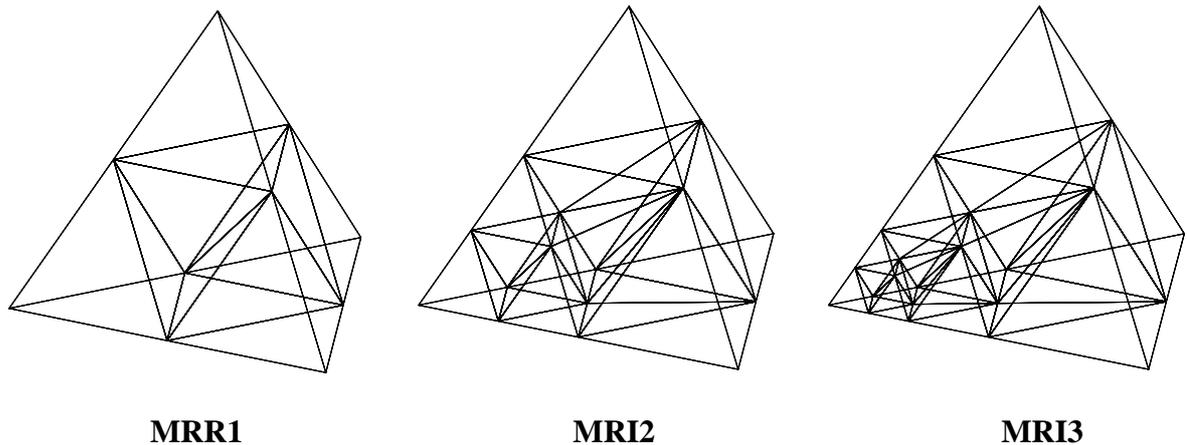


Figura 3.3.9: Malhas refinadas, respectivamente, com um, dois e três níveis de refinamentos.

Tabela 3.3.2: Qualidade geométrica dos elementos das malhas refinadas regularmente.

Q3D	MI	MRR1	MRR2	MRR3
Máximo	1,000	1,000	1,000	1,000
Médio	---	0,883	0,854	0,847
Mínimo	---	0,766	0,766	0,766

Tabela 3.3.3: Qualidade geométrica dos elementos das malhas refinadas regularmente e irregularmente.

Q3D	MI	MRR1	MRI2	MRI3
Máximo	1,000	1,000	1,000	1,000
Médio	---	0,883	0,718	0,677
Mínimo	---	0,766	0,250	0,250

Tabela 3.3.4: Qualidade geométrica dos elementos da malha MRI2.

Nº de elementos	Q3D	Origem dos elementos
7	1,000	Dos refinamentos regulares do tipo 1:8.
5	0,766	Dos refinamentos dos octaedros (1:8).
2	0,580	Do refinamento irregular do tipo 1:2.
2	0,428	Do refinamento irregular do tipo 1:2.
2	0,438	Do refinamento irregular do tipo 1:4.
1	0,393	Do refinamento irregular do tipo 1:4.
1	0,250	Do refinamento irregular do tipo 1:4.

Observação: Em MRI1 são gerados 4 elementos com Q3D = 1,000 e 4 elementos com Q3D = 0,766.

3.4 DESREFINAMENTO DE ELEMENTOS

Em escoamentos de fluidos com soluções transientes, os fenômenos físicos variam no espaço e no tempo. Assim sendo, quando é utilizada uma estratégia de adaptação, a malha deve ser constantemente ajustada, em função da variação dos fenômenos físicos que estão sendo simulados. Logo, para manter uma malha otimizada, ela deve ser atualizada freqüentemente, através de desrefinamentos, onde uma alta densidade de elementos é desnecessária e através de refinamentos, onde se faz necessária uma malha mais fina.

As regiões de refinamentos e de desrefinamentos são mapeadas através de indicadores de erro, ou seja, onde os indicadores de erro são elevados, são realizados refinamentos e onde são baixos, os elementos são desrefinados. Os refinamentos visam à qualidade da solução numérica, enquanto os desrefinamentos têm o propósito de minimizar o custo computacional.

Observe-se que, na estratégia de adaptação de malhas, são desrefinados somente os elementos que anteriormente foram refinados. Os desrefinamentos são realizados para o conjunto de elementos originados pelo refinamento de um único elemento, ou seja, para um conjunto de elementos (filhos), que têm um pai comum a todos. Ainda, para desrefinar, é necessário que: (a) todos os irmãos estejam marcados para serem desrefinados; (b) todos os irmãos sejam elementos terminais (não terem filhos). Detalhes adicionais a respeito do esquema de desrefinamento são apresentados na secção que trata da estrutura de dados.

3.5 REALOCAÇÃO NODAL

Os refinamentos irregulares, do tipo 1:2, 1:3 e 1:4, realizados nas regiões de interface de elementos refinados e não refinados, podem conduzir à geração de elementos distorcidos e ainda podem levar a uma acentuada variação de elementos de diferentes tamanhos. Isto pode prejudicar a qualidade da malha pós-refinada e, conseqüentemente, a precisão da solução numérica.

Levando em consideração estas questões, ao processo de adaptação de malhas é incorporada a técnica de suavização laplaciana, com restrições (*smart Laplacian smoothing or constrained Laplacian smoothing*), conforme Freitag e Ollivier-Gooch (1996) e Zhou e Shimada (2000), usando a área como função peso, quando se trata da entidade face, ou o

volume, quando a entidade é um elemento. Aqui, este processo visa melhorar a qualidade geométrica dos elementos da malha, bem como suavizar a transição entre elementos de diferentes tamanhos.

A cada nível de refinamento executado, a nova malha gerada é submetida ao processo de realocação nodal. Para evitar que o processo altere o domínio computacional e as condições de contorno do problema, são excluídos da realocação os nós localizados em arestas e vértices do domínio, ou seja, todos os nós que, por algum motivo, não devem ser alteradas suas posições. No entanto, nós que se encontram no interior dos planos de contorno e não apresentam restrições são incluídos no processo de realocação nodal. Entretanto, estes nós de contorno podem ser movimentados somente sobre o plano a que pertencem.

Considerando as restrições, o processo de realocação nodal segue, em síntese, o seguinte esquema: (a) inicialmente, são realocados os nós das faces dos elementos que pertencem a planos de contorno; e (b) em seguida, são realocados os nós dos tetraedros, que se encontram no interior do domínio computacional. Ressalta-se que são realizadas realocações nodais no espaço 2D, quando são movimentados os nós das faces dos tetraedros, que se encontram nos planos de contorno; e no espaço 3D, as realocações são realizadas quando os nós se encontram no interior do domínio computacional.

A implementação do processo de realocação nodal é organizada em uma seqüência de passos de realocação, onde, em cada passo, um único nó é movimentado. Para realocar um nó, é utilizado um esquema denominado de suavização laplaciana com restrições, a qual tende a uniformizar as áreas (em 2D) ou os volumes (em 3D) das entidades (face do tetraedro ou elemento tetraédrico, respectivamente) que compartilham um mesmo nó. Este esquema tem sua origem na proposta de Wilnslow (1967), para suavizar malhas bidimensionais com um esquema de realocação centroidal.

Definindo as coordenadas da posição de um nó P, por X_P , a nova posição do nó é dada pela seguinte expressão:

$$X_P = \frac{\sum_{i=1}^{ne} f_i X_i}{\sum_{i=1}^{ne} f_i} \quad (3.5.1)$$

onde ne é o número de entidades que compartilham o nó P , f_i é uma função peso e X_i representa as coordenadas do centróide da i -ésima entidade. As entidades no espaço 2D e 3D são, respectivamente, a face de um tetraedro e o próprio tetraedro. Da mesma forma, a função peso é a área da face ou o volume do tetraedro, respectivamente, em 2D e 3D.

É importante enfatizar que, para evitar que a técnica de suavização laplaciana com restrição gere malhas inconsistentes, o nó P é movimentado para a nova posição X_P , somente se não gerar elementos inversos ou inválidos.

De forma sincronizada, toda a realocação nodal é sucedida pela interpolação das variáveis inerentes ao nó movimentado. A interpolação para recalcular as variáveis dos nós realocados é em função das variáveis nodais da entidade (face ou elemento) que abriga a nova posição do nó, a qual é calculada com a seguinte expressão:

$$V_p = \frac{\sum_{i=1}^m g_i V_i}{\sum_{i=1}^m g_i} \quad (3.5.2)$$

onde V_p representa o valor da variável que está sendo interpolada; V_i são os valores nodais da variável, correspondentes aos nós da entidade que abriga a nova posição do nó; nn é o número de sub-áreas ($nn = 3$) ou sub-volumes ($nn = 4$); e g_i , quando a entidade é uma face (2D), representa as três sub-áreas formadas pelas arestas da face que abriga a nova posição do nó e os segmentos de reta que unem seus vértices ao nó; quando a entidade é um elemento (3D), g_i representa os quatro sub-volumes formados pelas arestas de elemento que abriga a nova posição do nó e os segmentos de reta que unem seus vértices ao nó. Observe-se que o nó i , em 2D, é oposto à sub-área (g_i) e, em 3D, é oposto ao sub-volume (g_i).

Cuidados especiais são tomados em nós que definem o domínio computacional e as condições de contorno em locais fixos, para que não sejam submetidos ao esquema de suavização. As informações referentes aos nós, que podem ou não ser realocados, encontram-se na estrutura de dados do solver, que define o tipo de cada um dos nós da malha.

Para efetuar uma melhor suavização, o procedimento de realocação nodal pode ser executado várias vezes. No entanto, se o número de repetições for excessivo, pode levar à distorção das entidades em algumas regiões da malha.

Para exemplificar, na Figura 3.5.1, é mostrada uma esfera grosseiramente discretizada, a qual serviu de base para sucessivos níveis de refinamentos. Com o propósito de evidenciar os efeitos do processo de realocação nodal sobre as malhas refinadas, na Figura 3.5.2, são apresentadas malhas de três sucessivos níveis de refinamentos, respectivamente, MR1, MR2 e MR3. Da mesma forma, na Figura 3.5.3, são apresentadas as mesmas malhas, entretanto, suavizadas, respectivamente, MRS1, MRS2 e MRS3. Visualmente, observa-se que as malhas suavizadas apresentam uma melhor uniformização de faces.

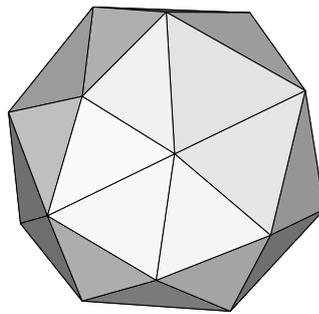


Figura 3.5.1: Malha inicial de uma esfera.

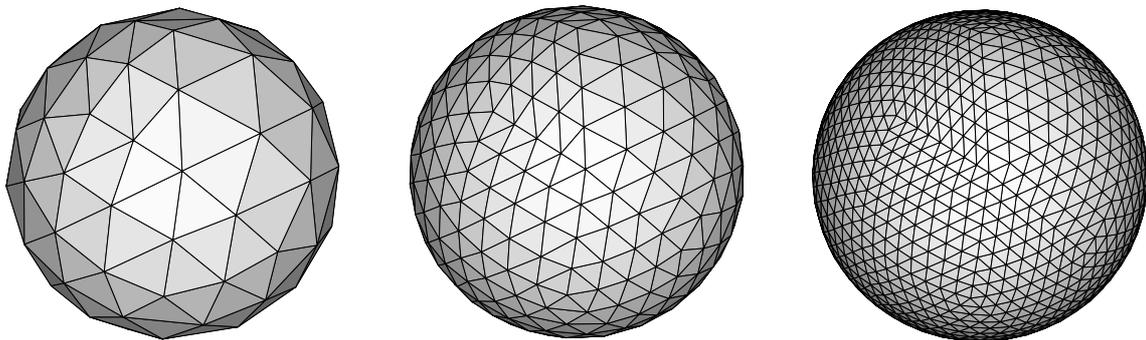


Figura 3.5.2: Os três níveis de refinamentos sucessivos da malha de uma esfera, respectivamente, MR1, MR2 e MR3.

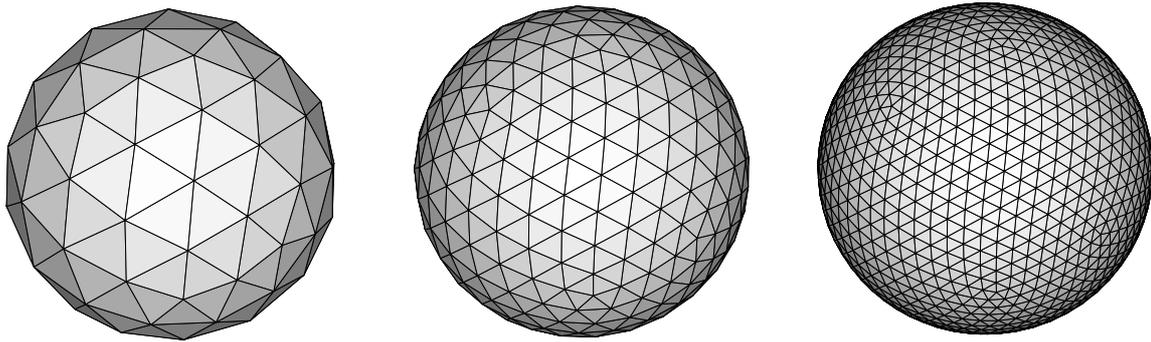


Figura 3.5.3: Os três níveis de refinamentos sucessivos da malha e suavizados de uma esfera, respectivamente, MRS1, MRS2 e MRS3.

Na Tabela 3.5.1, são apresentados os valores médios, que quantificam a qualidade geométrica dos elementos tetraédricos e das faces dos elementos da superfície da esfera, calculados, respectivamente, através das Eqs. (3.3.2) e (3.3.1).

Tabela 3.5.1: Qualidade média dos elementos das malhas e das faces dos elementos da superfície da esfera.

Entidade	MI	MR1	MR2	MR3	MRS1	MRS2	MRS3
Elementos	0,894	0,769	0,736	0,728	0,842	0,854	0,863
Faces	0,959	0,957	0,957	0,957	0,985	0,991	0,993

Analisando os dados da Tabela 3.5.1, verifica-se que as malhas suavizadas apresentam uma melhor qualidade geométrica do que nas malhas refinadas, visto que os valores que as quantificam são mais elevados. Observe-se que a qualidade geométrica dos elementos da malha, após aplicados os refinamentos, perde qualidade. Isto é devido aos refinamentos dos octaedros centrais das subdivisões do tipo 1:8 (como mostrado na Seção 3.3) e em função das subdivisões das arestas que se localizam na superfície da esfera, pois os novos nós gerados devem ser deslocados para representar corretamente a superfície do contorno. No entanto, o processo de suavização contribui de forma significativa no sentido de melhorar a qualidade geométrica dos elementos da malha.

3.6 ESTRUTURA DE DADOS

A eficiência de um esquema de adaptação de malhas está intimamente vinculada à estrutura de dados, a qual permite definir e gerenciar a conectividade entre as entidades de uma malha: células, faces, arestas e nós. As células são elementos tetraédricos, que possuem quatro faces, seis arestas e quatro nós. As faces podem ser definidas por três arestas ou três nós. As arestas são representadas por dois nós, localizados nas suas extremidades.

Na literatura, são apresentadas diferentes estruturas de dados para a adaptação de malhas tridimensionais, mas com poucos detalhes. Dentre elas, destaca-se as apresentadas por Kollinderis e Vijayan (1993), Biswas e Strawn (1994), Connel e Holmes (1994), Bey (1995), Speares e Berzins (1997) e Grosso et al. (1997).

De qualquer modo, é utilizada uma estrutura de dados semelhante às demais, mas que possui características apropriadas ao esquema de adaptação de malhas e ao código computacional, como apresentada em Popiolek e Awruch (2005). Buscou-se organizar a estrutura de dados básica, de definição de domínios computacionais de malhas, com o objetivo de minimizar a utilização de matrizes e vetores adicionais, os quais viabilizam o gerenciamento dos processos de refinamento e de realocação nodal. A estrutura de dados e os algoritmos para a adaptação de malhas são compatíveis com todas as linguagens de programação, embora tenham sido implementados em FORTRAN.

O vetor, $KONE(4*nel)$, contém as conectividades dos elementos da malha, em função de nós, onde nel é o número total de elementos. Cada tetraedro possui quatro registros em $KONE$, sendo que o primeiro registro do elemento corresponde ao nó local 1, o segundo ao nó local 2, e assim por diante, até o nó local 4. O primeiro elemento da malha ocupa as posições globais (1, 2, 3 e 4) de $KONE$, o segundo as posições globais (5, 6, 7, e 8) e assim segue até o último elemento da malha. É importante salientar estas observações, pois, embora óbvias, são de grande importância no contexto da estrutura de dados local e global. Na numeração local dos nós de um tetraedro, é considerada a regra da mão direita. Isto é, acompanhando os nós das posições locais 1, 2 e 3, que formam uma face, geometricamente o quarto nó se encontra na direção do polegar, conforme numeração dos nós do tetraedro mostrada na Figura 3.3.1.

Como pode ser observado na Figura 3.6.1, cada uma das seis arestas de um tetraedro é definida por dois nós, respectivamente, pelos nós das posições locais 1-2, 1-3, 1-4, 2-3, 2-4 e 3-4 dos registros do elemento, em $KONE(4*nel)$. O número da aresta local obedece à mesma seqüência, ou seja, a aresta 1 do elemento é definida pelos nós locais 1-2, a aresta 2 pelos nós 1-3 e assim segue até a aresta 6.

Por conveniência, as faces são definidas em função de arestas. Para efeito de controle, geometricamente, a face 1 é aquela oposta ao primeiro nó local da conectividade do elemento, a face 2 é oposta ao nó 2 e assim por diante. Assim sendo, as faces locais de um elemento são compostas, respectivamente, pelas arestas 4-5-6, 2-6-3, 1-3-5 e 1-4-2, definidas acima. Observe-se que a seqüência de numeração de arestas de uma face também obedece à regra da mão direita, e o polegar aponta na direção do nó oposto à face.

A matriz $KARES(na,2)$ é criada para armazenar as informações das arestas da malha, onde cada uma é definida por dois nós. O índice na representa o número total de arestas. Cada linha da matriz armazena uma aresta, ou seja, os seus dois nós. Para facilitar a pesquisa, os dois nós da aresta são armazenados em ordem crescente. Esta matriz se faz necessária para agilizar a busca dos nós que compõem uma aresta, no momento de realizar os refinamentos.

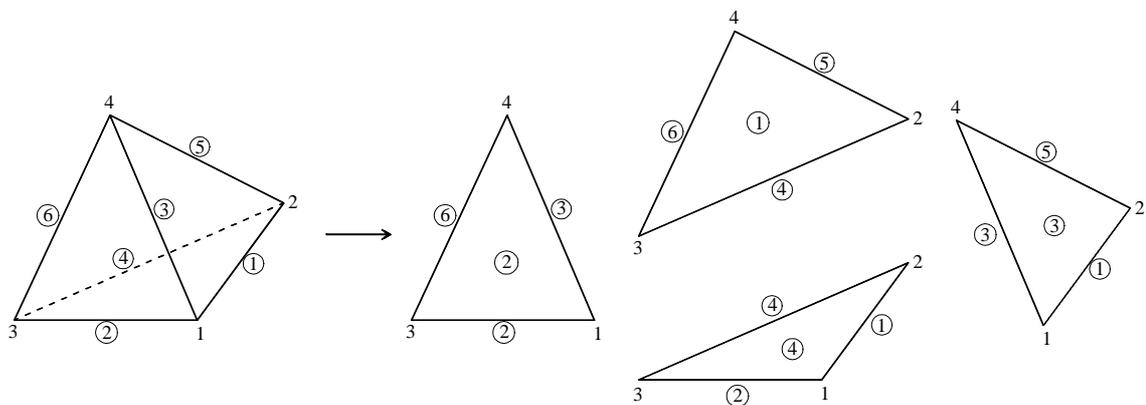


Figura 3.6.1: Definição das entidades da estrutura de dados: elementos, faces, arestas e nós.

Para obter uma boa performance nos refinamentos, é criado um vetor, $KONEA(6*nel)$, contendo a conectividade dos elementos em função de arestas, as quais estão armazenadas em $KARES(na,2)$. Embora pareçam desnecessárias, as conectividades dos elementos com as entidades arestas são fundamentais no gerenciamento das adaptações, como poderá ser

percebido a seguir. Nesta matriz, cada elemento possui seis registros, onde cada um deles contém o número da aresta global.

A matriz $KARELE(na,j)$ contém os elementos que compartilham de uma mesma aresta. A linha representa o número de arestas global de $KARES(na,2)$. Na primeira coluna, $j = 1$, é armazenado o número de elementos vizinhos da aresta e nas demais colunas são armazenados os números dos elementos vizinhos à aresta. Assim fica evidenciado o quanto é facilitada a identificação dos elementos que serão afetados, quando uma aresta é subdividida na estratégia de adaptação de malhas.

Para um elemento i ser refinado regularmente, basta visitar $KONEA(6*nel)$, para identificar as seis arestas a serem subdivididas pelo ponto médio. Tomando a aresta global k , diretamente obtêm-se os dois nós da aresta, visitando $KARES(k,2)$. Também se obtém os elementos que compartilham da aresta por uma simples busca, na linha k de $KARELE(k,j)$. Neste exemplo simples, é mostrado, sucintamente, como funciona a estrutura de dados, onde os vetores e matrizes se encontram eficientemente interligados e as buscas de informações relativas aos elementos da malha tornam-se uma simples visita aos vetores e matrizes.

Para identificar os elementos que devem ser refinados, foi criado um vetor denominado $KREFI(nel)$, onde nel representa o número total de elementos da malha. O valor atribuído a um elemento i tem o seguinte significado, no esquema de refinamento:

- 0 – o elemento i não está identificado para refinar;
- 1 – o elemento i possui uma aresta subdividida;
- 2 – o elemento i possui duas arestas subdivididas;
- 3 – o elemento i possui três arestas subdivididas;
- 4 – o elemento i possui quatro arestas subdivididas;
- 5 – o elemento i possui cinco arestas subdivididas;
- 6 – o elemento i possui seis arestas subdivididas;
- 8 – o elemento i deve ser subdividido por um refinamento regular;
- 8 – o elemento i já foi subdividido por um refinamento regular.

Através do vetor $KREFI(nel)$, obtém-se, a qualquer momento, o mapeamento do andamento dos refinamentos, bem como dos futuros passos para completar o esquema de refinamento.

A geração de novos nós, devido à subdivisão de aresta, é controlada por uma matriz, $KONTR(nel,6)$, zerada inicialmente. No refinamento regular, sempre que uma aresta local (k) de um elemento (i) é subdividida pelo ponto médio, este nó recebe um número, que é armazenado em $KONTR(i,k)$. O mesmo procedimento é feito para os demais elementos que compartilham da aresta subdividida. Além disto, para os elementos vizinhos, é contada em $KREFI(nel)$, na respectiva posição do elemento, mais uma aresta local subdividida, devido ao refinamento regular.

Como pode ser observado, $KREFI(nel)$ diz respeito a quantas arestas de um determinado elemento foram subdivididas, ou se o elemento deve ser subdividido por um refinamento regular ou já foi refinado. $KONTR(nel,j)$ contém quais das arestas locais do elemento foram subdivididas (aquelas que têm um valor diferente de zero, que é o número do nó que subdivide a aresta) e os respectivos números dos nós que as subdividiram.

O vetor $KDESREFI(nel)$ serve para identificar os elementos da malha que podem ser desrefinados.

A hierarquia dos elementos da malha é construída em uma matriz denominada $KELHIE(nem,11)$, onde cada linha da matriz contém os dados de um único elemento. Assim, para cada elemento da malha, é armazenado: (a) na primeira posição, o número do elemento pai; (b) na segunda posição, o nível de refinamento; (c) na terceira posição, o número de filhos; e (d) nas demais posições, os números dos elementos filhos. Caso o dado não exista, é armazenado o dígito 0 (zero) como, por exemplo, se o elemento faz parte da malha inicial, são zerados o número do pai, o nível de refinamento e as demais variáveis.

No esquema de desrefinamento, é de vital importância que se mantenha permanentemente ativa a hierarquia elementos da malha, originada devido aos refinamentos e desrefinamentos sucessivos. Isto porque a análise para o desrefinamento de elementos é extremamente criteriosa e deve ser levantado o histórico da situação de cada um dos elementos da malha. Um conjunto de elementos só pode ser desrefinado se todos os irmãos

estão marcados para desrefinar e são terminais. Note-se que somente os elementos gerados por um refinamento podem ser desrefinados.

A estrutura de dados acima é suficiente para realizar, de forma eficiente e rápida, o esquema de refinamento e desrefinamento de malhas. No entanto, para o processo de realocação nodal, é criada uma matriz, $KNOELE(no,j)$, contendo o número de elementos que compartilham de um determinado nó. A linha representa o número do nó. Na primeira coluna, é contado o número de elementos que compartilham o nó e, nas demais colunas, são armazenados os números dos elementos.

Os vetores utilizados para armazenar as coordenadas locais dos nós, as variáveis da dinâmica do escoamento e as demais variáveis, embora utilizadas nas interpolações, não são detalhadas aqui, por não pertencerem exclusivamente ao esquema de adaptação de malhas.

3.7 ALGORITMO PARA ADAPTAÇÃO AUTOMÁTICA DE MALHAS

A malha inicial do domínio computacional da aplicação, a qual serve de base para o esquema de adaptação, é construída através de gerador de malhas tridimensionais. É fundamental que a malha inicial defina adequadamente a configuração geométrica do domínio computacional e, ao mesmo tempo, permita evidenciar as principais características do escoamento, para que se possa iniciar o cálculo da solução e, oportunamente, aplicar o esquema de adaptação de malhas.

No esquema de adaptação, a solução numérica obtida sob uma malha é avaliada através de indicadores de erro e, em função destes indicadores, são marcados os elementos que devem ser refinados ou desrefinados, conforme o caso. Todo o elemento que possui um indicador de erro superior a um dado limite é marcado para ser refinado, com o propósito de melhorar a qualidade da solução numérica. Por outro lado, todo o elemento que possuir um indicador de erro inferior a um outro dado limite e foi gerado por um refinamento é marcado para ser desrefinado, com o interesse de minimizar o custo computacional.

Neste sentido, no esquema de adaptação de malhas, quando são realizados refinamentos e desrefinamentos, o processo é conduzido conforme o seguinte algoritmo:

1. gerar uma malha inicial;
2. calcular uma solução numérica inicial;
3. calcular os indicadores de erro para todos os elementos da malha;
4. em função dos indicadores de erro e do critério de adaptação, marcar os elementos que devem ser refinados e os que podem ser desrefinados;
5. primeiro, realizar os desrefinamentos e depois, os refinamentos;
6. suavizar os elementos da nova malha;
7. calcular uma nova solução numérica;
8. se a solução for de qualidade, ir ao passo 9, caso contrário, voltar ao passo 3;
9. documentar a solução numérica;
10. fim do algoritmo.

Em síntese, estes são os procedimentos gerais utilizados para obter soluções numéricas, através da utilização da estratégia de adaptação automática de malhas, desenvolvida neste trabalho. No algoritmo acima, quando o processo desrefinamento não for utilizado, basta omiti-lo.

4 ALGORITMO NUMÉRICO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES

As equações governantes, para a simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos tridimensionais de fluidos newtonianos levemente compressíveis, utilizando modelos de viscosidade turbulenta, podem ser expressas pelas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de quantidade escalar, respectivamente, como se apresentam as Eqs. (2.2.1), (2.2.2) e (2.2.3).

A conservação de massa para fluidos levemente compressíveis, assumindo entropia constante, pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} = - \frac{\partial U_i}{\partial x_i} \quad (4.1)$$

onde $U_i = \mathbf{r} \bar{u}_i$.

Para obter o algoritmo numérico, utilizando o esquema de Taylor-Galerkin de dois passos, inicialmente, as equações da conservação de quantidade de movimento e quantidade escalar são expandidas em série de Taylor e, posteriormente, é aplicado à discretização espacial, usando o Método de Elementos Finitos no contexto do esquema clássico de Budnov-Galerkin. De forma semelhante ao apresentado por Zienkiewicz e Condina (1995), para o primeiro passo de tempo $(t + \Delta t / 2) = n\Delta t + \Delta t / 2 = (n + 1/2)\Delta t$, a expansão das variáveis U_i em série de Taylor (excluindo termos de segunda ordem e de ordem superior) é dada por:

$$U_i^{n+1/2} = U_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial U_i^n}{\partial t}. \quad (4.2)$$

Usando a Eq. (2.2.2) e a Eq. (4.2) tem-se:

$$U_i^{n+1/2} = U_i^n - \frac{\mathbf{D}t}{2} \left(\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{s}_{ij}^n}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}^n}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{D}\bar{p}}{\partial x_i} - \bar{S}_{ii}^n \right). \quad (4.3)$$

Da mesma forma, para a quantidade escalar, pode-se escrever que:

$$\mathbf{j}^{n+1/2} = \mathbf{j}^n + \frac{\mathbf{D}t}{2} \frac{\partial \mathbf{j}^n}{\partial t} \quad (4.4)$$

e usando a Eq. (2.2.3) e a Eq. (4.4), obtém-se:

$$\mathbf{j}^{n+1/2} = \mathbf{j}^n - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial f_{fj}^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{s}_{fj}^n}{\partial x_j} - \bar{S}_f^n \right) \quad (4.5)$$

sendo:

$$f_{ij} = \bar{u}_j U_i,$$

$$\mathbf{s}_{ij} = (\mathbf{m} + \mathbf{m}_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \mathbf{I} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k},$$

$$\bar{p}^{n+1/2} = \bar{p}^n + \frac{1}{2} \mathbf{D} \bar{p},$$

$$\bar{p}^{n+1} = \bar{p}^n + \mathbf{D} \bar{p},$$

$$\mathbf{j} = \mathbf{r} \mathbf{f},$$

$$f_{fj} = \mathbf{r} \bar{u}_i \mathbf{f} \quad \text{e}$$

$$\mathbf{s}_{fj} = (D_{x_i} + D_t) \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}}{\partial x_j}. \quad (4.6)$$

Definindo:

$$\tilde{U}_i^{n+1/2} = U_i^n - \frac{\mathbf{D}t}{2} \left(\frac{\partial f_{ij}^n}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{s}_{ij}^n}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}^n}{\partial x_i} - \bar{S}_{\bar{u}_i}^n \right) \quad (4.7)$$

a Eq. (4.3) fica da seguinte forma:

$$U_i^{n+1/2} = \tilde{U}_i^{n+1/2} - \frac{\mathbf{D}t}{4} \frac{\partial \mathbf{D}\bar{p}}{\partial x_i}. \quad (4.8)$$

Discretizando a Eq. (4.1) no tempo e usando a Eq. (4.8), obtém-se o seguinte sistema para a variação da pressão:

$$\frac{\Delta \bar{p}}{c^2} + \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \Delta \bar{p}}{\partial x_i} = -\Delta t \frac{\partial \tilde{U}_i^{n+1/2}}{\partial x_i}. \quad (4.9)$$

Aplicando uma expansão em série de Taylor (excluindo termos de segunda ordem e de ordem superior) para o segundo passo de tempo $(t + \Delta t) = (n+1)\Delta t$ à variável U_i , obtém-se:

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \mathbf{D}t \frac{\partial U_i^{n+1/2}}{\partial t} \quad (4.10)$$

usando a Eq. (2.2.2) e a Eq. (4.10), tem-se:

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \Delta t \left(\frac{\partial f_{ij}^{n+1/2}}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{s}_{ij}^n}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}^{n+1/2}}{\partial x_i} - \bar{S}_{\bar{u}_i}^{n+1/2} \right). \quad (4.11)$$

A quantidade escalar, para o segundo passo de tempo, fica expressa por:

$$\mathbf{j}^{n+1} = \mathbf{j}^n + \Delta t \frac{\partial \mathbf{j}^{n+1/2}}{\partial t} \quad (4.12)$$

e usando a Eqs. (2.2.3) e a Eq. (4.12), obtém-se:

$$\mathbf{j}^{n+1} = \mathbf{j}^n - \Delta t \left(\frac{\partial f_{f_j}^{n+1/2}}{\partial x_j} - \frac{\partial \mathbf{s}_{f_j}^n}{\partial x_j} - \bar{\mathbf{S}}_f^{n+1/2} \right) \quad (4.13)$$

De forma semelhante ao algoritmo apresentado por Teixeira (2001), os sistemas de equações são resolvidos calculando seqüencialmente as seguintes expressões (considerando o conjunto de expressões apresentadas na Eq. 4.6):

(1) com a Eq. (4.7), determina-se $\tilde{U}_i^{n+1/2}$;

(2) com a Eq. (4.9), determina-se $\Delta \bar{p}$ e \bar{p}^{n+1} ;

(3) com a Eq. (4.8), determina-se $U_i^{n+1/2}$;

(4) com a Eq. (4.5), determina-se $\mathbf{j}^{n+1/2}$;

(5) com a Eq. (4.11), determina-se U_i^{n+1} ;

(6) com a Eq. (4.13), determina-se \mathbf{j}^{n+1} .

Aplicando o esquema clássico de resíduos ponderados de Galerkin, para discretizar no espaço, são obtidas as seguintes expressões matriciais para as Eqs. (4.7), (4.9), (4.8), (4.5), (4.11) e (4.13), respectivamente:

$$\mathbf{O}_E \tilde{\mathbf{U}}_i^{n+1/2} = \mathbf{C} \hat{\mathbf{U}}^n - \frac{Dt}{2} \left[\mathbf{L}_j (\hat{\mathbf{f}}_{ij}^n - \hat{\mathbf{s}}_{ij}^n) + \mathbf{L}_i \bar{\mathbf{p}}^n - \bar{\mathbf{S}}_{ui}^n \right]; \quad (4.14)$$

$$\left(\tilde{\mathbf{M}} + \frac{Dt^2}{4} \mathbf{H} \right) \mathbf{D} \bar{\mathbf{p}} = Dt \left(\mathbf{L}_i^T \tilde{\mathbf{U}}_i^{n+1/2} - \hat{\mathbf{f}}_a \right); \quad (4.15)$$

$$\mathbf{O}_E \hat{\mathbf{U}}_i^{n+1/2} = \mathbf{O}_E \tilde{\mathbf{U}}_i^{n+1/2} - \frac{Dt}{4} \mathbf{L}_i \mathbf{D} \bar{\mathbf{p}}; \quad (4.16)$$

$$\mathbf{O}_E \hat{\mathbf{f}}^{n+1/2} = \mathbf{C} \hat{\mathbf{f}}^n - \frac{\Delta t}{2} \left[\mathbf{L}_j (\hat{\mathbf{f}}_{fj}^n - \hat{\mathbf{s}}_{fj}^n) - \bar{\hat{\mathbf{S}}}_f^n \right]; \quad (4.17)$$

$$\mathbf{M}_E \hat{\mathbf{U}}_i^{n+1} = \mathbf{M}_E \hat{\mathbf{U}}_i^n + \mathbf{D}t \left(\mathbf{L}_j^T \hat{\mathbf{f}}_{ij}^{n+1/2} - \mathbf{Q}_j \hat{\mathbf{s}}_{ij}^n + \mathbf{Q}_i \bar{\hat{\mathbf{p}}}^{n+1/2} + \bar{\hat{\mathbf{S}}}_{b_i}^{n+1/2} + \bar{\hat{\mathbf{S}}}_{\bar{u}_i}^{n+1/2} \right); \quad (4.18)$$

$$\mathbf{M}_E \hat{\mathbf{J}}^{n+1} = \mathbf{M}_E \hat{\mathbf{J}}^n + \mathbf{D}t \left(\mathbf{L}_j^T \hat{\mathbf{f}}_{fj}^{n+1/2} - \mathbf{Q}_j \hat{\mathbf{s}}_{fj}^n + \bar{\hat{\mathbf{S}}}_{bf}^{n+1/2} \right) \quad (4.19)$$

com:

$$\mathbf{O}_E = \int_{W_E} \mathbf{P}_E^T \mathbf{P}_E dW; \quad \mathbf{C} = \int_{W_E} \mathbf{P}_E^T \mathbf{N} dW; \quad \mathbf{L}_j = \int_{W_E} \mathbf{P}_E^T \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_j} dW; \quad \bar{\hat{\mathbf{S}}}_{\bar{u}_i} = \int_{W_E} \mathbf{N}^T \bar{\hat{\mathbf{S}}}_{\bar{u}_i} dW;$$

$$\tilde{\mathbf{M}} = \int_{W_E} \frac{1}{c^2} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dW; \quad \mathbf{H} = \int_{W_E} \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_i} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_i} dW; \quad \hat{\mathbf{f}}_a = \left(\int_{W_E} \mathbf{N}^T \mathbf{P}_E \mathbf{n}_i dW \right) \tilde{\hat{\mathbf{U}}}_i^{n+1/2};$$

$$\mathbf{M}_E = \int_{W_E} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dW; \quad \mathbf{Q}_i = \int_{W_E} \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_i} \mathbf{N} dW;$$

$$\bar{\hat{\mathbf{S}}}_{b_i} = - \left(\int_{G_E} \mathbf{N}^T \mathbf{P}_E \mathbf{n}_j dG \right) \hat{\mathbf{f}}_{ij}^{n+1/2} + \left(\int_{G_E} \mathbf{N}^T \mathbf{N} \mathbf{n}_j dG \right) \hat{\mathbf{s}}_{ij}^n - \left(\int_{G_E} \mathbf{N}^T \mathbf{N} \mathbf{n}_i dG \right) \bar{\hat{\mathbf{p}}}^{n+1/2};$$

$$\hat{\mathbf{S}}_{bf} = - \left(\int_{G_E} \mathbf{N}^T \mathbf{P}_E \mathbf{n}_j dG \right) \hat{\mathbf{f}}_{fj}^{n+1/2} + \left(\int_{G_E} \mathbf{N}^T \mathbf{N} \mathbf{n}_j dG \right) \hat{\mathbf{s}}_{fj}^n, \quad (4.20)$$

onde \mathbf{P}_E é uma função de forma, constante sobre o elemento ($\mathbf{P}_E = 1.0$); \mathbf{N} é um vetor que contém as funções de forma linear do elemento tetraedro de quatro nós; \mathbf{n} representa um vetor unitário normal ao contorno \mathbf{G} . O símbolo $\hat{}$ indica vetores com valores nodais das correspondentes variáveis. A Eq. (4.15) é resolvida usando o método dos gradientes conjugados com diagonal pré-condicionada, como apresentado por Alquati (1991).

Para este esquema, o qual é condicionalmente estável, o intervalo de tempo adotado, Δt , deve ser menor do que um passo de tempo crítico, Δt_{crit} .

O passo de tempo crítico pode ser calculado através da seguinte expressão, segundo Zienkiewicz e Wu (1992) e Zienkiewicz et al. (1999):

$$\Delta t_{crit} = \frac{\Delta t_s \Delta t_n}{\Delta t_s + \Delta t_n} = \frac{h_E}{|u_E|} \left(\frac{1}{1/Pe + 1} \right) \quad (4.21)$$

sendo $\Delta t_s = h_E/|u_E|$ e $\Delta t_n = h_E^2/2k$ os termos limite de estabilidade para problemas unidimensionais, com advecção e difusão dominante, respectivamente. Na Eq. (4.21), h_E é a dimensão característica de um elemento genérico E , $|u_E|$ representa o valor absoluto da velocidade para o centro deste elemento e $Pe = h_E|u_E|/2k$ corresponde ao número de Peclet local, onde k é o coeficiente de difusividade. Então, levando em conta a Eq. (4.21), pode ser adotado $\Delta t = \beta \Delta t_{crit}$, onde β é um fator de segurança ($\beta < 1,0$).

5 APLICAÇÕES NUMÉRICAS

Objetivando avaliar o desempenho dos procedimentos implementados e validar o código computacional, para simular escoamentos de fluidos incompressíveis em regime laminar e turbulento, bem como a introdução da técnica de adaptação automática de malhas tridimensionais, várias aplicações de diferentes abordagens serão realizadas.

5.1 ESCOAMENTO TRIDIMENSIONAL NUMA CAVIDADE

Nesta aplicação, é analisado o escoamento numa cavidade tridimensional cúbica de dimensões unitárias (1,0 m), onde o escoamento é provocado pelo movimento da tampa – velocidade U_0 , da esquerda para a direita. Como o escoamento é de um fluido viscoso, as condições de contorno nas paredes da cavidade são as de não deslizamento.

Para minimizar o custo computacional, em termos de memória e de tempo de processamento, na simulação numérica, é considerada a existência de simetria, onde a face anterior é considerada uma parede e a face de fundos é o plano de simetria ($z = 0$). Nestas condições, o domínio computacional foi discretizado com uma malha contendo 40817 nós e 184320 elementos tetraédricos, distribuídos conforme mostrado na Figura 5.1.1.

Nesta aplicação, duas situações são simuladas: a) para $Re = 1000$, que é considerado um escoamento essencialmente laminar; sendo assim, o regime permanente pode ser alcançado; b) para $Re = 3200$, que em simulações tridimensionais, segundo Denaro (1996), ocorrem oscilações periódicas e, portanto, o regime permanente não mais pode ser obtido.

Na simulação para o $Re = 3200$, o objetivo é identificar um intervalo de tempo que ocorrem as oscilações no campo de velocidades e, neste período, realizar um estudo estatístico, normalmente aplicado a escoamentos turbulentos.

A análise estatística da turbulência tem como base de dados o campo de velocidades no plano de simetria ($z = 0$). Para este fim, são armazenados, para cada passo de tempo, as velocidades dos nós sobre as linhas média horizontal e vertical do plano de simetria.

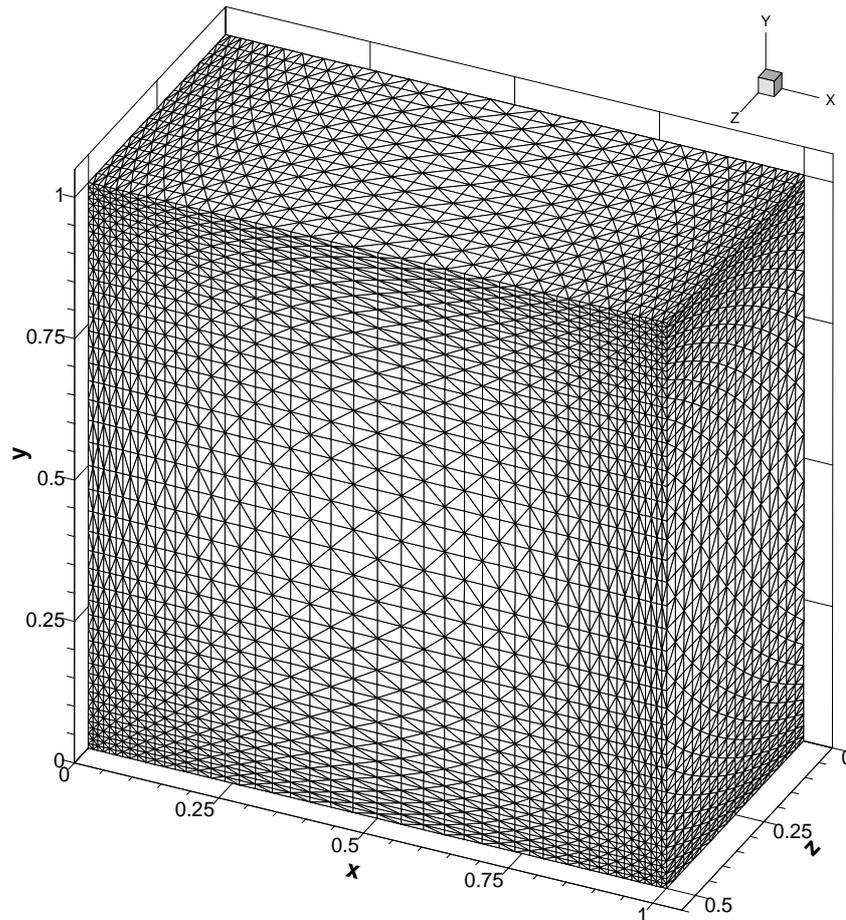


Figura 5.1.1: Discretização do domínio computacional.

Na análise estatística, as velocidades médias adimensionais nos nós das linhas médias do plano de simetria são calculadas pelas expressões:

$$U1 = \frac{\bar{\bar{u}}_1}{U_0} \quad e \quad U2 = \frac{\bar{\bar{u}}_2}{U_0} \quad (5.1.1)$$

onde U_0 é a velocidade da tampa da cavidade e $\bar{\bar{u}}_1$ e $\bar{\bar{u}}_2$ são as velocidades médias, respectivamente, nas direções x e y , dos nós das linhas médias do plano de simetria.

Pela hipótese de Reynolds, a velocidade instantânea é decomposta numa parte média e numa parte flutuante. A velocidade flutuante, $u'_i = u_i - \bar{\bar{u}}_i$, quantificada pela sua variância (rms) adimensionalizada, neste caso, pela velocidade da tampa da cavidade (U_0), é

denominada de intensidade de turbulência. Assim, as intensidades de turbulência são calculadas pelas seguintes expressões:

$$U1rms = \frac{\sqrt{\overline{u_1^2}}}{U_0} \quad e \quad U2rms = \frac{\sqrt{\overline{u_2^2}}}{U_0}. \quad (5.1.2)$$

As tensões de Reynolds são calculadas pela seguinte expressão:

$$U1U2 = \frac{\overline{u_1 u_2}}{U_0^2}. \quad (5.1.3)$$

As soluções numéricas apresentadas nesta aplicação foram obtidas através da solução das equações de Navier-Stokes, para Simulação de Grandes Escalas, com o modelo dinâmico, como apresentado anteriormente.

Os resultados obtidos no plano de simetria, para $Re = 1000$, em regime permanente, estão mostrados nas Figuras 5.1.2, 5.1.3, 5.1.4 e 5.1.5, onde aparecem, respectivamente, o campo de velocidade, as linhas de corrente, as isolinhas de pressão e as velocidades nas linhas média horizontal e vertical. Para efeito de comparação, foram inseridos, nos gráficos de velocidade nas linhas médias do plano de simetria deste trabalho, os resultados de solução numérica obtidos por Tang et al. (1995), onde pode ser verificado que os resultados obtidos são semelhantes, tanto qualitativamente quanto quantitativamente.

Na Figura 5.1.6, apresenta-se a trajetória que uma partícula percorre, num determinado tempo, quando colocada inicialmente num ponto no interior do domínio, localizado próximo à parede oposta ao plano de simetria – ou seja, no ponto (0,63; 0,6; 0,46). Como pode ser observado, a partícula, primeiro desloca-se em espiral e na direção do plano de simetria, ali continua num movimento ainda em espiral e aumentando o raio do mesmo. Quando a partícula encontra-se junto ao plano de simetria e com o raio da espiral suficientemente grande, ela retorna em direção à parede oposta ao plano de simetria, numa trajetória localizada junto à aresta à esquerda do fundo da cavidade. Em seguida a partícula segue novamente em direção ao plano de simetria, agora com uma nova trajetória.

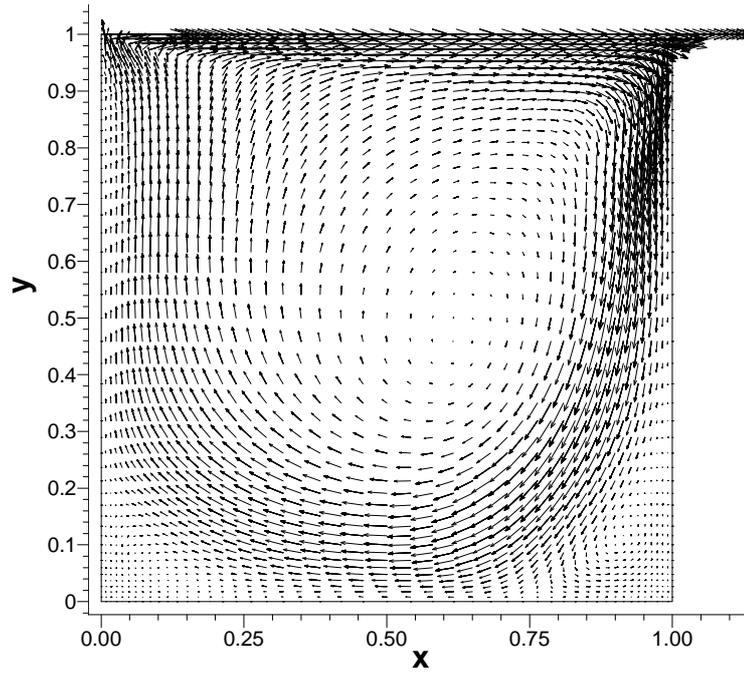


Figura 5.1.2: Campo de velocidade, $Re = 1000$.

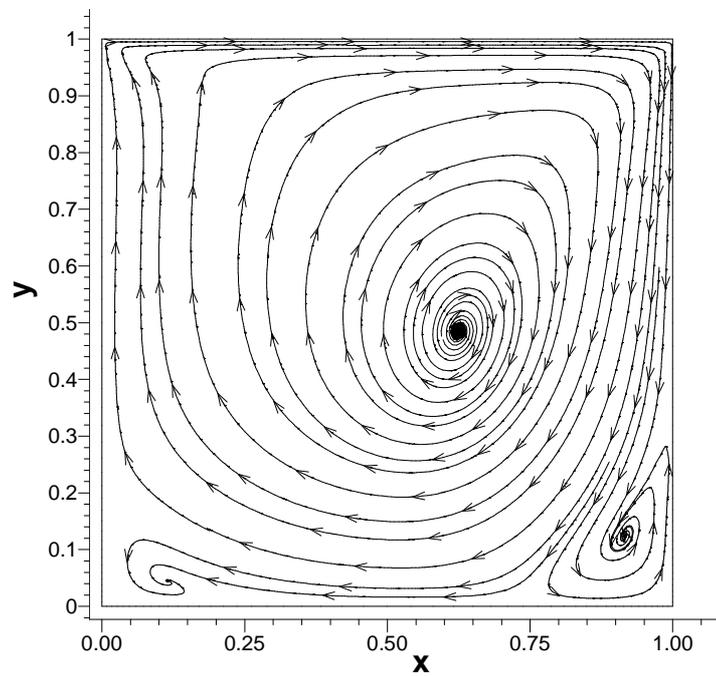


Figura 5.1.3: Linhas de corrente, $Re = 1000$.

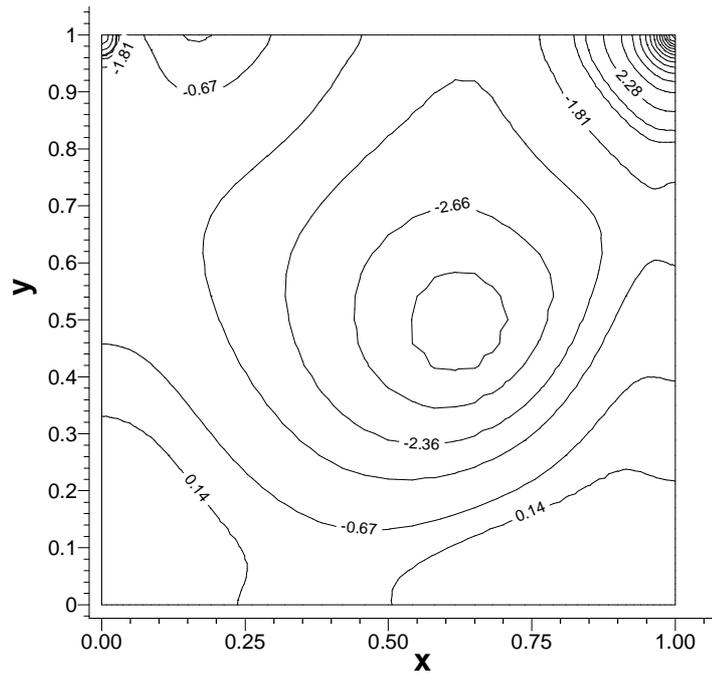


Figura 5.1.4: Isolinhas de pressão, $Re = 1000$.

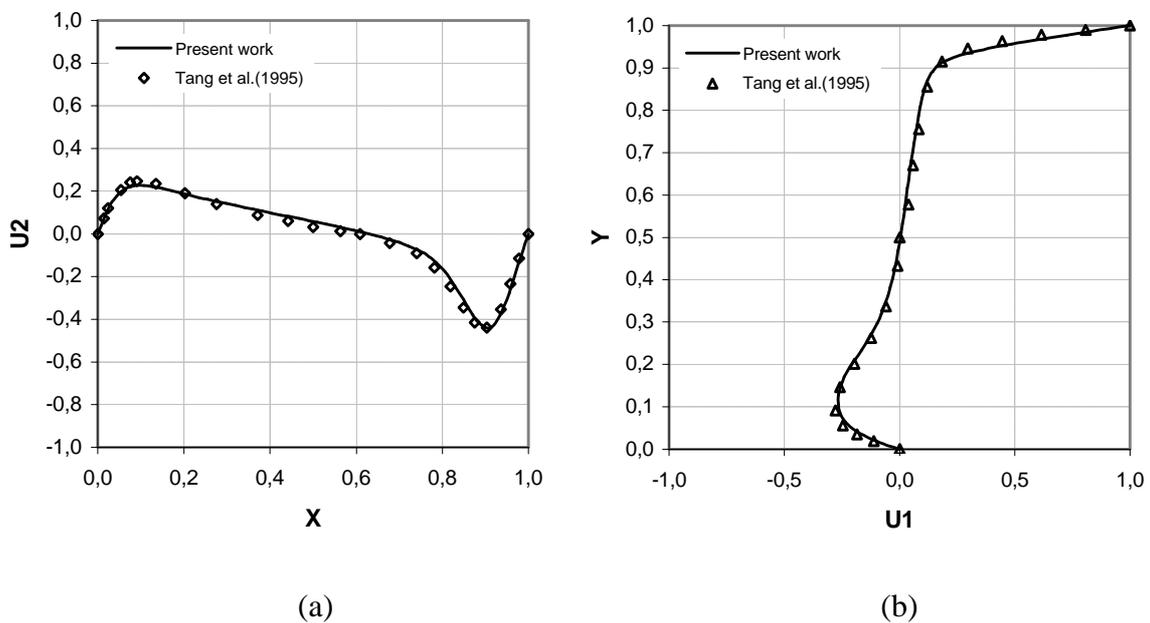


Figura 5.1.5: Perfil das componentes de velocidade média nas linhas centrais do plano de simetria: (a) linha horizontal e (b) linha vertical.

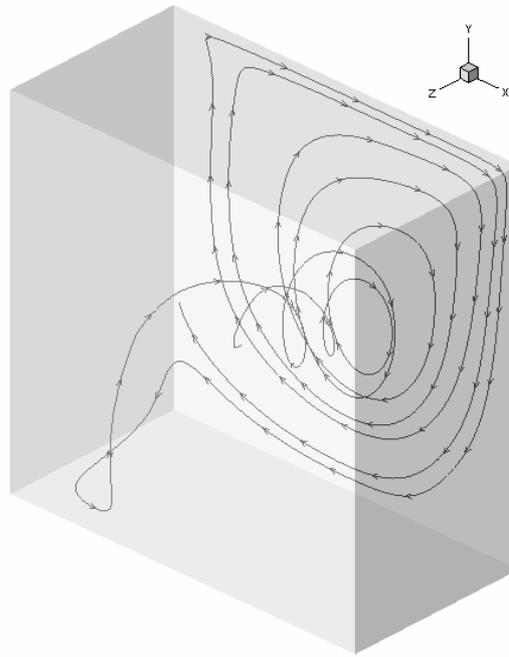


Figura 5.1.6: Linha de corrente, ponto inicial à partícula (0,63; 0,60; 0,46), $Re = 1000$.

De forma semelhante, como mostrado na Figura 5.1.7, uma partícula é solta num ponto junto ao plano de simetria (0,6; 0,5; 0,005). Neste caso, a partícula faz o mesmo tipo de movimento em espiral junto ao plano de simetria, mas agora se desloca em direção à parede oposta ao plano de simetria, nas proximidades da aresta à direita inferior da cavidade.

Na Figura 5.1.8, é plotada a linha de corrente de uma partícula cujo ponto final de sua trajetória é o ponto de partida da trajetória da partícula mostrada na Figura 5.1.7. Como se pode verificar, a partícula percorre a trajetória em espiral, passando duas vezes pelo vórtice principal, sempre em direção ao plano de simetria e em direção ao plano oposto ao plano de simetria pelo vórtice secundário esquerdo inferior. Assim, com os gráficos apresentados, pode-se ter uma idéia clara e precisa da complexidade do escoamento numa cavidade tridimensional. Analisando o escoamento, verifica-se claramente que, na região do vórtice principal, as trajetórias das partículas do fluido deslocam-se em espiral, na direção do plano de simetria. Em vista disto, para haver um suprimento de fluido junto à parede oposta ao plano de simetria, o fluido retorna em uma trajetória em espiral, mas agora na região dos vórtices secundários. E, desta forma, a dinâmica do escoamento mantém-se ao longo do tempo.

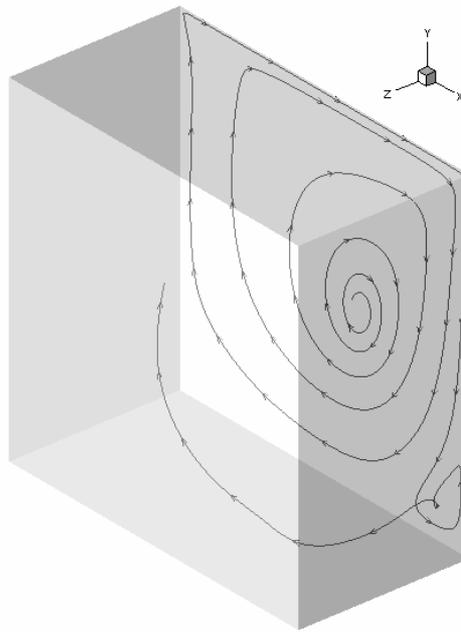


Figura 5.1.7: Linha de corrente, ponto inicial à partícula (0,6; 0,5; 0,005), $Re = 1000$.

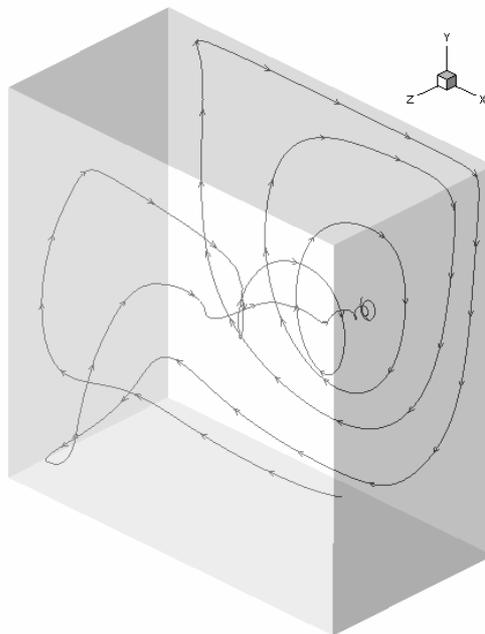


Figura 5.1.8: Linha de corrente, ponto final à partícula (0,6; 0,5; 0,005), $Re = 1000$.

Com o propósito de captar um intervalo de tempo das oscilações do campo de velocidade e, neste período, realizar um estudo estatístico da turbulência, simulou-se o escoamento numa cavidade tridimensional cúbica, para um número de Reynolds mais elevado ($Re = 3200$), onde

as oscilações começam a se tornar presentes. Observa-se que este fenômeno é periódico e ocorre num período relativamente longo. Os dados de velocidade nas linhas média horizontal e vertical do plano de simetria foram armazenados a cada intervalo de integração, totalizando 40000 passos de tempo e perfazendo um tempo total de 12 segundos. A coleta de dados foi iniciada quando as velocidades médias permaneciam praticamente constantes no tempo e no espaço, e num tempo que antecede o início do período de oscilações. O período de oscilações pode ser observado visualmente através do campo de velocidade, especialmente nos vórtices secundários. Há uma nítida transformação, de um vórtice relativamente bem formado, para um vórtice deformado. Na Figura 5.1.9, são apresentados os vórtices secundários inferior direito do plano de simetria, respectivamente, num instante de tempo de baixas oscilações e num instante de altas oscilações.

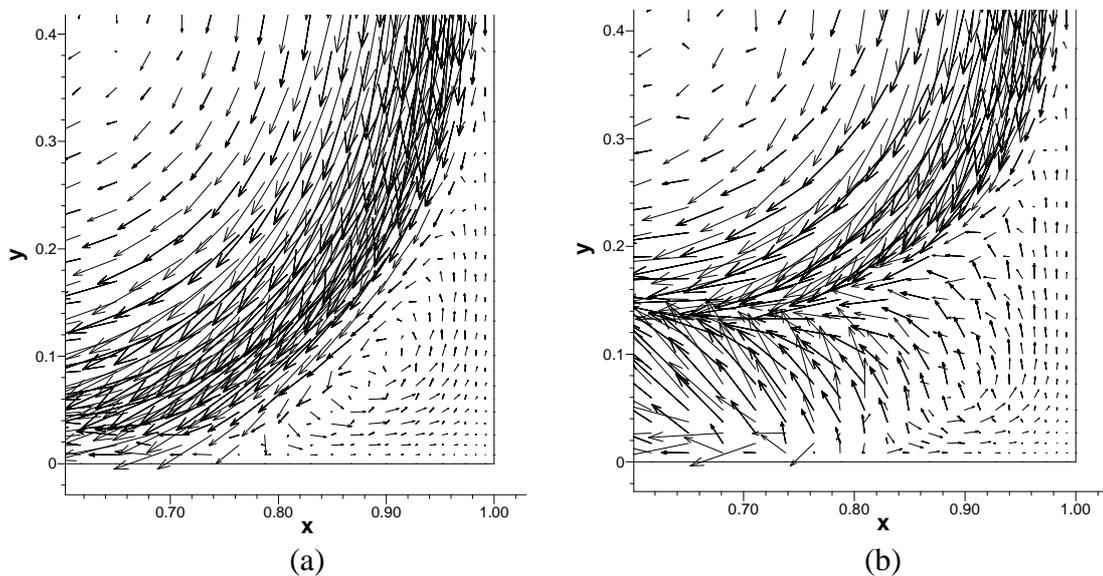


Figura 5.1.9: Campo de velocidade no vórtice secundário: a) instante de baixas oscilações. b) instante de altas oscilações.

Nas Figuras. 5.1.10, 5.1.11 e 5.1.12, são apresentados os resultados da análise estatística da turbulência, respectivamente, velocidades médias, intensidade de turbulência e tensões de Reynolds. Incorporados aos resultados deste trabalho são apresentados os resultados experimentais publicados por Zang et al. (1993). Observe-se que as constantes (10 e 500), que amplificam, respectivamente, a intensidade de turbulência e as tensões de Reynolds, são utilizadas para viabilizar uma adequada representação gráfica destes valores.

Comparando os resultados experimentais com os deste trabalho, pode-se concluir, de forma geral, que são de boa qualidade. No entanto, como pode ser observado nas figuras em

que foram representados os resultados da análise estatística, os picos de velocidades médias são inferiores aos resultados experimentais, mas conservam as mesmas características qualitativas. O mesmo ocorre à direita e no fundo da cavidade, com as intensidades de turbulência e as tensões de Reynolds.

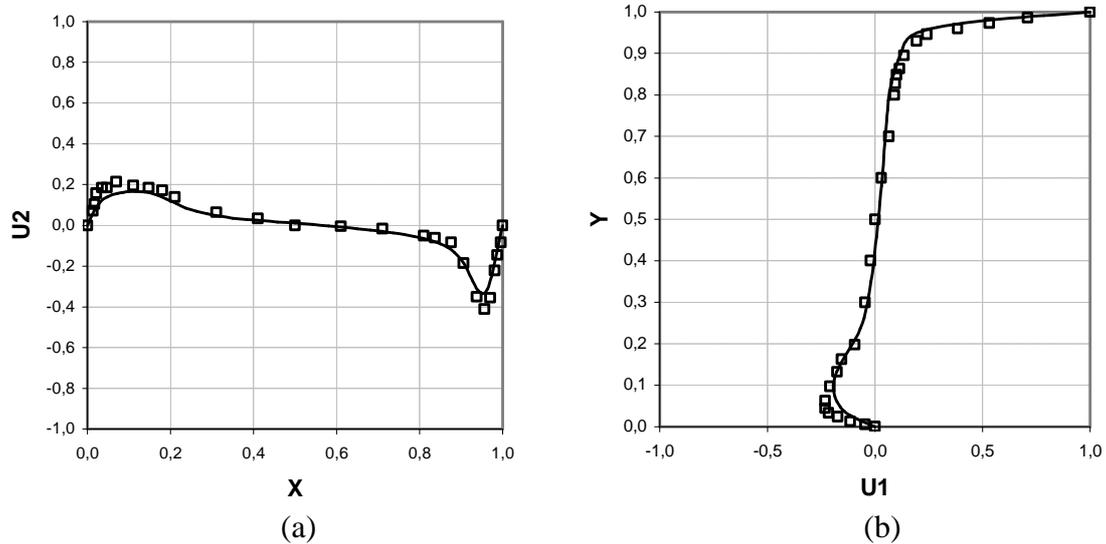


Figura 5.1.10: Velocidades média: a) vertical e b) horizontal. Resultados: — presente trabalho e \square dados experimentais de Zang et al.

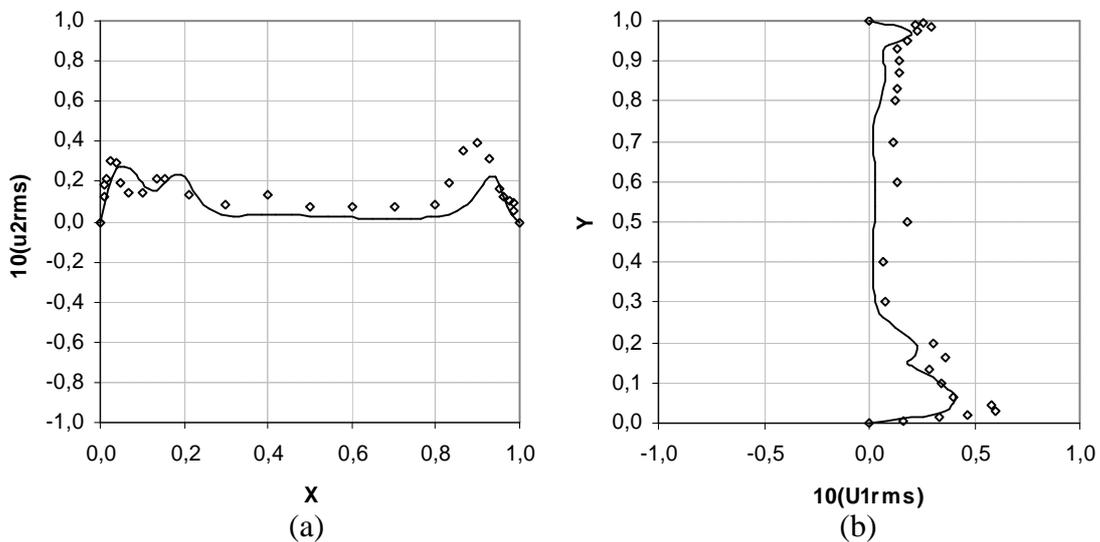


Figura 5.1.11: Intensidade de turbulência: a) vertical e b) horizontal. Resultados: — presente trabalho e \diamond dados experimentais de Zang et al.

Quanto ao segundo pico das tensões de Reynolds (Figura 5.1.12), à esquerda da cavidade, ser positivo e não negativo, é comum em resultados numéricos, até mesmo nos

resultados numéricos de Zang et al. (1993), publicado juntamente com os dados experimentais.

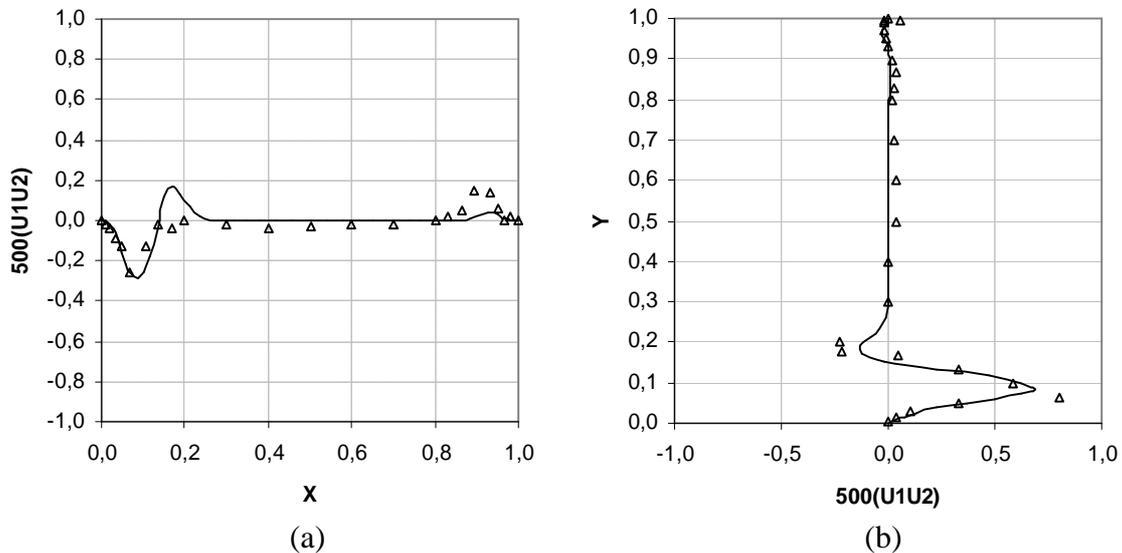


Figura 5.1.12: Tensões de Reynolds: a) vertical e b) horizontal. Resultados: — presente trabalho e Δ dados experimentais de Zang et al.

5.2 ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL NUM CANAL COM DEGRAU

O objetivo da aplicação é avaliar o desempenho dos procedimentos de Simulação de Grandes Escalas, com os Modelos de Smagorinsky e Dinâmico, com o propósito de validar o código computacional implementado. Neste sentido, a aplicação consiste na simulação do escoamento num canal com degrau em expansão. A escolha deste problema foi motivada por apresentar características de um escoamento complexo, como camada de cisalhamento, separação, recolamento e recirculação. Além disto, existe na literatura uma série de simulações numéricas e experimentais, proporcionando assim a possibilidade de comparar os resultados. A separação do escoamento, na região à jusante do degrau, forma um grande vórtice de recirculação, com um ponto de recolamento na parede inferior do canal. A distância entre o degrau e o ponto de recolamento é denominado de comprimento de recolamento do vórtice principal, ou simplesmente de comprimento de recolamento. Dentre as características, é enfatizada a relação entre o número de Reynolds e o comprimento de recolamento, abrangendo escoamentos bi e tridimensionais.

O domínio computacional do problema, mostrado na Figura 5.2.1, tem largura $w = 5,0$ m; e a altura do canal na entrada, a altura do degrau, os comprimentos à montante e à jusante do degrau são, respectivamente, $h = 1,0$ m, $s = 0,94$ m, $x_e = 1,0$ m e $x_t = 30,0$ m. Nas dimensões especificadas, já foi considerada a simetria do escoamento, onde o plano da face frontal do canal é uma parede e a face de fundo é o plano de simetria.

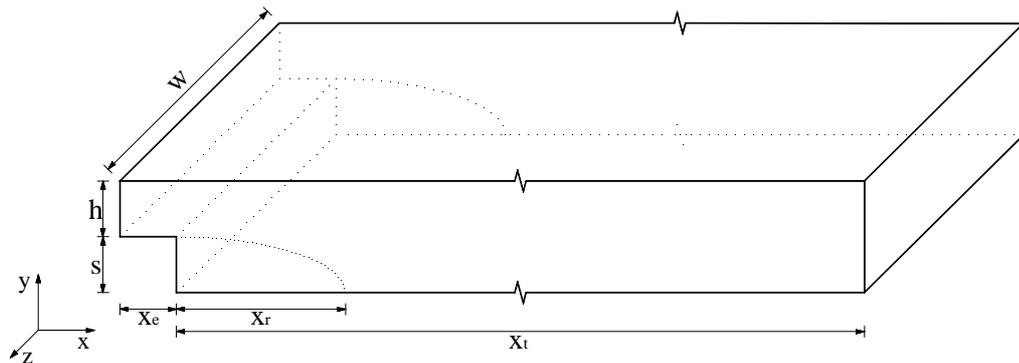


Figura 5.2.1: Domínio computacional do problema.

Considerou-se que o vetor de velocidades em contornos sólidos, por se tratar de um escoamento viscoso, e a componente da velocidade normal ao plano de simetria são nulos. Na saída do domínio, as velocidades são livres e a pressão adotada foi nula. Por sua vez, o perfil de velocidades na entrada é parabólico, completamente desenvolvido e normal ao plano, definido como:

$$U(y) = U_{máx} \left(1 - \left(\frac{y - h/2}{h/2} \right)^2 \right) \quad (5.2.1)$$

onde $U_{máx}$ é a velocidade máxima do perfil, y representa a coordenada cartesiana vertical e h corresponde à altura do canal a montante. Para a solução térmica, é considerado que o fluido, na entrada no canal, possui uma temperatura de $1,0$ °C e as paredes sólidas permanecem a uma temperatura constante de $0,0$ °C e o coeficiente de difusão térmica é $0,05$ m²/s.

Armaly et al. (1984) define o número de Reynolds para este problema, como sendo:

$$Re = \frac{UD}{\nu} \quad (5.2.2)$$

onde U é a velocidade média do perfil de velocidades na entrada do canal, $U = \frac{2}{3}U_{máx}$; D representa o diâmetro hidráulico do canal que antecede o degrau, dado por $D = 2h$; e ν corresponde à viscosidade cinemática do fluido. Observe-se que, para as diferentes simulações, o número de Reynolds é calculado em função de ν , já que U e D são mantidos constantes.

Para as simulações bidimensionais, o domínio computacional foi discretizado com uma malha contendo 7594 nós e 18255 elementos tetraédricos. A região que antecede o degrau possui 5 elementos na horizontal e 16, na vertical (y), e uma camada de elementos na profundidade (z). Após o degrau, os elementos foram distribuídos em uma matriz com 115 elementos na horizontal e 31 elementos na vertical. Como se pode visualizar na superfície frontal do canal (ver Figura 5.2.2), os elementos foram mais concentrados nas paredes, na região central e próximo ao degrau.

Acrescente-se que, para as simulações tridimensionais, é usada uma malha semelhante às simulações bidimensionais. No entanto, na terceira dimensão (direção z), são empregadas 16 camadas de elementos, de forma que, próximo da parede, as camadas são mais finas do que na face de simetria. A malha tridimensional contém 64549 nós e 291600 elementos. Detalhes podem ser visualizados na Figura 5.2.2.

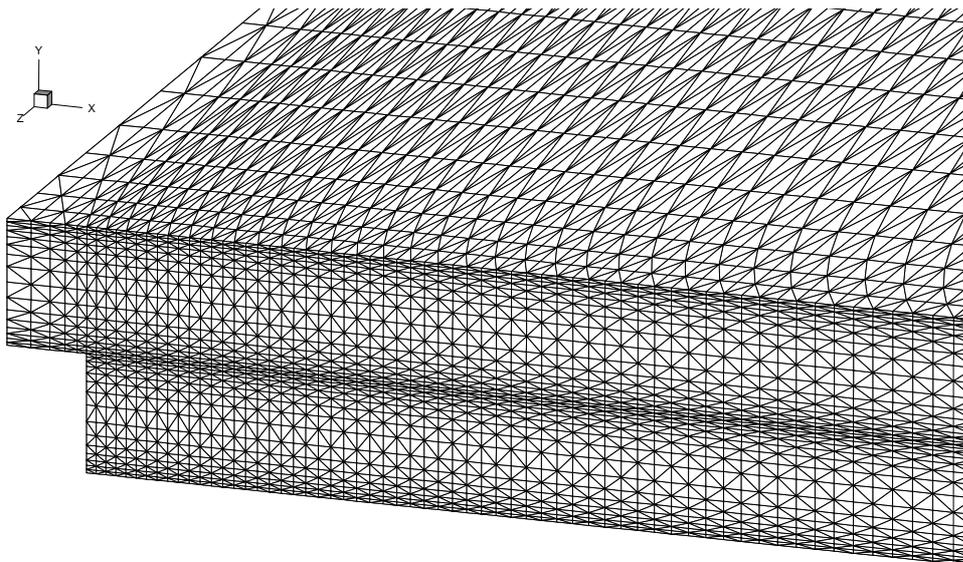


Figura 5.2.2: Detalhes da discretização do domínio computacional, 3D.

Primeiramente, foram realizadas simulações numéricas bidimensionais e tridimensionais – Simulação de Grandes Escalas – em regime laminar, com o objetivo de estudar e entender o comportamento da dinâmica do escoamento em função das dimensões (bi e tridimensionais) e do número de Reynolds. Destaque é dado à relação entre o comprimento de recolamento do vórtice principal e o número de Reynolds. Neste sentido, Armaly et al. (1983) publicou resultados de um trabalho experimental; Kim e Moin (1985), Sohn (1988) e Williams e Baker (1997) publicaram resultados de trabalhos em 2D; e Williams e Baker (1997) e Chiang e Sheu (1999) apresentam resultados de trabalhos em 3D.

Nas Figuras 5.2.3, 5.2.4 e 5.2.5 são apresentadas as soluções de simulações numéricas, bi e tridimensionais, utilizando os modelos de Smagorinsky (sma2D e sma3D) e o Dinâmico (din2D e din3D). Estas soluções relacionam o comprimento de recolamento do vórtice principal (adimensionalizado, x_r/s) com o número de Reynolds.

Como base para comparação, utilizaram-se os resultados experimentais de Armaly et al. (1983), bem como os resultados numéricos de Williams e Baker (1997), e Kim e Moin (1982). Neste sentido, na Figura 5.2.3 estão plotados os resultados experimentais de Armaly et al. (1983), os resultados numéricos bidimensionais de Kim e Moin (1982) e os do presente trabalho. Analisando os gráficos, verifica-se que os resultados obtidos através de simulações numéricas são semelhantes. Entretanto, quando comparados com os resultados experimentais, é evidente que, à medida que o número de Reynolds aumenta, a diferença entre os comprimentos de recolamento também aumenta. Por outro lado, comparando os resultados numéricos, todos obtidos por simulações bidimensionais, verifica-se que são praticamente iguais. Observe-se que Kim e Moin (1982) não apresentam solução para Reynolds 1000. Note-se que, a partir de $Re = 800$, os resultados obtidos pelo modelo dinâmico e pelo modelo de Smagorinsky começam a se defasar.

Da mesma forma, na Figura 5.2.4, estão apresentados os resultados de Armaly et al (1983) e os resultados de simulações tridimensionais de Williams e Baker (1997) e as do presente trabalho. Os resultados gráficos mostram claramente que as soluções numéricas tridimensionais e experimentais são bem próximas, com exceção para o número de Reynolds 1000, cujo resultado obtido pelo modelo de Smagorinsky encontra-se um pouco abaixo dos demais. No trabalho de Williams and Baker (1997), não consta a solução para Reynolds 1000.

Em seqüência, na Figura 5.2.5, são apresentados somente os resultados deste trabalho. Verifica-se que, a partir de $Re = 600$, as diferenças dos comprimentos de recolamento, calculadas através de simulações bidimensionais e tridimensionais, são significativas. Comparando os resultados dos modelos de turbulência – da mesma dimensão – nota-se que, a partir do Reynolds 600, os resultados do modelo de Smagorinsky são inferiores aos do modelo Dinâmico. Isto ocorre devido a que o modelo de Smagorinsky é mais dissipativo que o modelo Dinâmico.

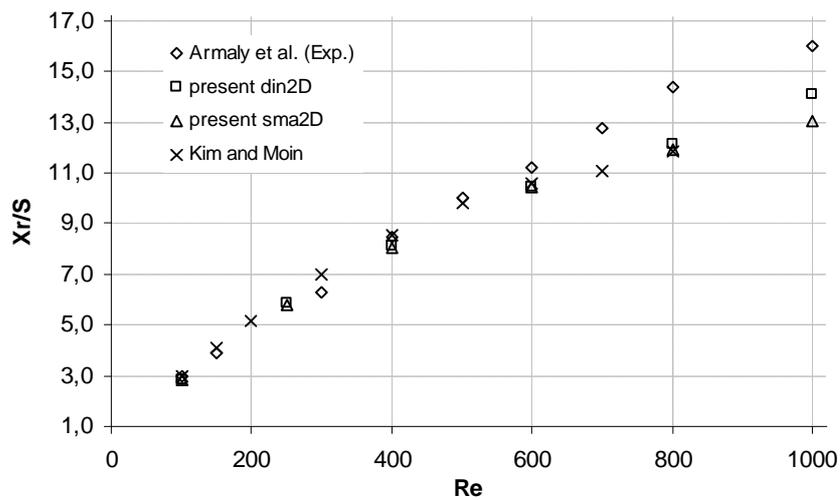


Figura 5.2.3: Comprimento de recolamento do vórtice principal, 2D.

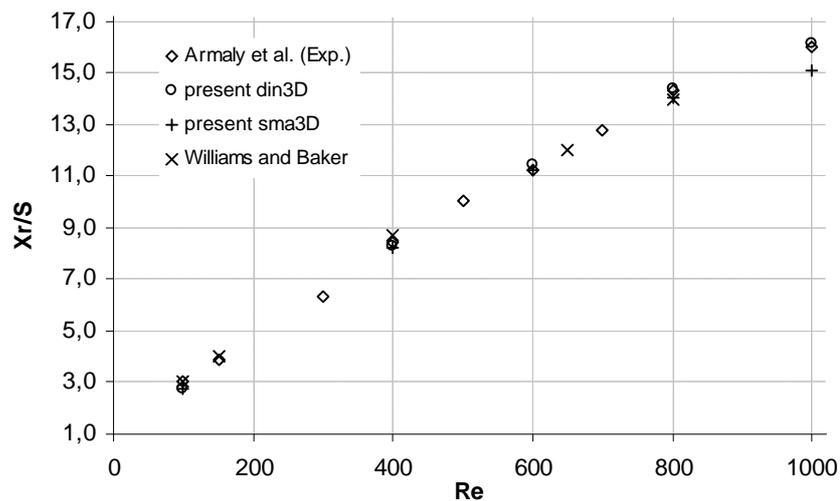


Figura 5.2.4: Comprimento de recolamento do vórtice principal, 3D.

Uma das causas de o comprimento de recolamento ser maior nas simulações tridimensionais do que nas bidimensionais é atribuída ao movimento do fluido, causado pela

condição de contorno – o não deslizamento na parede frontal do domínio computacional. A existência da parede propicia, na região de abrangência do vórtice principal, a geração de um escoamento em z e na direção da face de simetria. Detalhes adicionais sobre o assunto serão apresentados mais adiante.

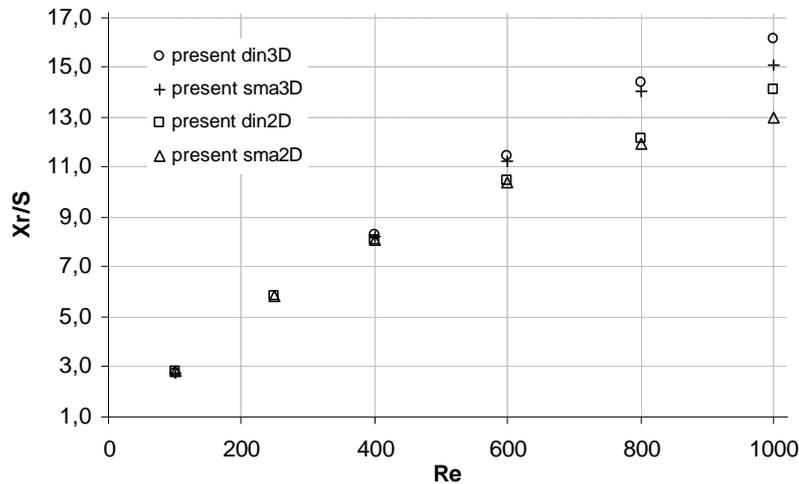


Figura 5.2.5: Comprimento de recolamento do vórtice principal, 2D e 3D.

Detalhes das linhas de corrente das simulações em 2D e utilizando o modelo dinâmico são apresentados na Figura 5.2.6, onde podem ser visualizados os vórtices principais, localizados na região de sombra do degrau. Como pode ser percebido, à medida que o número de Reynolds aumenta, o comprimento dos vórtices principais também aumenta, como mostrado anteriormente nos gráficos dos comprimentos de recolamento.

Além dos vórtices principais, nos gráficos das linhas de corrente (Figura 5.2.6) correspondentes aos Reynolds 600, 800 e 1000, pode ser visualizado, junto à parede superior do canal, o aparecimento de vórtices secundários. Para este intervalo de número Reynolds os vórtices secundários crescem em função do Reynolds. Segundo Armaly et al. (1983), o vórtice secundário se faz presente num intervalo de $400 < Re < 6600$, sendo que no regime laminar ($400 < Re < 1200$), o comprimento de separação cresce com o número de Reynolds, decresce no regime transiente ($1200 < Re < 6600$) e desaparece no regime turbulento ($Re > 6600$).

Foram encontrados os seguintes comprimentos de separação dos vórtices secundários: 5,52; 10,11 e 9,25 (adimensionalizado em função da altura do degrau), respectivamente, para os números de Reynolds 600, 800 e 1000. Para efeito de comparação, Kim e Moin (1985)

encontraram, para Reynolds 600 e 800, respectivamente, $\sim 7,8$ e $\sim 11,5$. Sohn (1988) encontrou $\sim 9,4$ para Reynolds 800 e Armaly et al. (1983) obteve aproximadamente $\sim 5,87$; $\sim 9,17$ e $\sim 10,4$, respectivamente, para os Reynolds 600, 800 e 1000. Não foi encontrada, na bibliografia solução numérica para Reynolds 1000 em 2D. Analisando os resultados, pode-se afirmar que o comprimento de separação dos vórtices secundários, calculados neste trabalho por simulações bidimensionais com o modelo dinâmico, é de boa qualidade. No entanto, de acordo com o resultado para o número de Reynolds 1000, o comprimento de separação começa diminuir, caracterizando a antecipação do regime transiente.

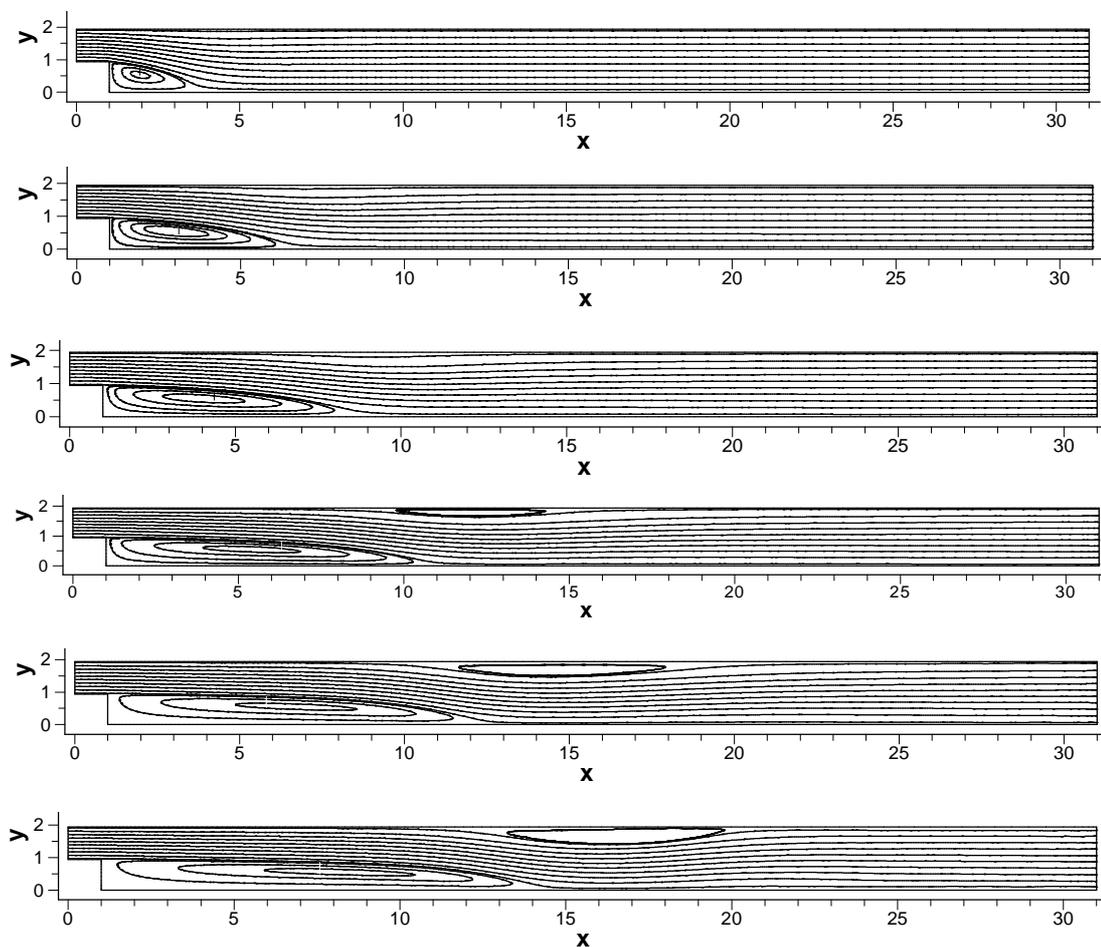


Figura 5.2.6: Linhas de corrente, respectivamente, para o Reynolds 100, 250, 400, 600, 800 e 1000.

O aparecimento do vórtice secundário na parede superior do canal, é uma conseqüência do gradiente de pressão adversa, provocado pela mudança de direção do escoamento, devido à expansão do canal. Entretanto, conforme foi mostrado na Figura 5.2.6, o vórtice também é em

função do número de Reynolds. Em virtude disto, para associar o aparecimento do vórtice secundário com os gradientes de pressão, estes estão apresentados na Figura 5.2.7.

Observe-se que os resultados do campo de velocidades, plotado como linhas de corrente e o campo de pressão, para o número de Reynolds 800 e 1000, foram obtidos através de uma média temporal. Este procedimento permite laminarizar as pequenas perturbações que ocorrem ao longo das paredes. Estas perturbações são originadas por desprendimentos de vórtices e/ou por separação, os quais não mais se dissipam facilmente por efeitos da viscosidade molecular.

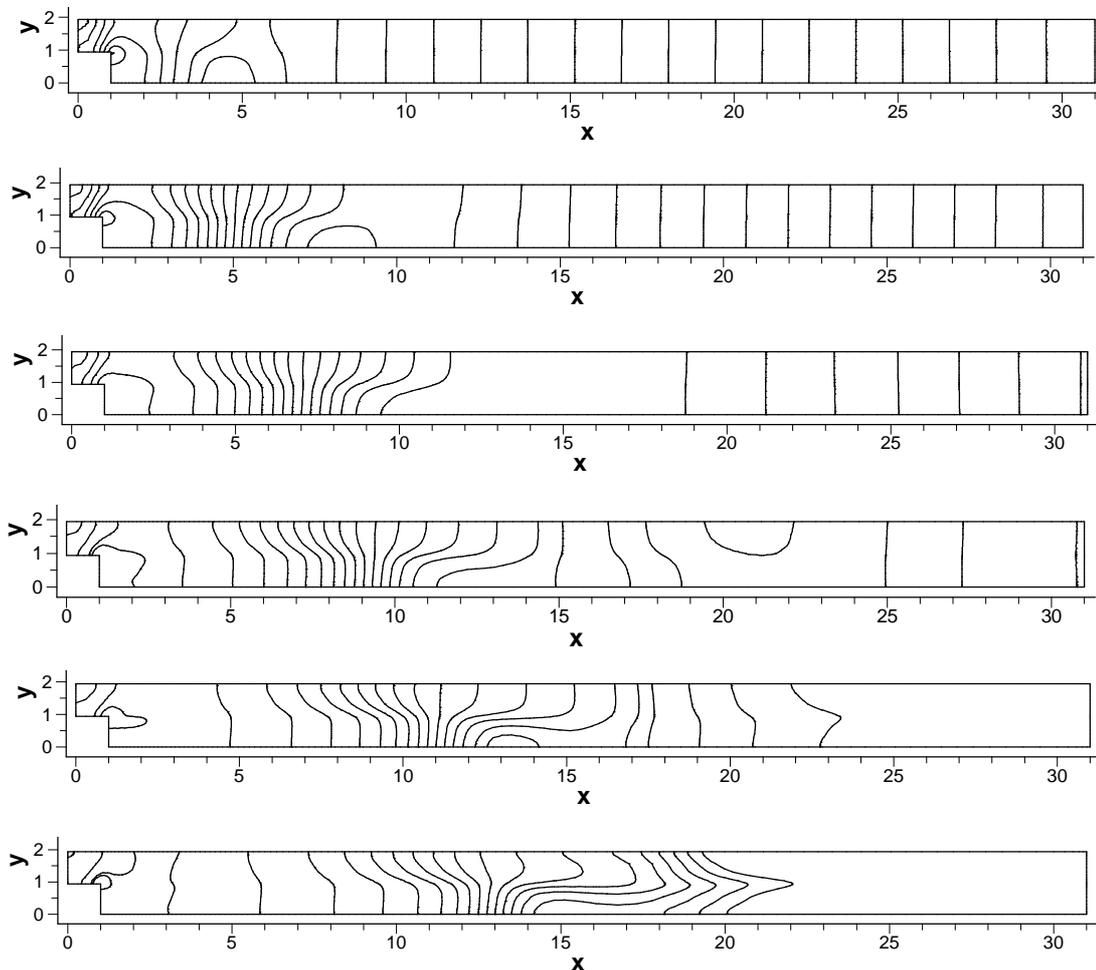


Figura 5.2.7: Isolinhas de pressão, respectivamente, para Reynolds 100, 250, 400, 600, 800 e 1000.

As isolinhas de temperaturas instantâneas estão plotadas na Figura 5.2.8. Como os resultados, para os números de Reynolds iniciais, são semelhantes, foram apresentados somente os gráficos mais significativos para a análise. Observando os dois últimos campos de

temperatura, nota-se uma visível flutuação, em consequência dos pequenos vórtices, que são desprendidos ao longo da parede superior e inferior do canal. Fica evidente que com o aumento do número de Reynolds, estes vórtices tornam-se mais pronunciados e atuantes. Analisando as isolinhas de temperatura para o número de Reynolds 600, verifica-se que a transferência de calor dominante ao longo do canal ocorre por advecção e, transversalmente, por difusão. No entanto, para o número de Reynolds 800, na transferência de calor transversal já são percebidos os efeitos advectivos e para o número de Reynolds 1000, os efeitos por advecção ocorrem em ambas as direções.

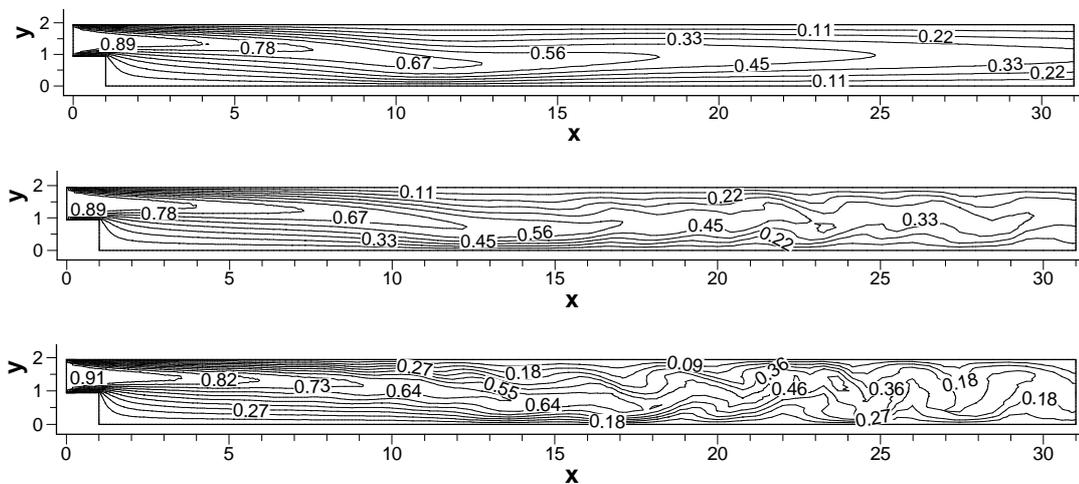


Figura 5.2.8: Isolinhas de temperatura para Reynolds 600, 800 e 1000.

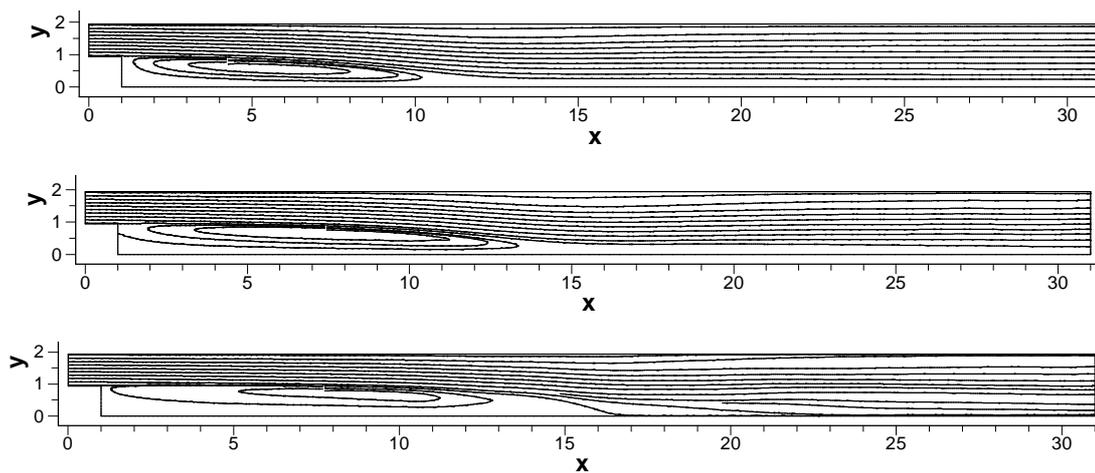


Figura 5.2.9: Linhas de corrente, modelo dinâmico para Reynolds 600, 800 e 1000.

No plano de simetria as linhas de corrente resultantes de simulações tridimensionais, utilizando o modelo dinâmico, estão mostradas na Figura 5.2.9. Os resultados dos campos de

velocidades, para Reynolds 800 e 1000 foram obtidos através de médias temporais. O uso de valores médios se faz necessário para identificar, de forma precisa, o comprimento de recolamento, pois o desprendimento de vórtices, para estes números de Reynolds, é constante.

Verifica-se, que nas soluções tridimensionais, os vórtices secundários não estão mais presentes. Gráficos apresentados por Chiang e Sheu (1999) mostram resultados semelhantes (para Reynolds 1000); e Williams e Baker (1997) afirma que a bolha de separação secundária na parede superior do canal, é muito fina, aproximadamente 1.0 mm (para Reynolds 800). Assim sendo, verifica-se que a malha utilizada não é fina o suficiente para captar os vórtices secundários, visto que o tamanho do elemento próximo à parede tem aproximadamente 2,6 cm.

Por outro lado, analisando a bolha de separação secundária sob aspectos bidimensional e tridimensional, fica a questão: Por que as simulações bidimensionais se aproximam dos resultados experimentais e as tridimensionais, não? Uma coisa é certa. Isto é provocado pelo movimento do fluido no sentido do eixo z e na direção da face de simetria. Por razões computacionais, utiliza-se a condição de simetria, para amenizar os custos de armazenamento e processamento. Mas, talvez a dimensão utilizada em z e o número de elementos da malha nesta mesma dimensão não seja o suficiente para amenizar o movimento em z , para obter uma verdadeira condição de simetria e, assim, obter a precisão necessária.

As linhas de corrente no plano de simetria e o movimento lagrangeano de duas partículas no interior do vórtice principal, uma posicionada próximo ao plano da parede e a outra, na região intermediária do canal, estão mostradas na Figura 5.2.10. Esta representação gráfica mostra nitidamente o efeito parede sobre o movimento do fluido. Na Figura 5.2.11, são plotadas as linhas de corrente, para um Reynolds mais elevado ($Re = 800$), e cortes verticais do campo de temperatura, para o mesmo Reynolds, são apresentados na Figura 5.2.12.

Como pode ser observado, nas Figuras. 5.2.10 e 5.2.11, as partículas, no interior do vórtice principal têm movimento tridimensional, seguindo uma trajetória em espiral e na direção da face de simetria. Este movimento é produzido pela presença da parede e gera a tridimensionalidade do escoamento.

Mesmo sabendo que os escoamentos em regime turbulento possuem características tridimensionais, optou-se por simular este escoamento bidimensionalmente, pois estas

simulações apresentam uma boa aproximação e o custo computacional para obtê-las é relativamente baixo.

Para estudar o comportamento de escoamentos turbulentos, o efeito da transferência de calor, com relação ao comprimento de recolamento do vórtice principal e o número de Reynolds, foram realizadas duas simulações. Os resultados da primeira simulação para Reynolds 10000 estão mostrados na Figuras 5.2.13 e 5.2.14. Na Figura 5.2.13, são apresentados graficamente os valores instantâneos do campo de velocidade, linha de corrente, campo de vorticidade, pressão e temperatura, para o tempo $t = 150$ s.

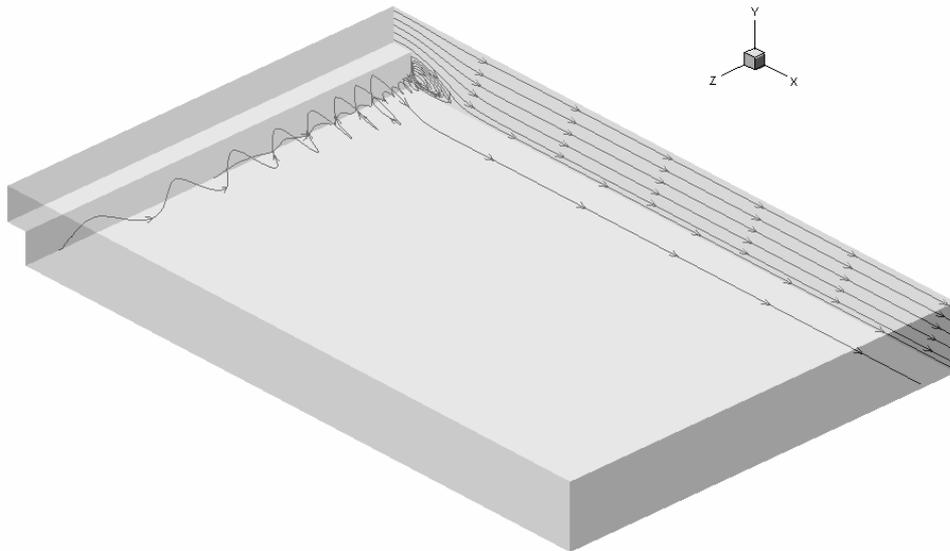


Figura 5.2.10: Linhas de corrente, modelo dinâmico para Reynolds 100.

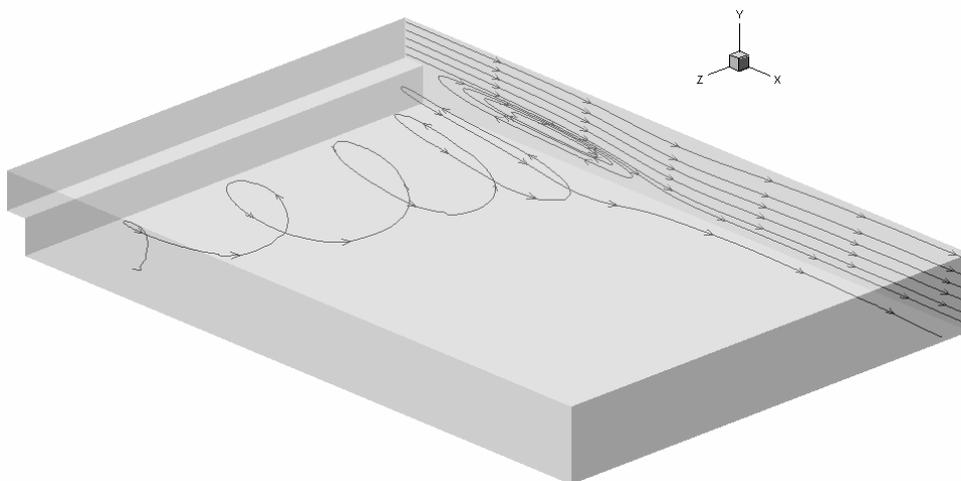


Figura 5.2.11: Linhas de corrente, modelo dinâmico para Reynolds 800.

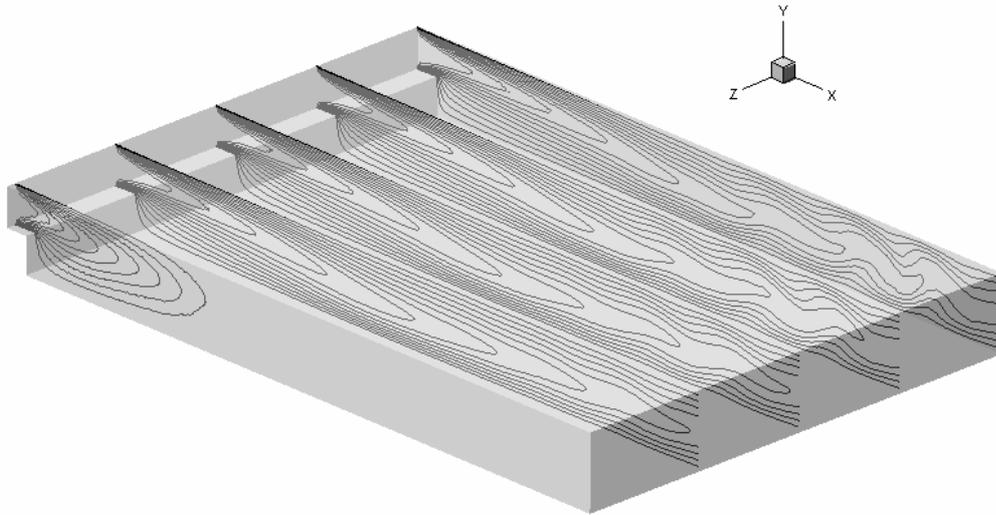


Figura 5.2.12: Isolinhas do campo de temperatura, modelo dinâmico para Reynolds 800.

Nas linhas de corrente, pode ser observado que as bolhas de separação estão distribuídas nas paredes do canal. Na parede do degrau, o maior vórtice, contido numa bolha de separação, tem sentido horário, enquanto na parede oposta, tem sentido anti-horário. Analisando simultaneamente os cinco gráficos da Figura 5.2.13, verifica-se que há uma forte coerência entre o campo de velocidade, com as demais variáveis plotadas. Note-se que no campo de temperatura, o efeito da transferência de calor por advecção é dominante nas duas direções, em consequência o resfriamento do fluido é mais acentuado do que nos escoamentos em regime laminar. Logo, tem um comportamento diferente das simulações de escoamentos em regime essencialmente laminar, onde o efeito advectivo se faz presente somente na direção longitudinal do canal.

Na Figura 5.2.14, são apresentados os campos de velocidade e pressão médias, e as linhas de corrente. Conforme o campo de velocidade instantânea, da Figura 5.2.13, e o campo de velocidade média da Figura 5.2.14, ou as linhas de corrente das duas Figuras, uma importante característica do escoamento pode ser identificada quanto às oscilações dos vórtices. Isto é, os resultados obtidos por média indicam que os vórtices mais próximos do degrau oscilam, mas permanecem em média sempre na mesma posição, enquanto os vórtices mais próximos da saída oscilam e mudam constantemente de lugar. Os vórtices próximos da saída movimentam-se na direção positiva da coordenada y , visto que os vetores médios de velocidades nodais também possuem a mesma direção.

Resultados do escoamento em regime turbulento, para o número de Reynolds 40000, são mostrados graficamente nas Figuras 5.2.15 e 5.2.16, respectivamente, com soluções instantâneas e médias. Os resultados instantâneos são semelhantes aos apresentados anteriormente; no entanto, as oscilações são mais intensas, como pode ser observado no gráfico do campo de temperatura, onde o resfriamento do fluido ocorre mais rapidamente e numa menor distância da entrada do canal, diferenciando-se das simulações anteriores.

Nas Figuras 5.2.14 e 5.2.16, nos gráficos das linhas de corrente e do campo de velocidade média, podem ser identificado e mensurado o comprimento de recolamento do vórtice principal. Para o número de Reynolds 10000, obteve-se um valor adimensional igual a 8,05, portanto, concordando como valor obtido experimentalmente por Armaly (1983), que foi de $\sim 8,0$. Da mesma forma, para o número de Reynolds 40000, obteve-se 6,40 para o comprimento de recolamento. Este valor encontra-se dentro de intervalo obtido experimentalmente por Kim et al. (1980), que é de 7 ± 1 , conforme referenciado em Sohn (1988).

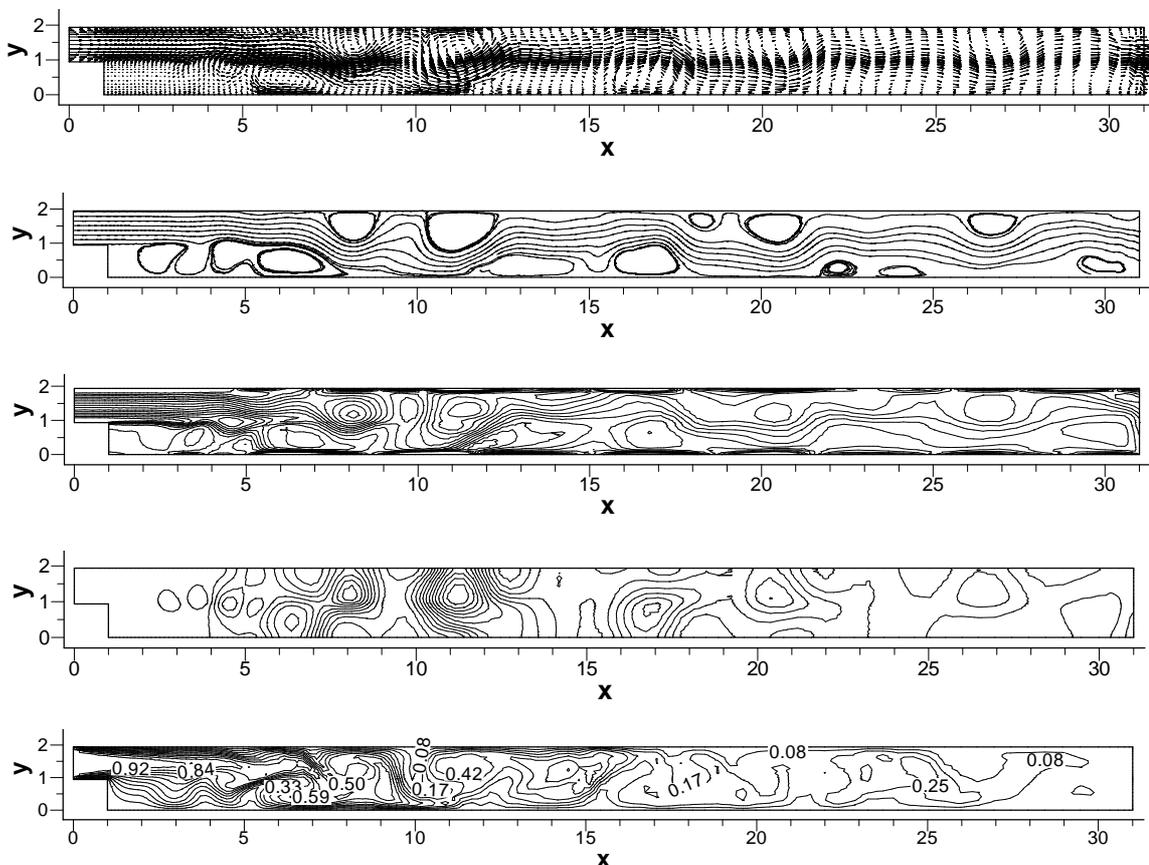


Figura 5.2.13: Solução para o regime turbulento - Reynolds 10000 e tempo 150 s, respectivamente, campo de velocidade, linhas de corrente, vorticidade, pressão e temperatura.

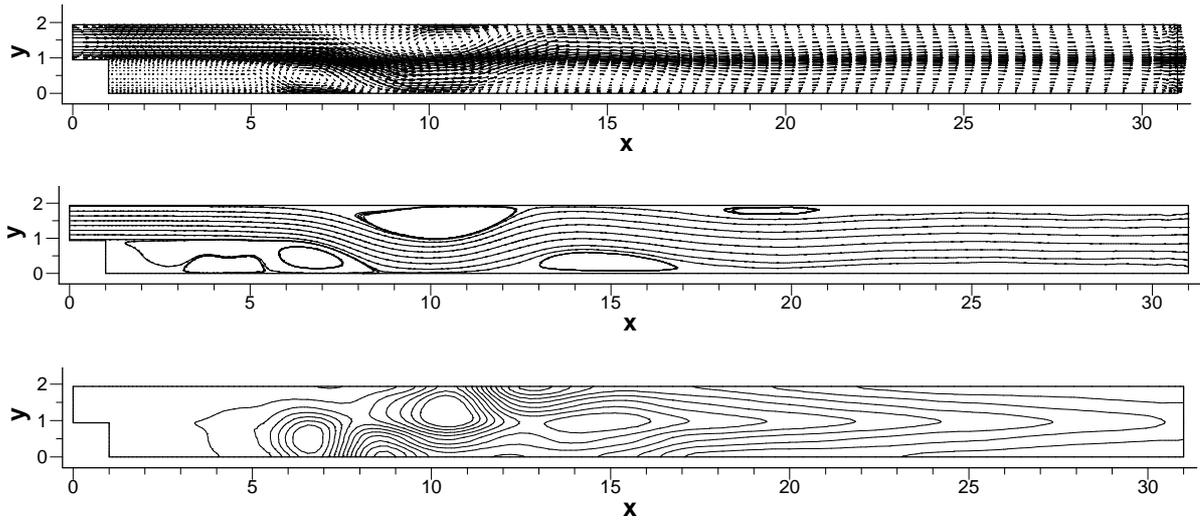


Figura 5.2.14: Solução para o regime turbulento - Reynolds 10000, respectivamente, campo de velocidades médias, linhas de corrente e campo de pressão média.

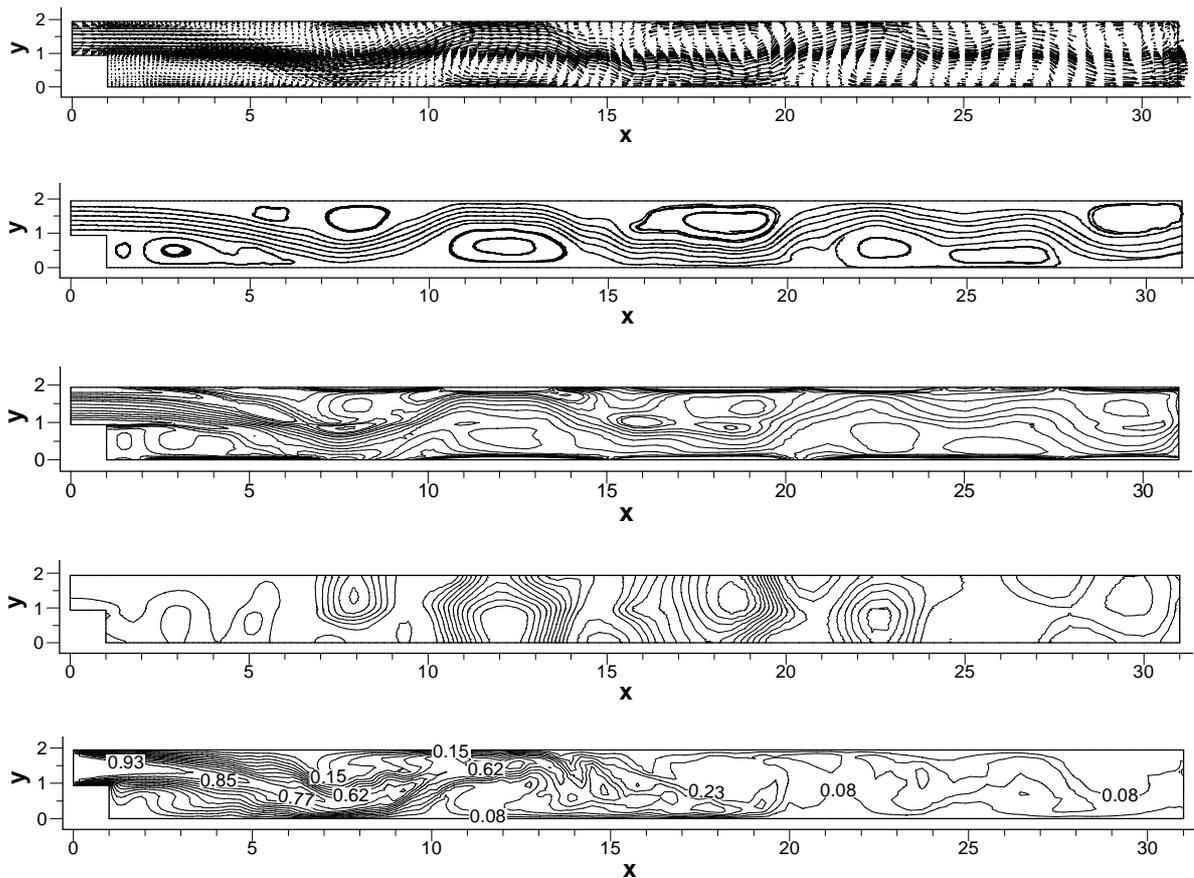


Figura 5.2.15: Solução para o regime turbulento - Reynolds 40000 e tempo 150 s, respectivamente, campo de velocidade, linhas de corrente, campos de vorticidade, pressão e temperatura.

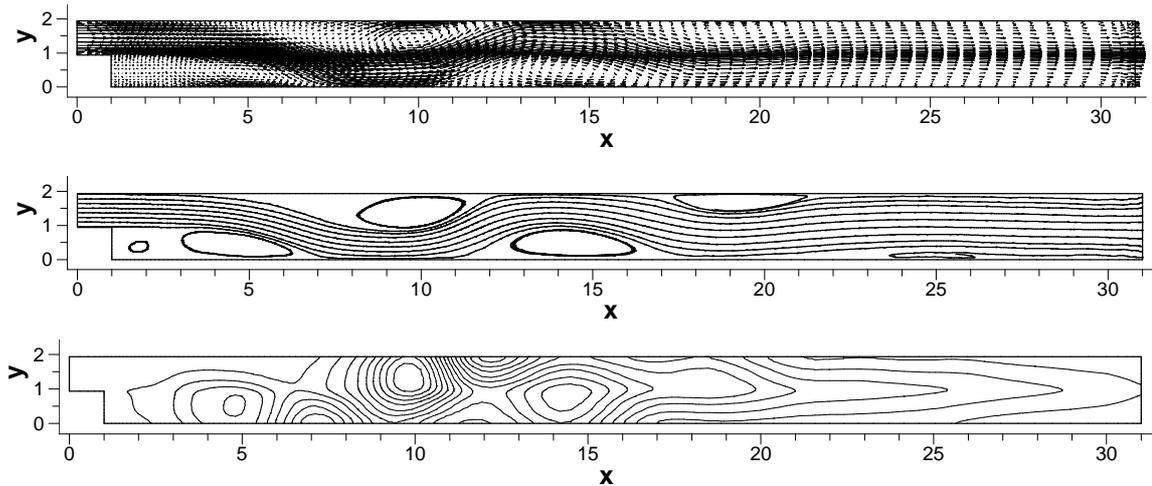


Figura 5.2.16: Solução para o regime turbulento - Reynolds 40000, respectivamente, campo de velocidades médias, linhas de corrente e campo de pressão média.

5.3 ESCOAMENTO BIDIMENSIONAL NUM CANAL COM DEGRAU

O objetivo da aplicação é o de testar e avaliar o desempenho global do esquema de adaptação automática de malhas tridimensionais. São cuidadosamente analisados o desempenho e a eficiência dos indicadores de erro, do critério de adaptação de malhas, do processo de refinamento, da suavização e da estruturada de dados. A solução é obtida através da simulação das equações de Navier-Stokes, sem modelo.

A aplicação consiste na simulação bidimensional de um escoamento num canal com degrau em expansão. Para obter uma solução de melhor qualidade, a malha é submetida a um esquema de adaptação, realizado ao longo de cálculo da solução e interagindo com a mesma.

O domínio computacional do canal tem a altura, na entrada, $h = 1,00$ m; a altura do degrau, $s = 0,94$ m; o comprimento à montante do degrau, $x_e = 1,00$ m; e o comprimento à jusante de degrau, $x_r = 30,00$ m, semelhante ao domínio apresentado na Figura 5.2.1. A variável x_r representa o comprimento de recolamento do vórtice junto ao degrau.

Considera-se que o vetor de velocidade nos contornos sólidos e a componente de velocidade normal aos planos de simetria são nulos. Na saída, à direita do domínio, as velocidades são livres e a pressão é nula. O perfil de velocidades na entrada é parabólico, completamente desenvolvido e normal ao plano, definido pela Eq. (5.2.1). Para a obtenção da solução, foi utilizado $Re = 100$, conforme definido em Armaly et al. (1983).

O domínio computacional foi discretizado inicialmente com uma malha grosseira não estruturada e com elementos uniformemente distribuídos. A malha, mostrada parcialmente na Figura 5.3.1, contém 7333 nós e 20735 elementos tetraédricos, em uma única camada, uma vez que a simulação é realizada bidimensionalmente, mas com o código computacional tridimensional.

Na solução numérica, em regime permanente, obtida através da malha grosseira, as linhas de correntes oscilam na região do vórtice, devido à malha ser demasiadamente grosseira neste local, como pode ser observado na Fig 5.3.2.

Em função disto, uma nova solução é calculada, agora empregando o esquema de adaptação automática de malhas, conforme descrito neste trabalho. Para obter a solução, foram realizados dois níveis de refinamentos. No primeiro nível, foram utilizados os indicadores de erro de mudança de direção da velocidade, de baixas velocidades (condicionado à região do degrau) e de gradientes de velocidade, respectivamente, com os seguinte coeficientes, para o critério de adaptação: $\mathbf{a} = 1,0$, para os dois primeiros indicadores e $\mathbf{a} = 1,4$, para o terceiro. No entanto, para o segundo nível de refinamentos, foi utilizado somente o indicador de erro que leva em consideração as baixas velocidades, condicionado à região do degrau, com o coeficiente $\mathbf{a} = 0,7$. A malha gerada, após aplicados os dois níveis de refinamento, é mostrada na Figura 5.3.3. Na Figura 5.3.4, é apresentada a malha, após aplicado o processo de suavização, a qual foi utilizada para a obtenção da solução final.

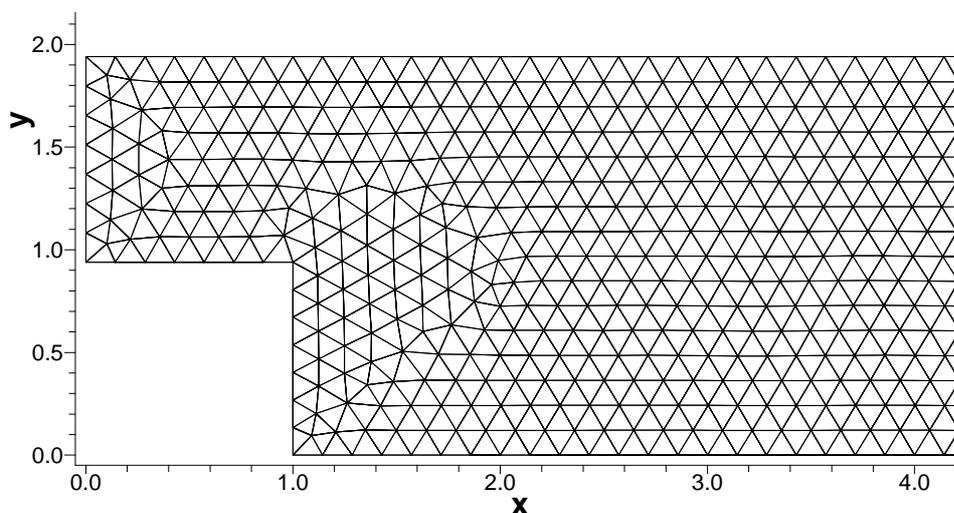


Figura 5.3.1: Detalhes da malha inicial, no plano de simetria.

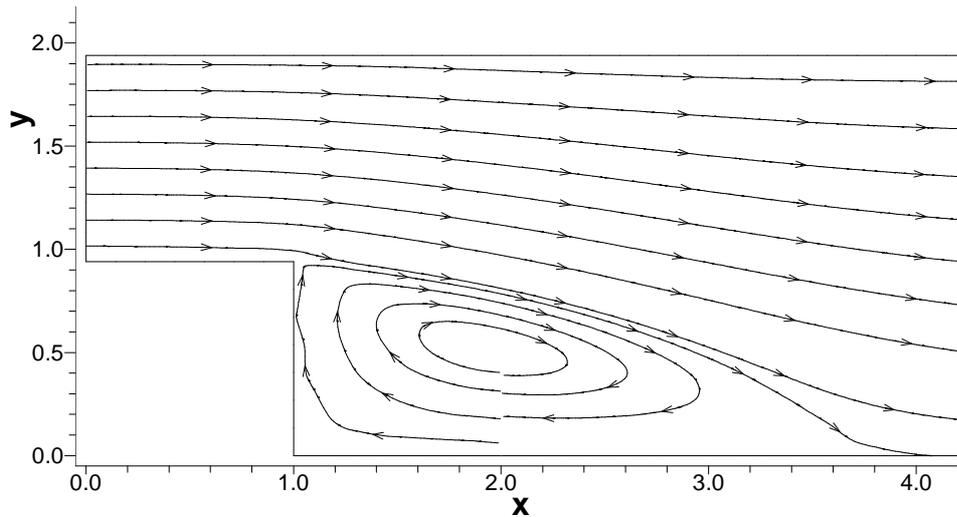


Figura 5.3.2: Linhas de corrente obtidas através da malha grosseira.

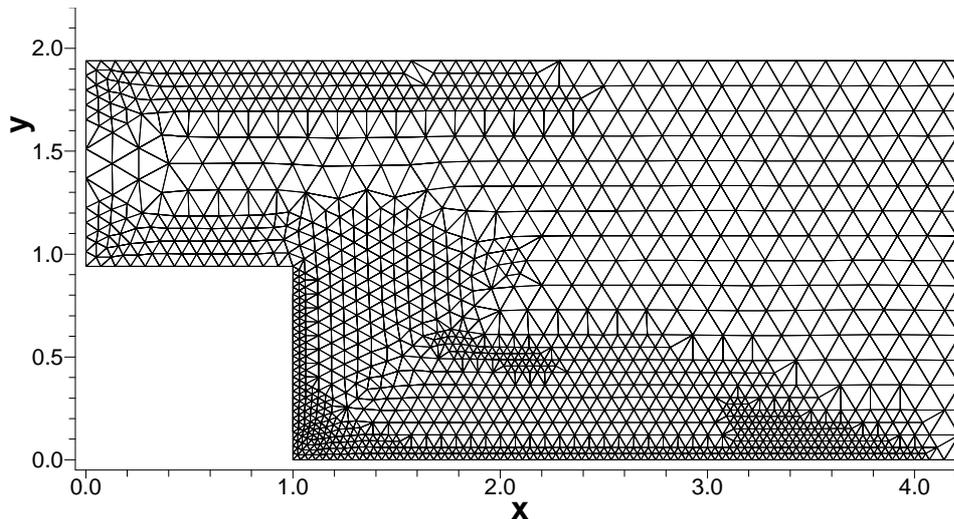


Figura 5.3.3 Detalhes da malha refinada, no plano de simetria.

Observe-se que a adaptação da malha foi realizada simultaneamente e interativamente com o cálculo da solução numérica.

Como se pode evidenciar, comparativamente, a malha refinada e suavizada apresenta uma melhor distribuição de elementos nas regiões de transição de elementos refinados e não refinados, além de apresentar elementos de melhor qualidade geométrica.

As linhas de corrente, obtidas após aplicação do esquema de adaptação de malhas, estão plotadas na Figura 5.3.5. Verifica-se que as linhas de corrente, na região do vórtice, mais precisamente junto à parede do degrau, não mais apresentam oscilações, além de

apresentarem um melhor traçado em toda a região do vórtice. Logo, os refinamentos efetuados na malha proporcionaram a obtenção de uma solução de melhor qualidade.

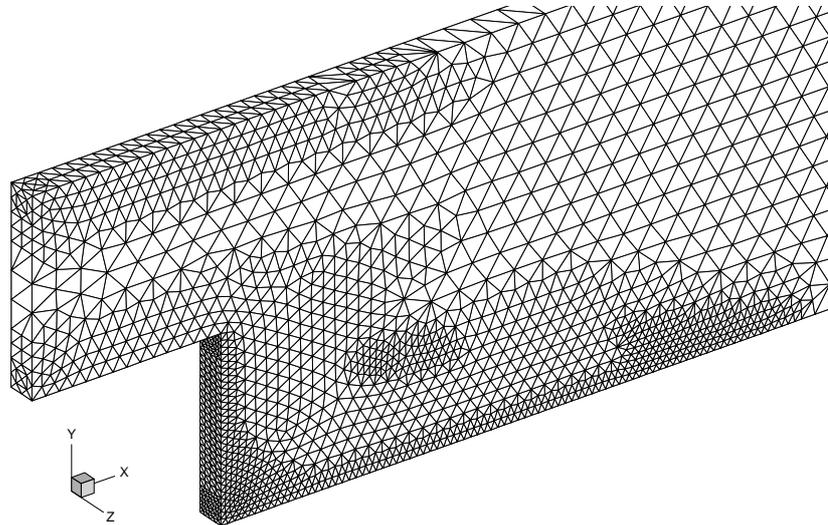


Figura 5.3.4: Detalhes da malha refinada e suavizada.

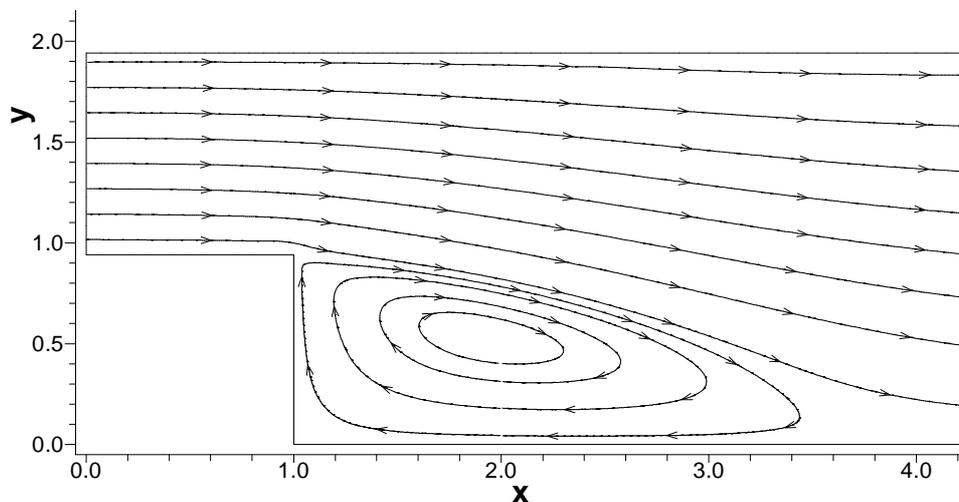


Figura 5.3.5: Linhas de corrente, obtida através da malha refinada e suavizada.

O comprimento de recolamento do vórtice junto ao degrau, obtido através da malha grosseira, foi $x_r = 2,72$, enquanto com a malha refinada e suavizada, o valor é levemente maior, $x_r = 2,80$. Os resultados são semelhantes ao obtido experimentalmente por Armaly et al. (1983) e ao resultado obtido numericamente por Williams e Baker (1997), apresentados anteriormente.

5.4 ESCOAMENTO AO REDOR DE UMA ESFERA

Esta aplicação trata de um escoamento laminar, tridimensional e isotérmico, de um fluido viscoso e incompressível, no entorno de uma esfera. As soluções são obtidas através da simulação das equações de Navier-Stokes, sem modelo. O número de Reynolds adotado é $Re = 100$, onde a velocidade e o comprimento característicos são, respectivamente, a velocidade não perturbada e o diâmetro da esfera, ambos unitário.

Os objetivos aqui abordados são relacionados à estratégia de adaptação de malhas tridimensionais e o transporte de uma quantidade escalar (poluente). São testados e analisados os indicadores de erro, o critério de adaptação, o esquema refinamento, o processo de suavização e a estrutura de dados. No entanto, por razões físicas do problema, aspectos relativos à turbulência e ao desrefinamento, por ora, são deixados de lado. Nesta aplicação, são realizados vários níveis de refinamentos e, em cada nível, a solução numérica é analisada e comparada com soluções apresentadas na literatura, até a obtenção de uma solução de boa qualidade.

O diâmetro da esfera foi considerado unitário e o domínio computacional foi dimensionado de forma que o plano de contorno da entrada, da saída e das demais planos de contornos localizam-se a oito unidades do centro da esfera. Considerando a simetria do problema, a simulação numérica foi realizada somente para um quarto do domínio computacional, por motivos de economia nos custos computacionais, além de propiciar uma melhor visualização das malhas refinadas.

Considerou-se que, na entrada e nas laterais do domínio computacional, o vetor de velocidade não perturbado é unitário ($u_1 = 1,0$, $u_2 = 0,0$ e $u_3 = 0,0$) e, na saída, o vetor de velocidades é livre e a pressão é imposta como sendo nula. Nos planos de simetria, a componente de velocidade normal ao plano é nula. Considerando a viscosidade do fluido, na superfície da esfera, é imposta a condição de não deslizamento – vetor de velocidades nulo.

Para simular o transporte de concentração (poluente), foi considerado que o fluido da entrada do domínio computacional tem concentração constante, $C_\infty = 0,0$. Adotou-se que, na superfície da esfera, a concentração do poluente é também constante, unitária ($C_w = 1,0$). Nos planos de simetria e nos demais contornos laterais os gradientes de concentração normais aos

planos são considerados nulos. O coeficiente de difusividade foi adotado como sendo igual para todas as direções, ou seja, $D_x = 0,01$, $D_y = 0,01$ e $D_z = 0,01$.

O domínio computacional foi discretizado, inicialmente, com uma malha grosseira não estruturada, onde os detalhes podem ser visualizados nas Figuras 5.4.1 e 5.4.2. A malha inicial (MI) possui 4312 nós e 21088 elementos.

Como a solução numérica obtida sob a malha inicial não tinha boa qualidade, foi realizado o primeiro nível de refinamento, utilizando cinco indicadores de erro: o primeiro, que permite identificar as sub-regiões de baixas velocidades; o segundo, os gradientes de velocidade; o terceiro, os gradientes de concentração; o quarto tem o objetivo de identificar os gradientes de pressão; e o quinto, os locais em que ocorrem mudanças de direção das velocidades. Para cada um dos indicadores de erro, foram utilizados, respectivamente, os seguintes parâmetros, $a_I = (0,7; 7,0; 1,0; 1,0$ e $0,7)$, para a Eq. (3.2.3).

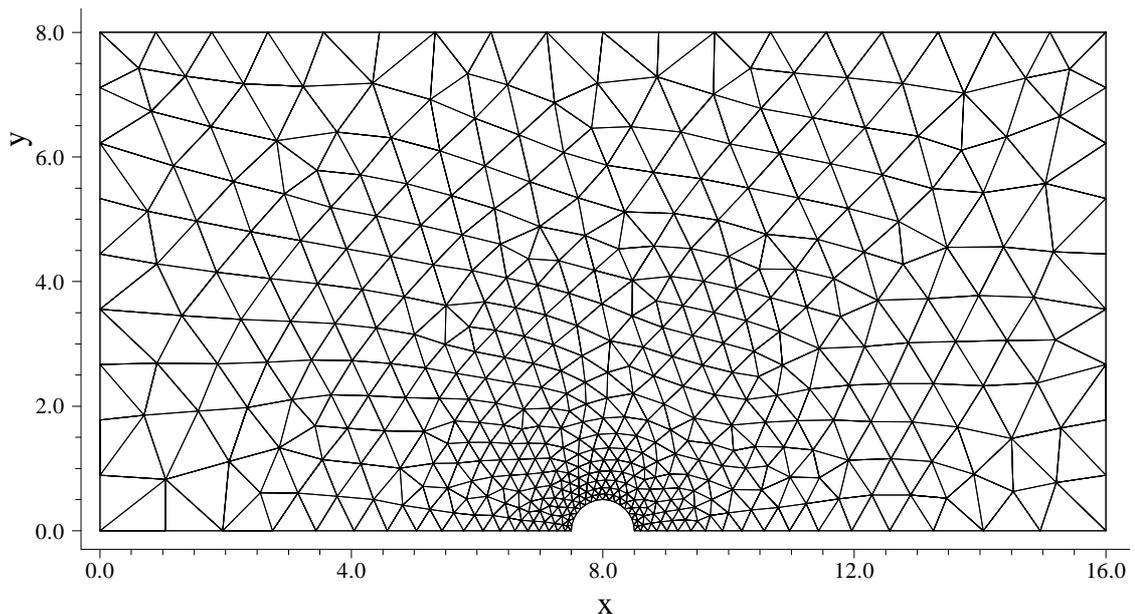


Figura 5.4.1: Malha inicial do plano de simetria xy .

Os diferentes parâmetros têm relação com o comportamento da distribuição normal, ou não, dos indicadores de erro (da teoria estatística) e com a intensidade de refinamentos que se deseja dar com referência ao indicador (quanto menor for o parâmetro a_I maior é a abrangência dos refinamentos – mais elementos são refinados). Normalmente, este controle é uma decisão do usuário; por razões de custos computacionais, é utilizado o mínimo necessário

e suficiente de refinamentos, sem perder de vista a obtenção de uma solução numérica de qualidade.

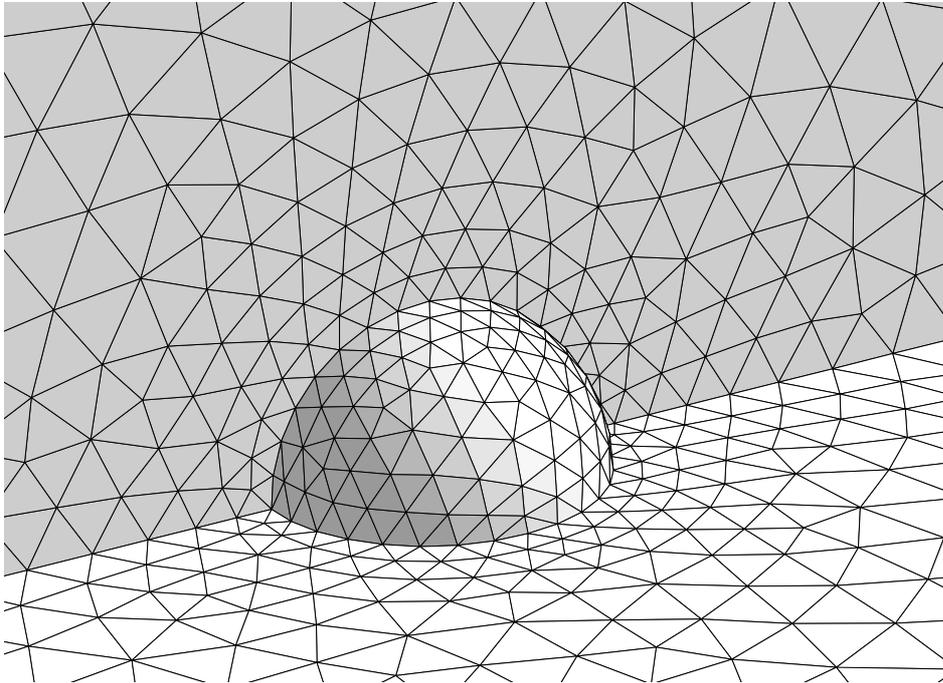


Figura 5.4.2: Detalhes da malha inicial na superfície da esfera e nos planos de simetria xy e xz .

Com o propósito de identificar a contribuição de cada um dos indicadores de erro, na construção da malha refinada, estão mostrados, nas Figuras 5.4.3, 5.4.4, 5.4.5, 5.4.6 e 5.4.7, os refinamentos produzidos por cada um deles. A malha obtida, após o primeiro nível de refinamento (MRS1), já suavizada, é mostrada nas Figura 5.4.8 em 2D e na Figura 5.4.9 em 3D. A mesma possui 7890 nós e 39448 elementos. Observe-se que, embora vários indicadores de erro se sobreponham, em algumas regiões do domínio computacional, os elementos ali localizados são refinados uma única vez, sem qualquer distinção dos demais.

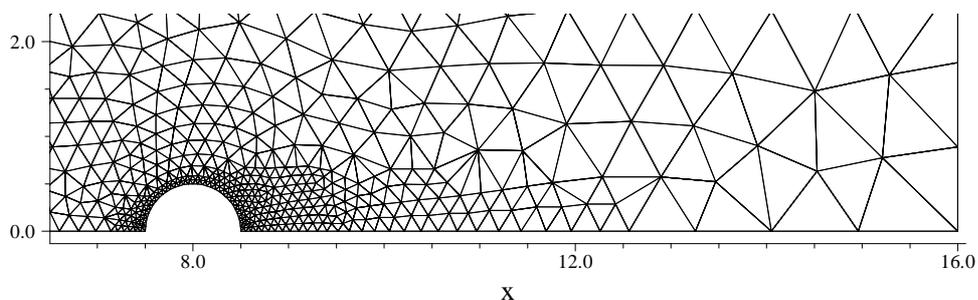


Figura 5.4.3: Contribuição dos refinamentos devido a baixas velocidades, plano de simetria xy .

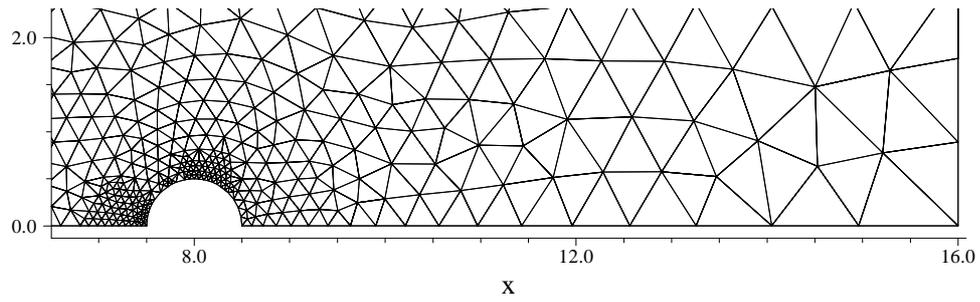


Figura 5.4.4: Contribuição dos refinamentos devido aos gradientes de pressão, plano de simetria xy .

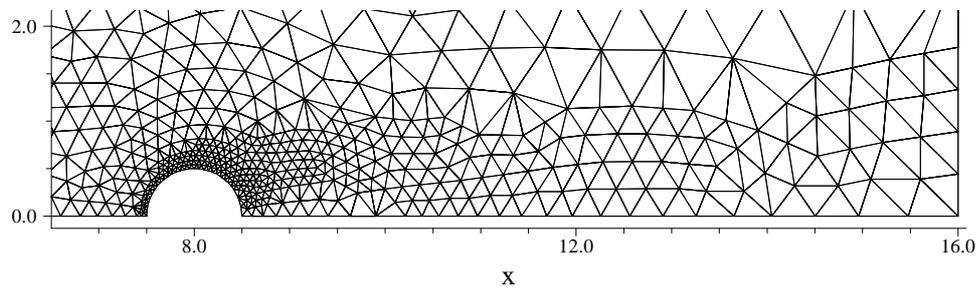


Figura 5.4.5: Contribuição dos refinamentos devido aos gradientes de concentração, plano de simetria xy .

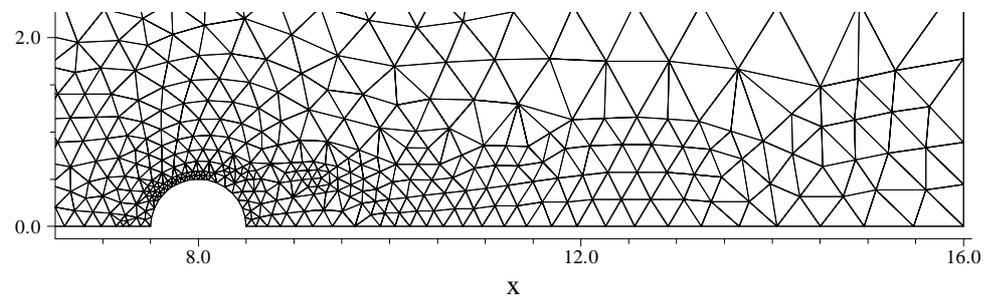


Figura 5.4.6: Contribuição dos refinamentos devido aos gradientes de velocidade, plano de simetria xy .

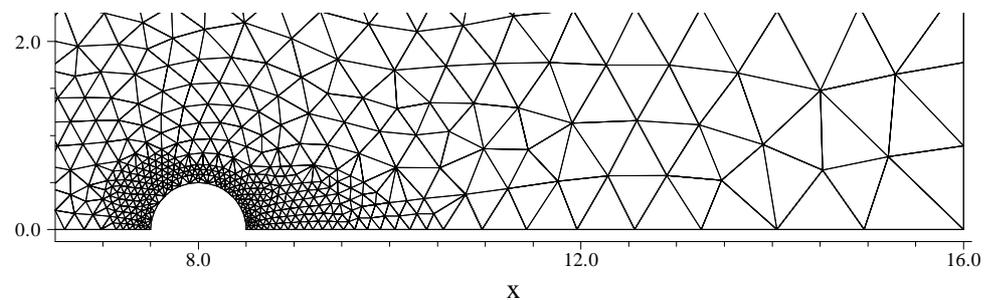


Figura 5.4.7: Contribuição dos refinamentos devido à mudança de direção da velocidade, plano de simetria xy .

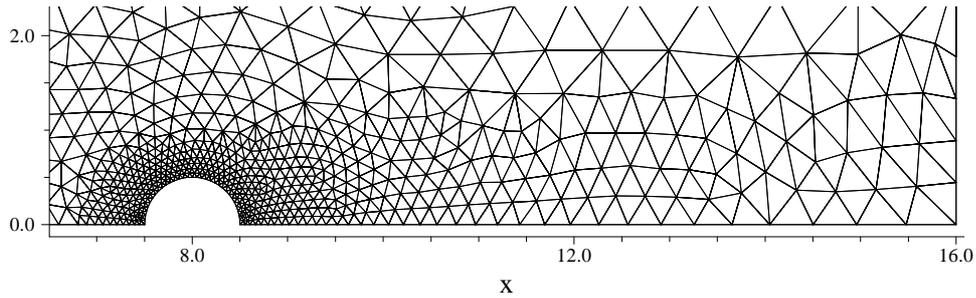


Figura 5.4.8: Malha com a contribuição de todos os indicadores de erro, plano de simetria xy .

No segundo nível de refinamento, foram considerados os indicadores de erro de baixas velocidades, o gradiente de concentração e a mudança de direção de velocidade. No terceiro nível de refinamento, somente o indicador de baixas velocidades foi considerado, objetivando refinar o entorno da esfera e na região do vórtice, por se tratar da região de maior interesse, pois ali os fenômenos físicos ocorrem com maior intensidade. As malhas finais, geradas pelo segundo e terceiro níveis de refinamentos, suavizadas, estão mostradas, respectivamente, nas Figuras 5.4.10 e 5.4.11. A malha refinada, com dois níveis de refinamentos (MRS2), possui 25391 nós e 134621 elementos e a malha refinada em três níveis (MRS3) contém 52464 nós e 278384 elementos.

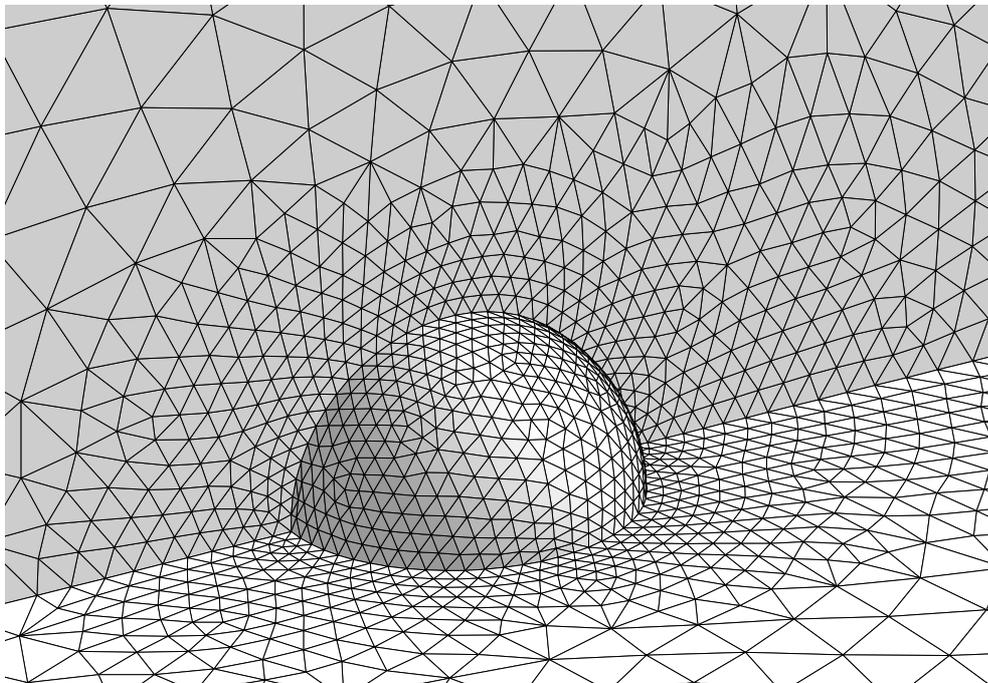


Figura 5.4.9: Detalhes da malha refinada com a contribuição de todos os indicadores de erro.

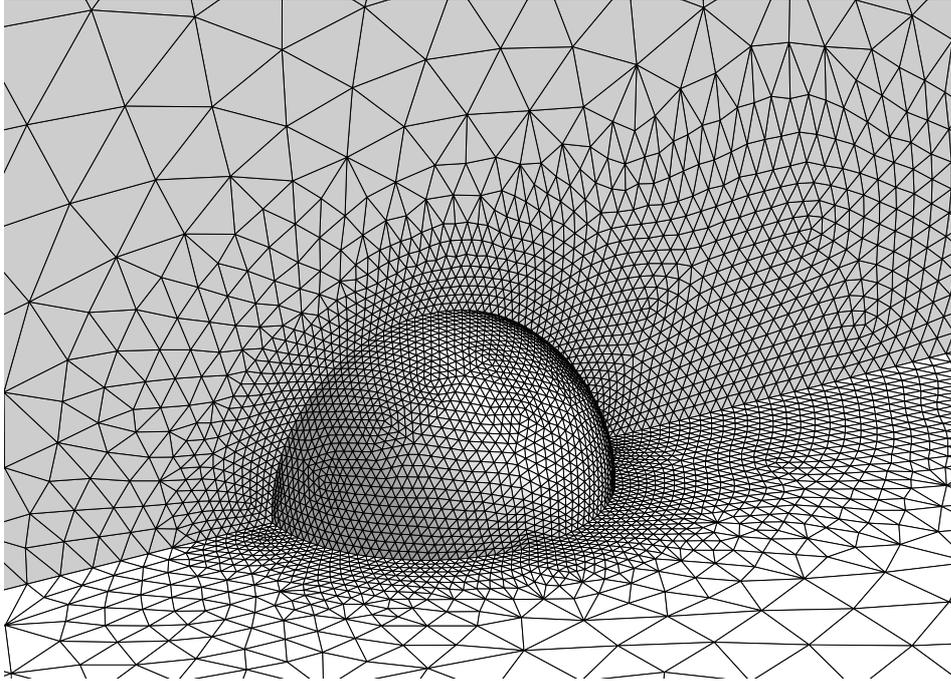


Figura 5.4.10: Detalhes da malha com dois níveis de refinamentos.

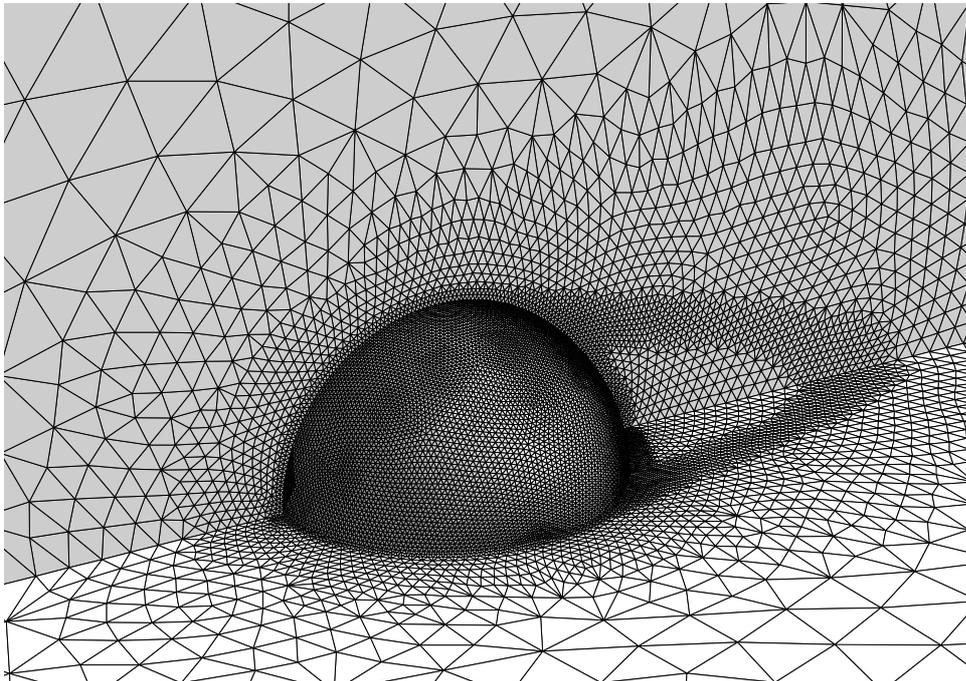


Figura 5.4.11: Detalhes da malha com três níveis de refinamentos.

Na Tabela 5.4.1, são apresentados os valores médios da qualidade geométrica dos elementos tetraédricos e das faces do contorno do domínio computacional, para a malha

inicial (MI) e as malhas refinadas e suavizadas (MRS1, MRS2 e MRS3). Observe-se que as malhas refinadas e suavizadas apresentam uma adequada transição entre os elementos de diferentes tamanhos e os elementos possuem uma boa qualidade geométrica, como pode ser constatado na Tabela 5.4.1. Os elementos das malhas suavizadas apresentam uma melhor qualidade que os elementos na malha inicial.

Tabela 5.4.1 Qualidade geométrica média dos elementos da malha e das faces dos elementos do contorno.

Entidade	MI	MRS1	MRS2	MRS3
Elementos	0,744	0,778	0,783	0,762
Faces	0,982	0,976	0,966	0,965

Além das malhas apresentadas, foram geradas outras tantas; no entanto, as que melhor representam os fenômenos de interesse e apresentaram melhores resultados são as que foram apresentadas acima.

Para cada uma das malhas geradas, ou seja, com as malhas: MI, MRS1, MRS2 e MRS3, foram obtidas soluções numéricas e, nas soluções mais significativas, foram analisados os seguintes fenômenos: o campo de velocidades; o campo de pressão; o campo de concentração; linhas de corrente; o coeficiente de arraste, de fricção e de pressão; o comprimento de recirculação do vórtice, à jusante da esfera; e o ponto de separação do escoamento.

Nas Figuras 5.4.12, 5.4.13, 5.4.14 e 5.4.15 são mostrados detalhes de resultados no plano de simetria xy , obtidos com a malha MRS3, respectivamente, linhas de corrente, campo de concentração, vorticidade e campo de pressão.

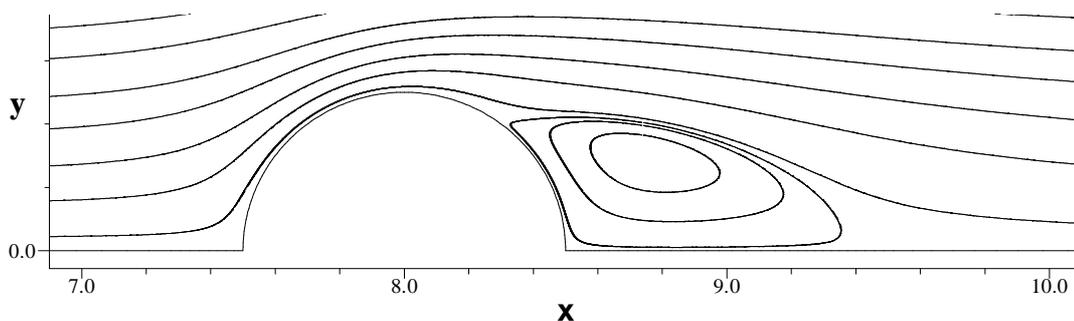


Figura 5.4.12: Detalhes das linhas de corrente no plano de simetria xy .

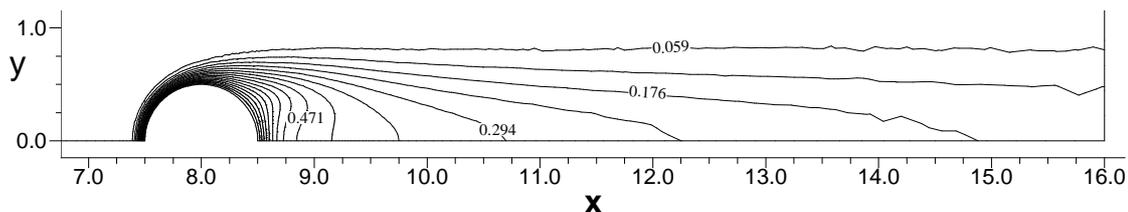


Figura 5.4.13: Detalhes do campo de concentração no plano de simetria xy .

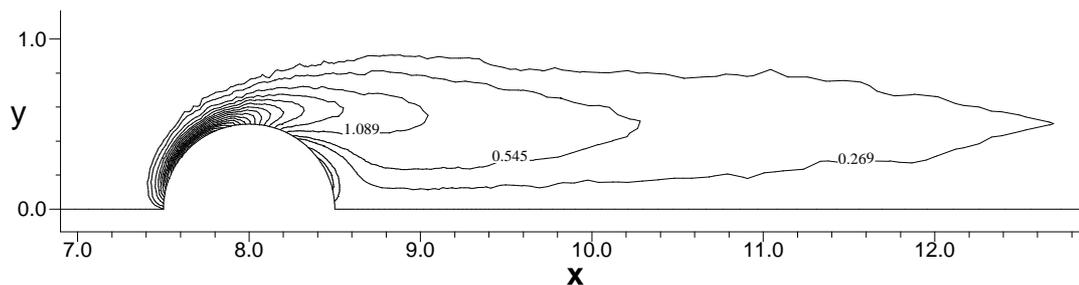


Figura 5.4.14: Detalhes da vorticidade no plano de simetria xy .

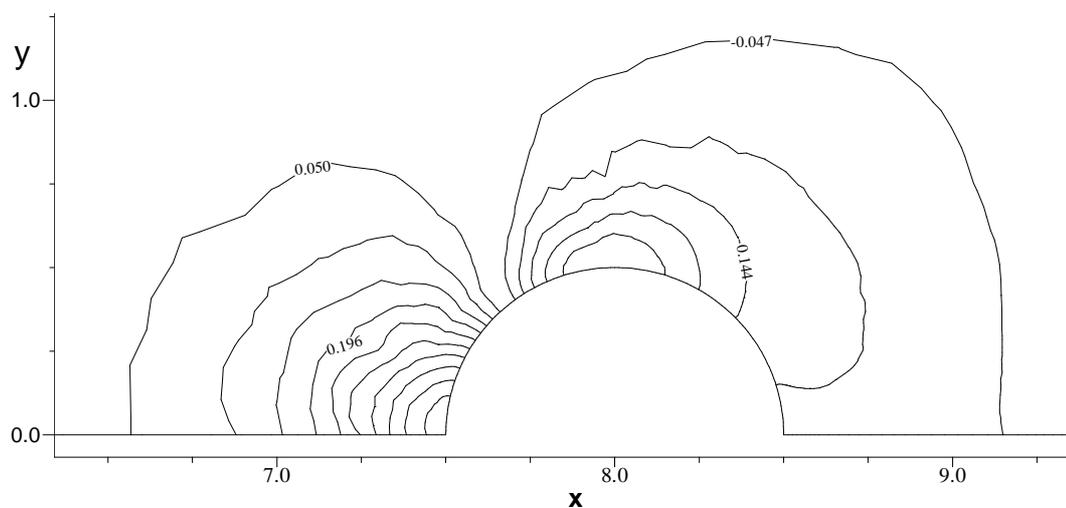


Figura 5.4.15: Detalhes do campo de pressão no plano de simetria xy .

De forma semelhante, nas Figuras 5.4.16, 5.4.17, 5.4.18 e 5.4.19, são apresentados, respectivamente, detalhes em 3D, das seguintes soluções: linhas de corrente, campo de concentração, vorticidade e campo de pressão, obtidos através da malha refinada e suavizada, MR3. Na Figura 5.4.16, foram traçadas linhas de corrente nos planos de simetria xy e xz , bem como num plano bisetor, com relação aos planos de simetria. Observe-se que o escoamento em torno da esfera, para o número de Reynolds considerado, é simétrico para qualquer plano que intersecciona o eixo das abscissas (Ox). Também é evidente a simetria nos campo de

concentração, campo de pressão e vorticidade. No entanto, neste último, há uma oscilação na região frontal e junto à esfera, como pode ser visualizado na Figura 5.4.18.

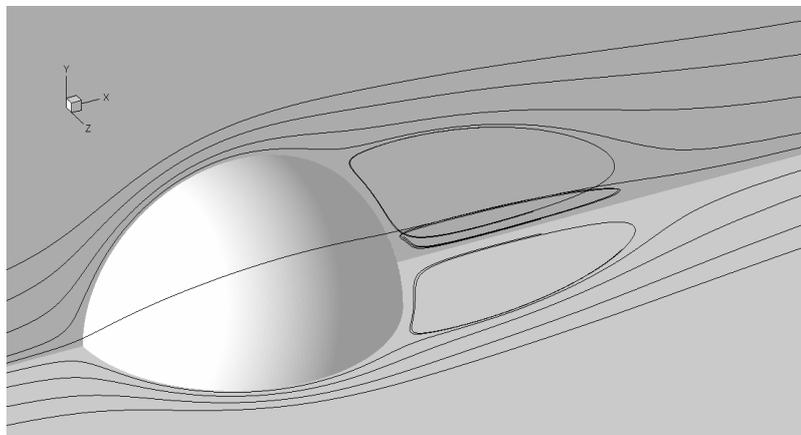


Figura 5.4.16: Detalhes das linhas de corrente em 3D.

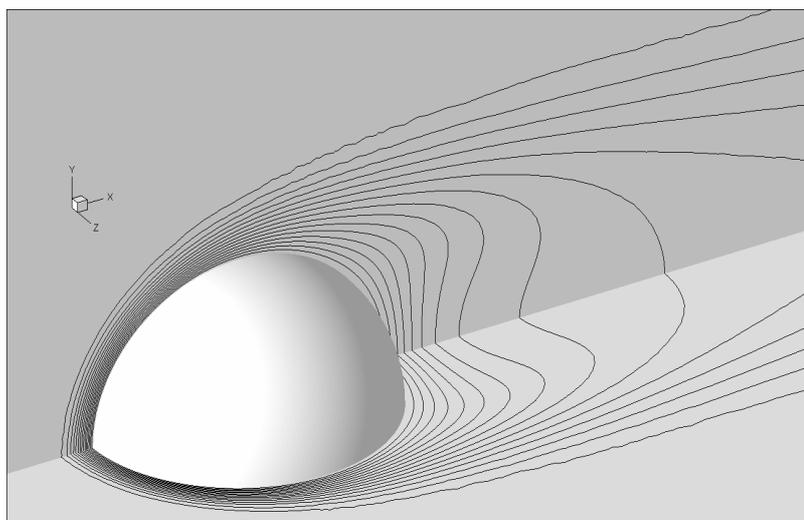


Figura 5.4.17: Detalhes do campo de concentração em 3D.

O coeficiente de pressão, na superfície da esfera, no plano de simetria (xy) com a malha refinada MRS3, juntamente com os resultados de Gülçat e Aslan (1997), são apresentados na Figura 5.4.20. O resultado apresenta boa concordância com a referência. Comenta-se que os resultados obtidos com a malha refinada pela segunda vez, já apresentavam bons resultados, no entanto, não foram apresentados, simplesmente, para não poluir a representação gráfica.

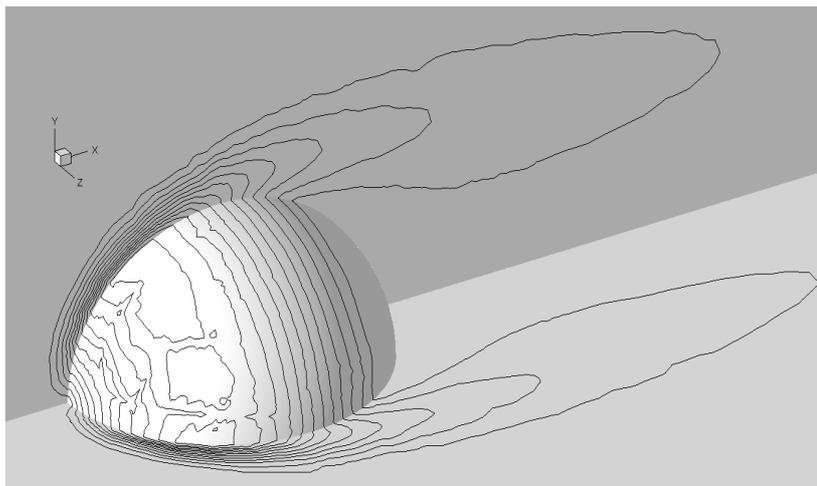


Figura 5.4.18: Detalhes do campo de vorticidade em 3D.

Na Tabela 5.4.2, são apresentados e comparados (com resultados de outros autores pertinentes à literatura) os seguintes parâmetros: o coeficiente de arraste (C_D); o coeficiente de fricção com relação ao coeficiente de arraste (C_{Df}/C_D); o comprimento de recirculação do vórtice à jusante da esfera, adimensionalizado pelo diâmetro da esfera (l_w/D); e o ponto de separação do escoamento na superfície da esfera, apresentado em função do ângulo (θ_s) medido com base no eixo da abscissa (sentido anti-horário).

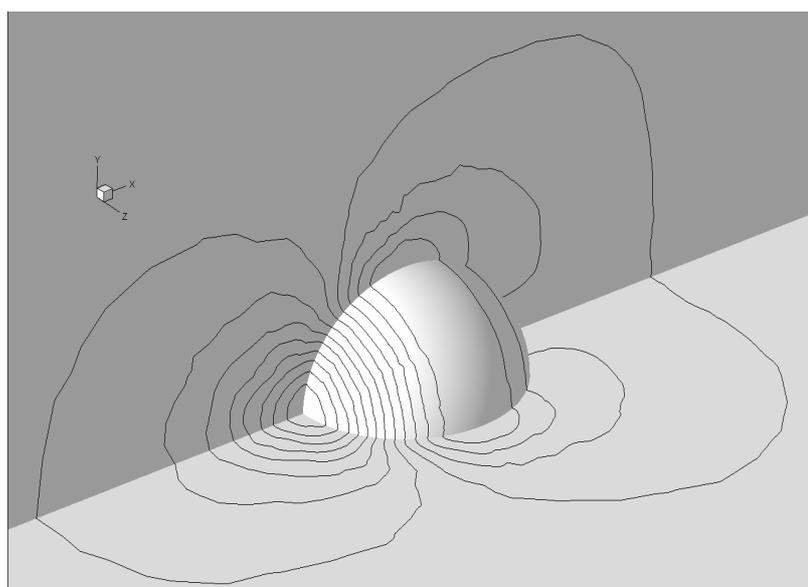


Figura 5.4.19: Detalhes do campo de pressão em 3D.

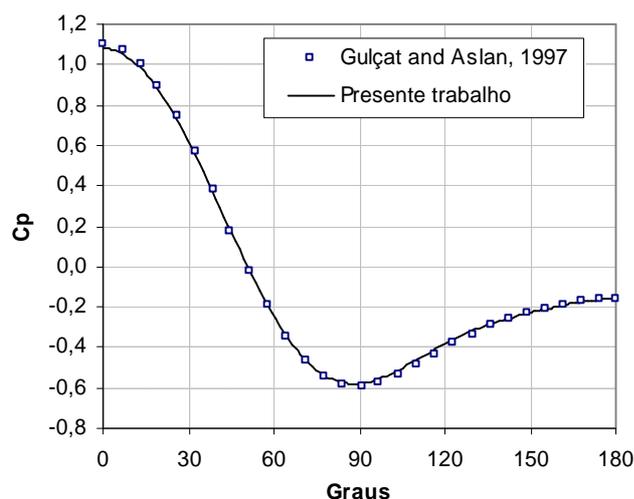


Figura 5.4.20: Representação gráfica do coeficiente de pressão.

Gülçat e Aslan (1997) apresentam resultados de Taneda, e Rimon e Cheng para o comprimento de recirculação, respectivamente, 0,90 e 0,86; e Rimon e Cheng obteve, para o ponto de separação, um ângulo de 53,5°. Ainda em Taneda, e Rimon e Cheng apresentam dados, onde o coeficiente de arrasto é variável, entre 1,0 a 1,1. Considerando os resultados contidos na bibliografia citada, verifica-se que os resultados foram de boa qualidade e que os três níveis de refinamentos contribuíram significativamente para a obtenção dos mesmos.

Tabela 5.4.2: Comparações de alguns parâmetros do escoamento sobre uma esfera.

Referência	C_D	C_{Df}/C_D	l_w/D	q_s (graus)
Presente trabalho (MR1)	1,064	0,539	0,860	48,8
Presente trabalho (MR2)	1,079	0,536	0,870	52,8
Presente trabalho (MR3)	1,084	0,534	0,874	53,4
Teixeira (2001)	1,07	0,53	0,94	55,0
Gülçat e Aslan (1997)	1,07	0,51	0,93	55,0

Analisando os resultados apresentados na Tabela 5.4.2, verifica-se que todos os resultados são dependentes da malha utilizada, ficando claro que, à medida que a malha é refinada, os resultados apresentam uma melhor qualidade, quando comparados com os resultados da Tabela 5.4.2 e com os apresentados no parágrafo anterior. De qualquer forma, existem pequenas diferenças, mas como nos diferentes trabalhos não foram utilizadas as mesmas malhas e os resultados são dependentes da malha, estas diferenças são normais e compreensíveis.

Note-se que foram apresentados os resultados pertinentes aos três níveis de refinamentos, onde se pode verificar que todos os coeficientes apresentados são dependentes da malhas, significando que, quanto mais refinada é a malha, melhor é a precisão da solução numérica.

5.5 ESCOAMENTO SOBRE UM CILINDRO

A convecção mista descreve escoamentos com grande aplicação na engenharia, tais como em trocadores de calor, sistemas de resfriamento eletrônicos, sistemas de ventilação e em coletores solares, entre outros. No regime de convecção mista, os efeitos devidos a forças de inércia e a forças de empuxo são da mesma grandeza. Em aplicações desta natureza, as forças inerciais produzem um certo padrão de escoamento, entretanto as forças de empuxo, devido aos gradientes de temperatura, podem atuar de forma significativa e modificar a estrutura do escoamento do sistema.

Abordando este aspecto, a presente aplicação trata de escoamentos isotérmicos e não isotérmicos em torno de um cilindro colocado transversalmente ao escoamento principal de um canal. O domínio computacional e as condições de contorno estão apresentados na Figura 5.5.1, onde o valor da variável d , diâmetro do cilindro, é considerado unitário.

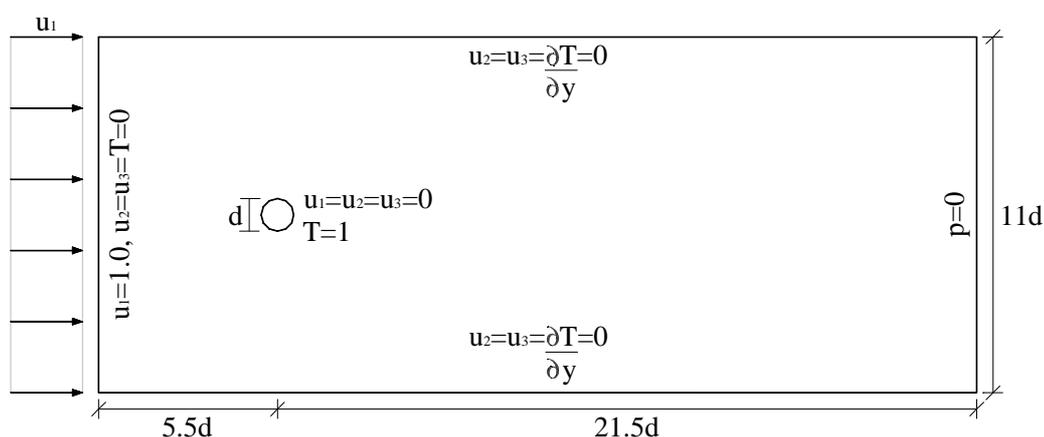


Figura 5.5.1: Domínio computacional e condições de contorno.

Como a simulação realizada é bidimensional e o código computacional utilizado para obter a solução numérica é tridimensional, considerou-se que a largura do canal (em z) e o comprimento do cilindro são de 0,10 m. Assim, a largura é suficiente para gerar uma camada de elementos tetraédricos, na discretização do domínio computacional. Para completar as

condições de contorno, a componente do vetor velocidade normal aos planos de simetria é nula. Inicialmente, o domínio computacional foi discretizado com uma malha não estruturada, conforme mostrado na Figura 5.5.2, contendo 6090 nós e 17677 elementos.

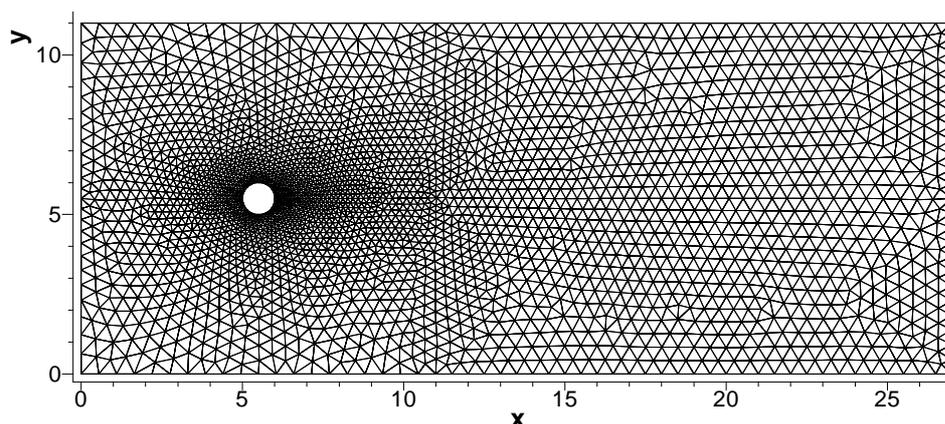


Figura 5.5.2: Discretização do domínio computacional.

Como a simulação realizada é bidimensional e o código computacional utilizado para obter a solução numérica é tridimensional, considerou-se que a largura do canal (em z) e o comprimento do cilindro são de 0,10 m. Assim, a largura é suficiente para gerar uma camada de elementos tetraédricos, na discretização do domínio computacional. Para completar as condições de contorno, a componente do vetor velocidade normal aos planos de simetria é nula. Inicialmente, o domínio computacional foi discretizado com uma malha não estruturada, conforme mostrado na Figura 5.5.2, contendo 6090 nós e 17677 elementos.

Quando o escoamento é tratado como isotérmico, o termo fonte $\bar{S}_{\bar{u}_i}$ das equações de quantidade de movimento é considerado nulo. Por outro lado, quando o escoamento é não isotérmico, regime de convecção mista, o termo fonte é considerado como forças de empuxo, devido aos efeitos de gradientes de temperatura (Hatanaka e Kawahara, 1995), definido como:

$$\bar{S}_{\bar{u}_i} = \frac{Gr}{Re^2} T^* = RiT^* \quad (5.5.1)$$

tal que:

$$T^* = \frac{T - T_w}{T_w - T_\infty} \quad (5.5.2)$$

onde Gr representa o número de Grashof, Re ($= Ud / \mathbf{n}$) corresponde ao número de Reynolds, Ri é o número de Richardson, T^* é a temperatura adimensionalizada pelas temperaturas do fluido no infinito (T_∞) e a temperatura da parede do corpo (T_w) imerso no fluido.

Os números de Grashof, Richardson, Prandtl e Peclet são definidos, respectivamente, como:

$$Gr = \frac{g \beta \Delta T d^3}{\mathbf{n}^2} \quad (5.5.3)$$

$$Ri = \frac{Gr}{Re^2} \quad (5.5.4)$$

$$Pr = \frac{\mathbf{n}}{\mathbf{a}} \quad (5.5.5)$$

$$Pe = Pr Re = \frac{U d}{\mathbf{a}} \quad (5.5.6)$$

onde g é a aceleração da gravidade, \mathbf{b} representa o coeficiente de expansão térmica, \mathbf{DT} é um escalar que representa a variação da temperatura, d é um comprimento característico (diâmetro do cilindro), \mathbf{n} e \mathbf{a} são, respectivamente, a viscosidade cinemática e a difusividade térmica do fluido.

Na abordagem não isotérmica, considerou-se $Re = 100$, $Pr = 0,706$, portanto conforme Eq. (5.5.6), $Pe = 70,6$. Para simular os efeitos do cilindro aquecido e resfriado, como em Hatanaka e Kawahara (1995), foi considerado, para o número de Grashof, um intervalo entre $-10000 \leq Gr \leq 10000$. Este intervalo corresponde ao número de Richardson entre $-1,0 \leq Ri \leq 1,0$. No modelo matemático, definido pela Eq. (2.8), o cilindro aquecido ou resfriado é representado pelo sentido dos efeitos das forças de empuxo, no regime de convecção mista. O

cilindro aquecido é representado pelo número de Richardson positivo. Neste caso, os efeitos das forças de empuxo têm o mesmo sentido do escoamento principal. O número de Richardson negativo corresponde ao cilindro resfriado, indicando que a força de empuxo atua no sentido contrário ao do escoamento principal. No entanto, se $Ri = 0,0$, então não há efeitos, devido aos gradientes de temperatura, logo, o escoamento é isotérmico.

Como a malha inicial, mostrada na Figura 5.5.2, não era suficientemente fina na região próxima ao cilindro, onde ocorrem as baixas velocidades e os elevados gradientes de temperatura, a separação do escoamento e o desprendimento de vórtices, para propiciar uma solução de melhor qualidade, optou-se em refinar esta região.

Dois casos foram considerados, para aplicar o esquema de adaptação da malha: um, para simular os escoamentos em que o regime permanente é alcançado (para $Re = 40$ e $Re = 100$ com $Ri = 0,25, 0,5$ e $1,0$); e o outro, caso para os escoamentos transientes ($Re = 100$ com $Ri = -1,0, -0,5$ e $0,0$).

No primeiro caso, tomou-se como base, para o refinamento da malha, a simulação numérica obtida quando utilizados os valores de $Re = 100$ e $Ri = 1,0$. Na adaptação foi realizado um único nível de refinamento, utilizando os indicadores de erro de baixas velocidades e de gradientes de temperatura, com o coeficiente α_1 para o critério de adaptação igual a $0,7$, para ambos os indicadores. A malha refinada, contendo 9215 nós e 30433 elementos, e suavizada, é mostrada na Figura 5.5.3, enquanto detalhes amplificados da região do refinamento são apresentados na Figura 5.5.4 (esta malha foi utilizada para simular as aplicações com $Re = 40$ e com $Re = 100$, com o número de Richardson positivos). Observe-se que, na malha mostrada na Figura 5.5.4, há uma boa transição no tamanho de elementos, na interface de elementos refinados e não refinados, em consequência da aplicação do processo de suavização.

Segundo Choi et al. (1997), o escoamento isotérmico sobre um cilindro, conforme modelo físico, apresentado na Figura 5.5.1, mantém-se simétrico e o regime estacionário é alcançado até o número de Reynolds igual a 40. Buscando reproduzir estes resultados, na Figura 5.5.5, estão representadas as linhas de corrente, onde podem ser visualizados os dois vórtices gêmeos, à jusante do cilindro. O comprimento de recolamento (medido a partir da face do cilindro e adimensionalizado pelo diâmetro do mesmo) obtido foi de $x_d = 2,18$, enquanto os autores referenciados obtiveram $x_d = 2,14$.

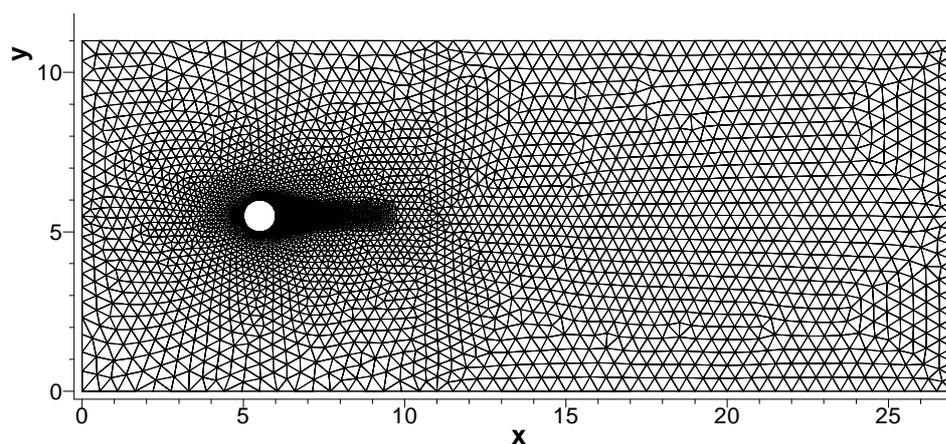


Figura 5.5.3: Malha refinada e suavizada, contendo 9215 nós e 30433 elementos.

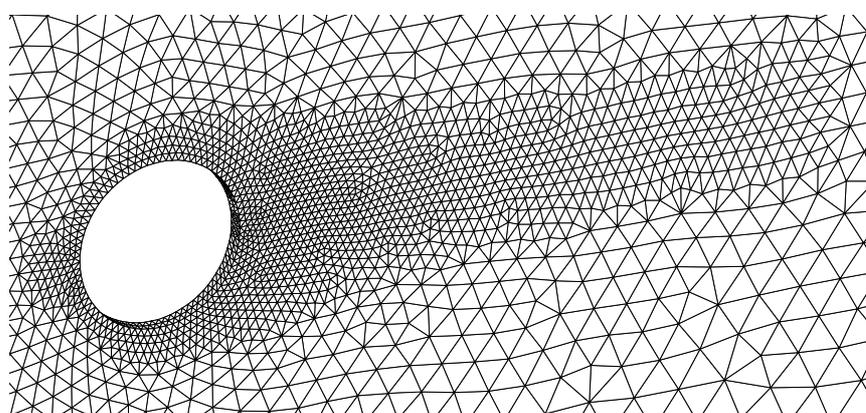


Figura 5.5.4: Detalhes da malha refinada e suavizada.



Figura 5.5.5: Linhas de corrente, $Re = 40$.

Aumentando o número de Reynolds acima de 40, o escoamento torna-se transiente e ocorre desprendimento de vórtices à jusante do cilindro. No entanto, a estrutura do escoamento pode ser alterada, se os efeitos de forças de empuxo, produzidas por gradientes de temperatura, forem levados em consideração. Em vista disto, várias situações de escoamentos não isotérmicos em torno de um cilindro aquecido/resfriado serão simulados e os resultados serão comparados com os obtidos por outros autores.

Os resultados de simulações numéricas, com $Re = 100$ e $Ri = 0,25, 0,5, 1,0$, são apresentados graficamente nas Figuras 5.5.6, 5.5.7 e 5.5.8, onde em cada uma delas são mostradas as linhas de corrente e as isotermas. À medida que o número de Richardson aumenta (de 0,25 a 1,0), o tamanho dos vórtices decrescem, como podem ser visualizados nas linhas de corrente, mostradas nas Figuras 5.5.6, 5.5.7 e 5.5.8. Este fenômeno ocorre devido a que os efeitos das forças de empuxo atuam no mesmo sentido do escoamento principal. Assim, com o aumento de Ri , o ponto de separação do escoamento, em ambos os lados da superfície do cilindro, deslocam-se gradativamente à jusante.

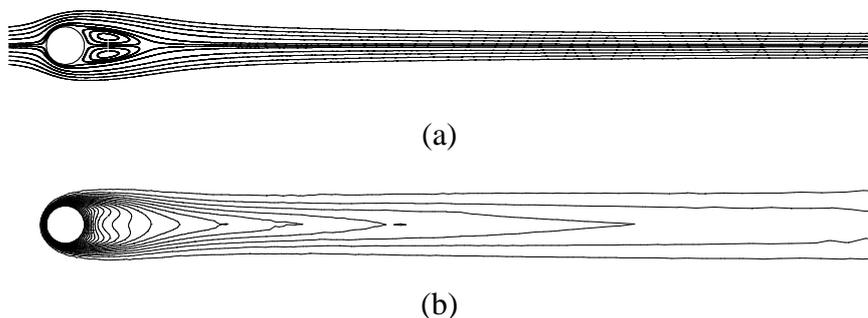


Figura 5.5.6: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro aquecido, para $Re = 100$ e $Ri = 0,25$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.

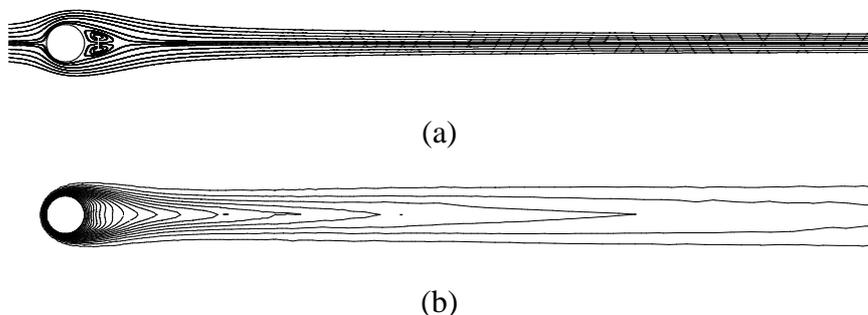


Figura 5.5.7: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro aquecido para $Re = 100$ e $Ri = 0,5$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.

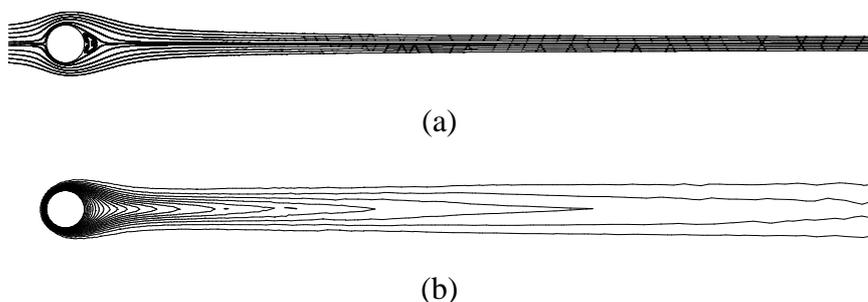
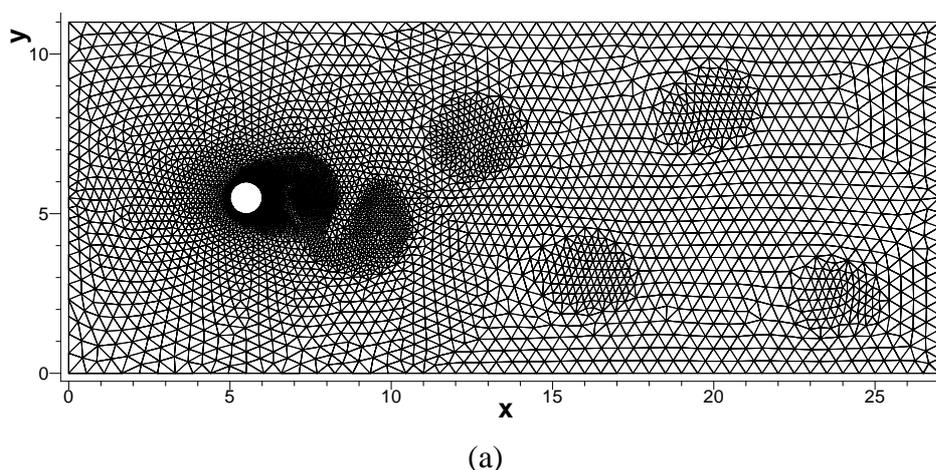
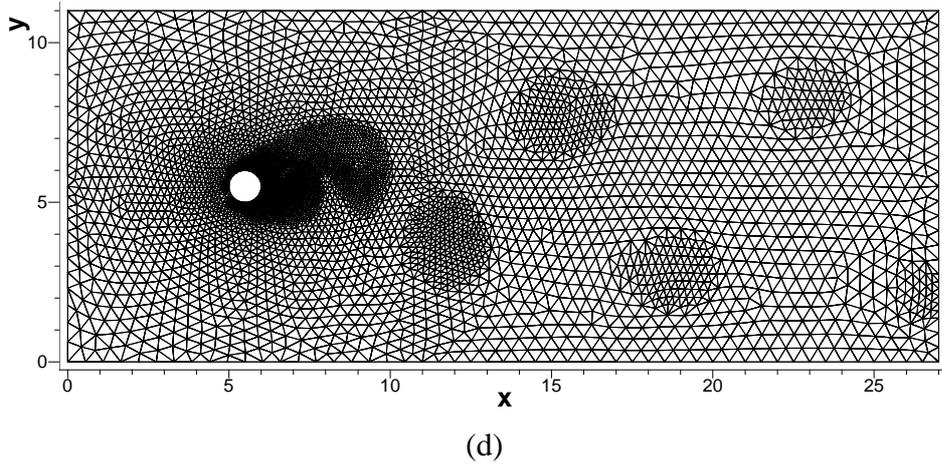
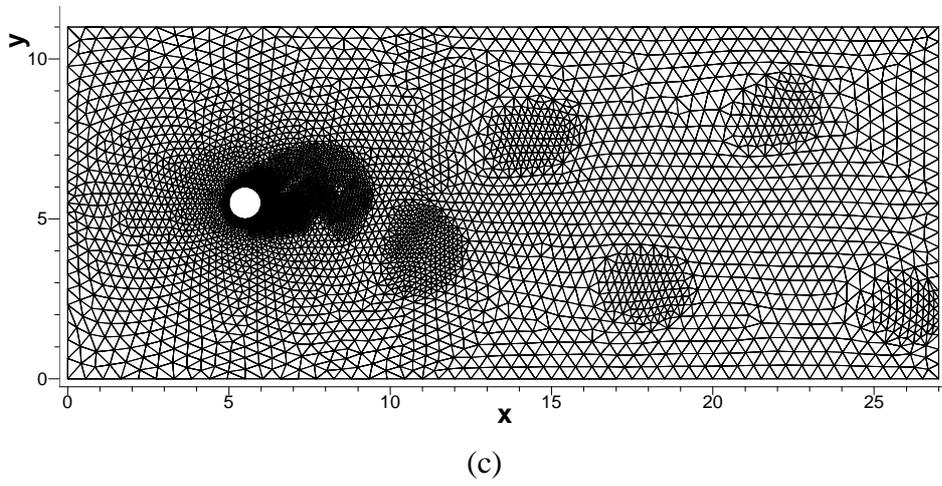
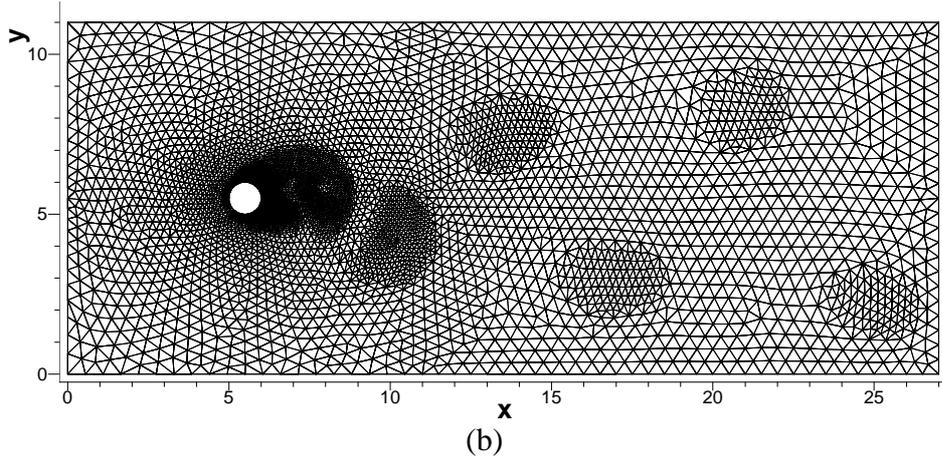


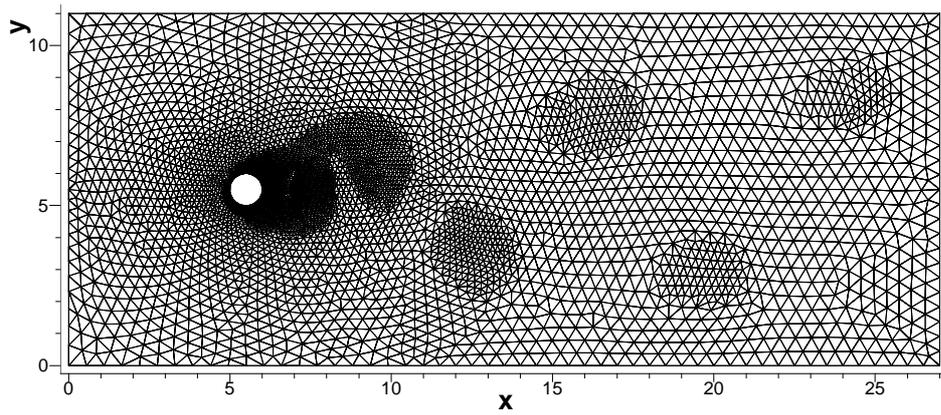
Figura 5.5.8: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro aquecido para $Re = 100$ e $Ri = 1,0$: (a) Linhas de corrente e (b) Linhas isotérmicas.

No segundo caso, são realizadas as simulações numéricas para $Ri = -1,0$, $-0,5$ e $0,0$. Nestas simulações, por se tratar de escoamentos transientes, devido ao fenômeno de desprendimento de vórtices, é utilizado um esquema de adaptação, o qual consiste de sucessivas atualizações da malha. As atualizações da malha são realizadas através de refinamentos e desrefinamento e acompanham o comportamento transiente da solução numérica. Nas três simulações do segundo caso ($Ri \leq 0,0$), a malha foi atualizada com um nível de refinamento, a cada 500 passos de tempo ($\Delta t = 0,0005$), usando os gradientes de temperatura como indicador de erro, com $\mathbf{a}_1 = 0,7$.

Nas Figuras 5.5.9 e 5.5.10, é apresentada uma seqüência de resultados da simulação numérica, obtidos quando utilizado $Ri = -1,0$, onde são mostradas as malhas refinadas e as respectivas isotermas, para os mesmos instantes de tempo. Similares configurações de refinamentos foram obtidas para as demais soluções com os números de Richardson menor ou igual a zero. A seqüência de diferentes configurações mostradas nas Figuras 5.5.9 e 5.5.10 está espaçada num intervalo de tempo de 1,0 s. O indicador de erro conduziu ao refinamento da malha nas regiões de elevados gradientes de temperatura, localizados junto ao cilindro e nos turbilhões, regiões estas de grande importância com relação à dinâmica de escoamentos com desprendimento de vórtices.

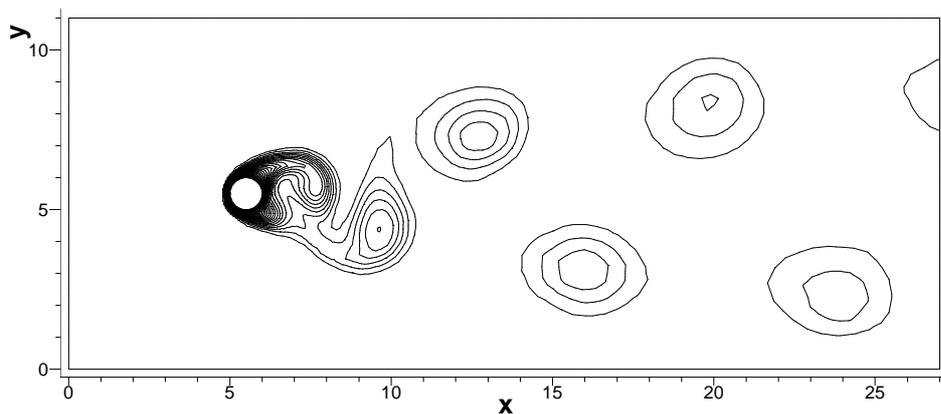




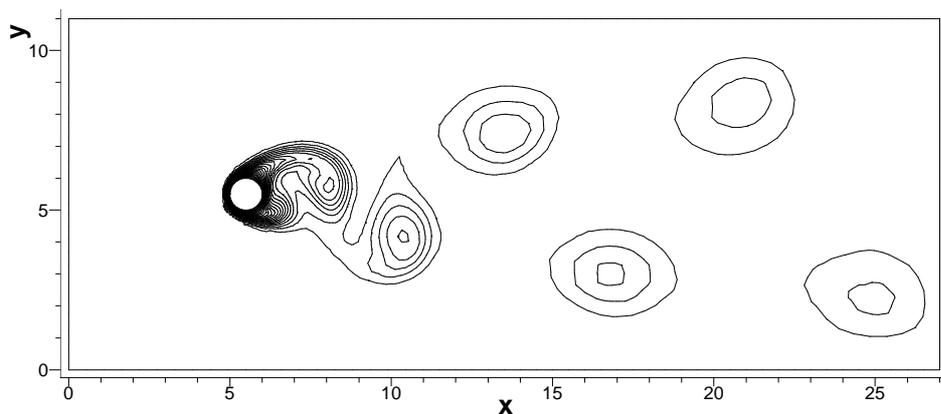


(e)

Figura 5.5.9: Malhas refinadas usando o indicador de erro dos gradientes de temperatura. Seqüência (a), (b), (c), (d) e (e) são separadas por um intervalo de tempo de 1,0 segundo.



(a)



(b)

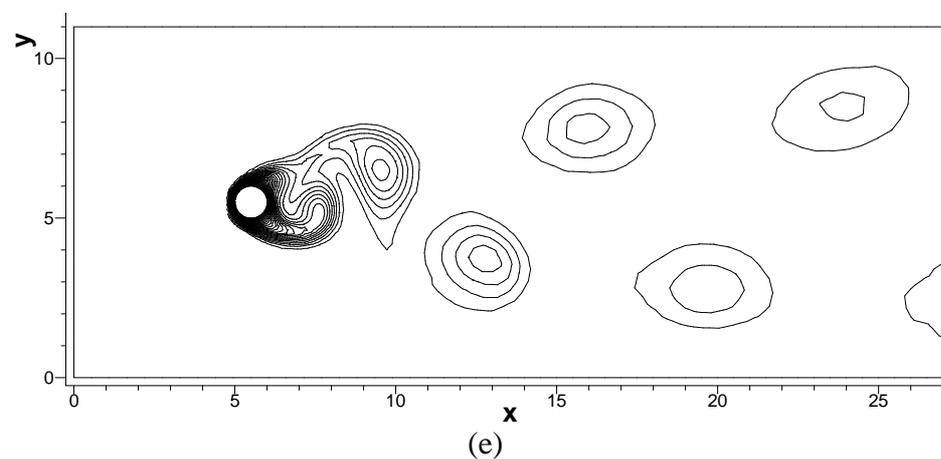
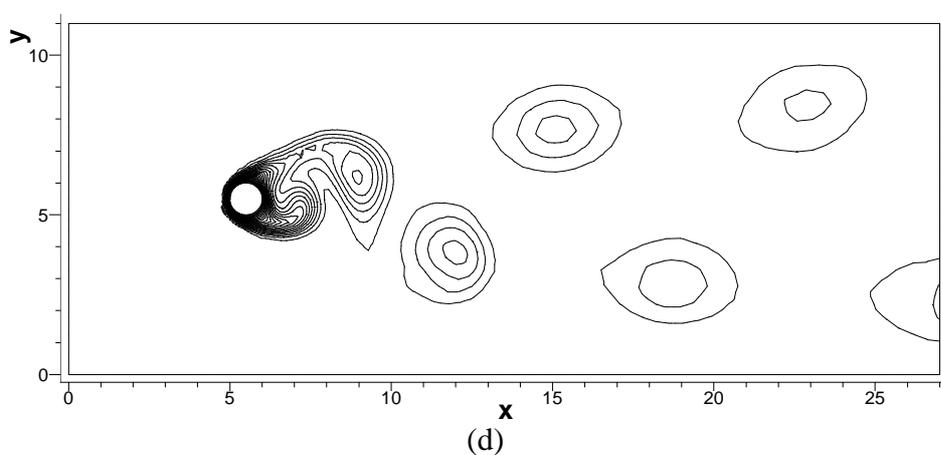
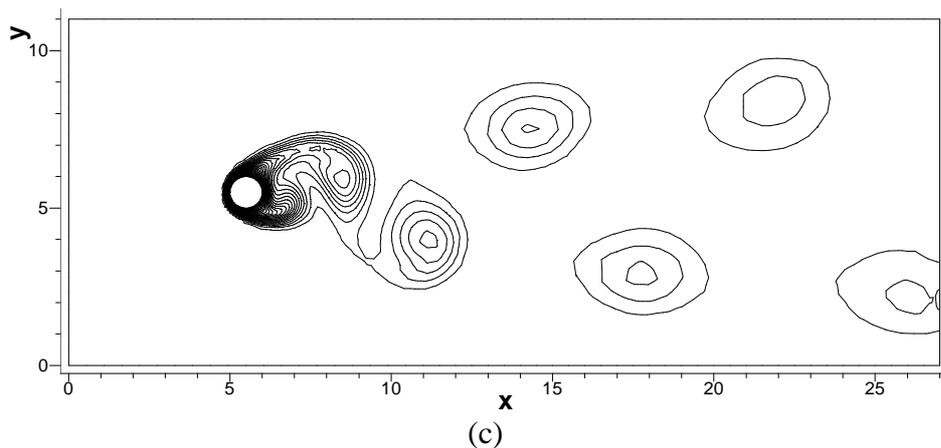


Figura 5.5.10: Isotermas calculadas com as malha refinadas mostradas na Figura 5.5.9.

As linhas de corrente e isothermas, ambas para o mesmo instante de tempo, correspondentes a $Ri = -1,0$, $-0,5$ e $0,0$, são apresentadas, respectivamente, nas Figuras 5.5.11, 5.5.12 e 5.5.13. Como pode ser observado, nas linhas de corrente e confirmado nas linhas isotérmicas, ocorrem à avenida de vórtices de von Kármán, onde os vórtices se desprendem

alternadamente e periodicamente. Nas linhas isotérmicas, verifica-se a presença de turbilhões de fluido, com temperatura mais elevada no centro, deslocando-se no mesmo sentido do escoamento principal.

Com o número de Richardson aumentando de 0,0 para 0,25, ver Figura 5.5.6, a esteira de vórtice de von Kármán à jusante do cilindro, levemente aquecido, desaparece e a solução numérica em regime permanente é alcançada, obtendo dois vórtices gêmeos.

Por outro lado, a esteira de vórtices de von Kármán é amplificada com o decréscimo do número de Richardson ($Ri = 0,0, -0,5$ e $-1,0$), conforme mostrado nas Figuras 5.5.11, 5.5.12 e 5.5.13. Também, observe-se que, para valores menores de Ri , a largura da esteira de vórtice se amplifica; em consequência disto, os turbilhões de fluido, com temperatura mais elevada no seu centro, deslocam-se mais espaçados. Para o cilindro resfriado, à medida que diminui Ri , os pontos de separação do escoamento deslocam-se à montante e não existe simetria, pois as coordenadas dos pontos de separação oscilam em função dos desprendimentos dos vórtices.

Os resultados da frequência do desprendimento de vórtices, através do número de Strouhal versus o número de Richardson, para o $Ri = -1,0, -0,5$ e $0,0$ são, respectivamente, $St = 0,129, 0,147$ e $0,168$. Estes resultados são semelhantes aos apresentados graficamente por Hatanaka e Kawahara (1995). Para o intervalo de $-1,0 \leq Ri \leq 0,0$, o escoamento é periódico e a intensidade de desprendimento de vórtices aumenta com o aumento de Ri .

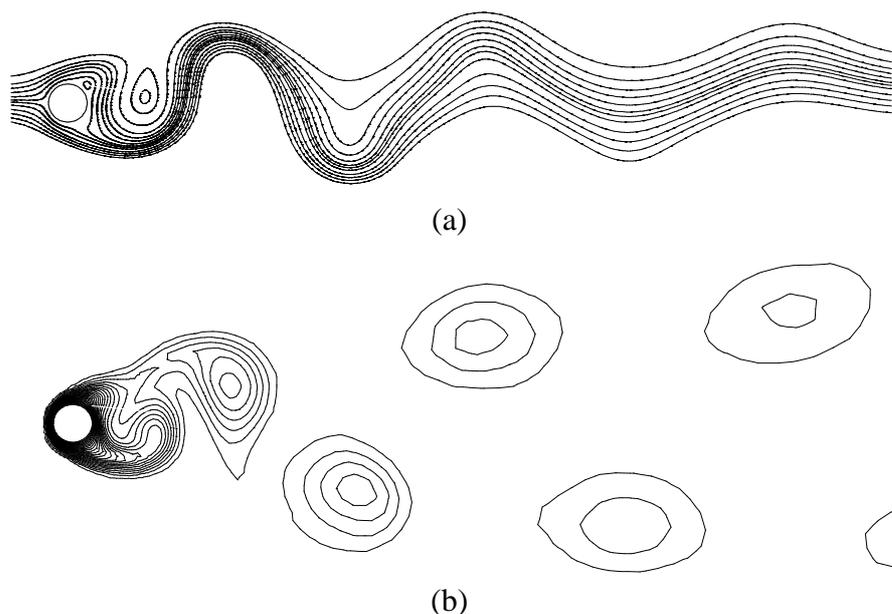


Figura 5.5.11: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro resfriado para $Re = 100$ e $Ri = -1,0$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.

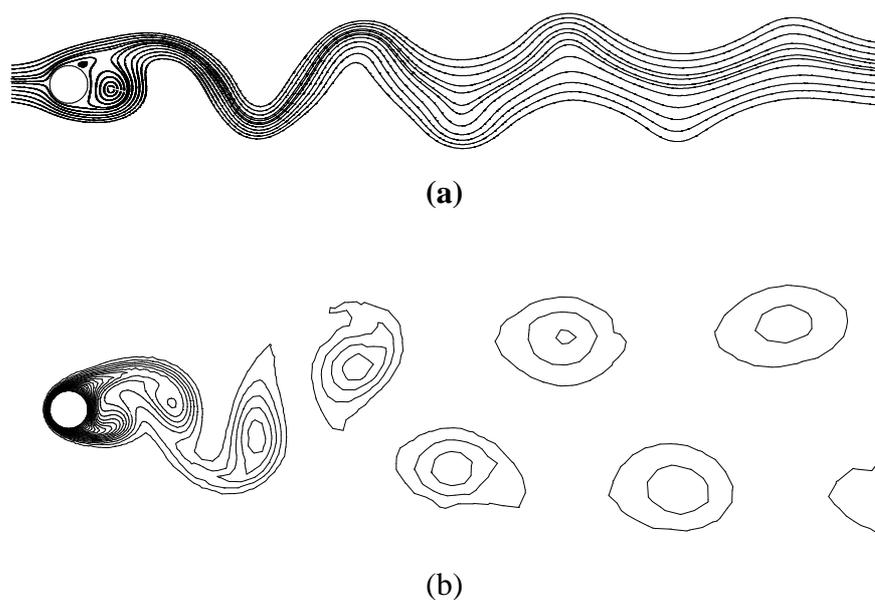


Figura 5.5.12: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro resfriado para $Re = 100$ e $Ri = -0,5$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.

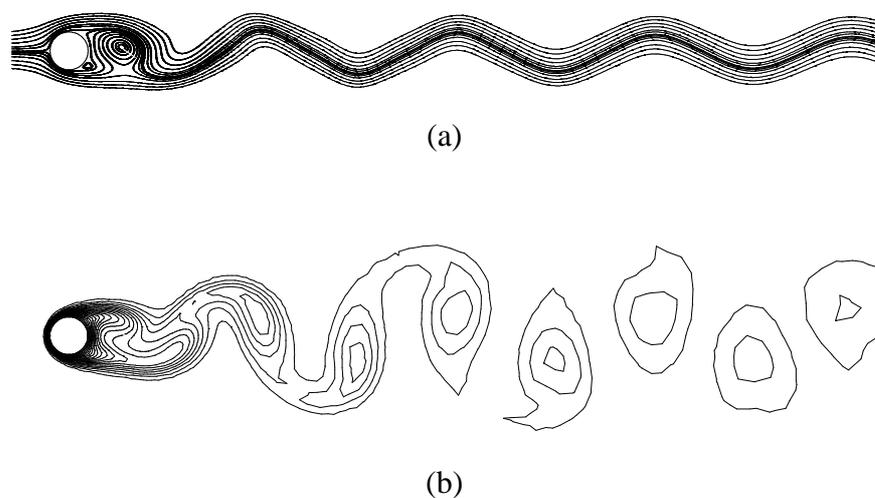


Figura 5.5.13: Resultados numéricos do escoamento em torno de um cilindro para $Re = 100$ e $Ri = 0,0$: (a) linhas de corrente e (b) linhas isotérmicas.

Conforme resultados apresentados, $0,0 < Ri < 0,25$ é um intervalo de transição de escoamento transiente para permanente, ou seja, neste intervalo ocorre de forma gradativa o desaparecimento da esteira de vórtices de von Kármán. Segundo Hatanaka e Kawahara (1995), a esteira de vórtices se dissolve com $Ri = 0,125$ e o escoamento torna-se permanente com $Ri = 0,15$. No entanto, neste trabalho, estes resultados não foram checados.

Os resultados do comprimento de recolamento, junto aos vórtices gêmeos, adimensionalizado pelo raio do cilindro com $Ri = 0,25, 0,5$ e $1,0$ são, respectivamente, $x_r = 3,51, 1,67$ e $0,80$. A diminuição do comprimento de recolamento é uma consequência do deslocamento do ponto de separação, no sentido do escoamento principal, quando Ri aumenta.

Nesta aplicação, também foram realizados alguns testes na forma de calcular o número de Strouhal, com o número de Reynolds igual a 1000 e considerado um escoamento isotérmico. Os testes foram realizados com o propósito de calcular o número de Strouhal e verificar a dependência à malha e o tipo de metodologia utilizada para a simulação, no caso, a simulação das equações de Navier-Stokes sem modelo e a simulação de grandes escalas com os modelos de Smagorinsky e dinâmico. Foram utilizadas três malhas: a primeira foi uma malha grosseira; a segunda com um nível de refinamento; e a terceira com dois níveis de refinamento. As malhas foram refinadas localmente, em torno do cilindro e na região de esteira de vórtices.

Os resultados das simulações numéricas, usando as três metodologias e para cada uma das malhas, estão apresentados na Tabela 5.5.1, juntamente com as soluções obtidas por Schlichting (1968), Mittal et al. (1997) e Mittal e Kumar (2001). Com base nos resultados, verifica-se que o número de Strouhal é dependente da malha, ou seja, quanto mais refinada for a malha, melhor é o resultado da simulação numérica. No caso da malha grosseira, todos os resultados são ruins. À medida que os refinamentos foram sendo realizados, soluções numéricas de melhor qualidade foram obtidas.

Tabela 5.5.1: Número de Strouhal, para $Re = 1000$.

Modelos utilizados e resultados de outros autores	Malha grosseira	Malha refinada (1)	Malha refinada (2)
Sem modelo (Presente trabalho)	0,404	0,284	0,249
Smagorinsky (Presente trabalho)	0,336	0,274	0,248
Dinâmico (Presente trabalho)	0,395	0,283	0,249
Schlichting (1968) (Experimental)	0,210		
Mittal et al. (1997)	0,245		
Mittal e Kumar (2001)	0,250		

Obs. A malha refinada (1) possui um nível de refinamento e a malha refinada (2) possui dois níveis, respectivamente, contendo 46252 e 125661 elementos. A malha grosseira possui 17677 elementos.

O número de Strouhal, para as três metodologias, convergiu, praticamente, para o mesmo valor, significando que o número de Strouhal é dependente da malha e pouco sensível às metodologias utilizadas para o cálculo. Os resultados são semelhantes aos obtidos por Mittal et al. (1997), e Mittal e Kumar (2001), e um pouco afastados do obtido experimentalmente por Schlichting (1968).

Com o objetivo de visualizar as estruturas do escoamento tridimensional e os efeitos no transporte de variáveis escalares (poluente), foi realizada uma simulação do escoamento em torno de um cilindro, utilizando as equações de Navier-Stokes sem modelo. Os números de Reynolds, Prandtl, Peclet e Richardson são $Re = 300$, $Pr = 0,706$, $Pe = 211,8$ e $Ri = 0,0$, respectivamente.

A escolha do valor do $Re = 300$ foi motivada pela importância dos fenômenos que ocorrem neste escoamento e pela mudança de comportamento do desprendimento de vórtices na esteira de von Kármán. Conforme os regimes de escoamentos ao redor de um cilindro, apresentados por Sumer e Fredsøe (1997), para o valor de Reynolds entre $200 \leq Re \leq 300$, ocorre um regime de transição à turbulência na esteira de vórtices.

Na simulação, a velocidade e o comprimento característicos são, respectivamente, a velocidade de entrada e o diâmetro de cilindro, ambos unitários. Para a simulação de dispersão de poluente, foi considerado que, no contorno da superfície da esfera $C = 1,0$ e na entrada, a concentração é nula. Os planos xy , são consideradas faces de simetria. O domínio computacional foi dimensionado em função do diâmetro da esfera. Assim, o plano à esquerda (entrada) e o plano inferior e superior localizam-se a $8d$ (oito diâmetros) do centro do cilindro e o plano de saída a $16d$. O comprimento do cilindro e a dimensão na direção da coordenada cartesiana z , ao longo do eixo do cilindro são de $3d$.

A malha utilizada para realizar a simulação está apresentada na Figura 5.5.14 e detalhes em 3D, na Figura 5.5.15, a qual contém 121520 nós e 689100 elementos. Nesta malha, devido às limitações computacionais, só foi realizado um único nível de refinamento, localizado em torno do cilindro e na região da esteira de vórtices.

Nas Figuras 5.5.16a e 5.5.16b, são apresentadas as isosuperfícies de vorticidade, $w = 0,56$ e, nas Figuras 5.5.17a e 5.5.17b, são mostradas as isosuperfícies de vorticidade, $w = 0,80$, e todos os resultados referem-se a um mesmo instante de tempo. Para avaliar os efeitos

do comportamento do escoamento no transporte de variáveis escalares, como a concentração de um poluente, por exemplo, as Figuras 5.5.18a e 5.5.18b apresentam as isosuperfícies de concentração, $C = 0,12$.

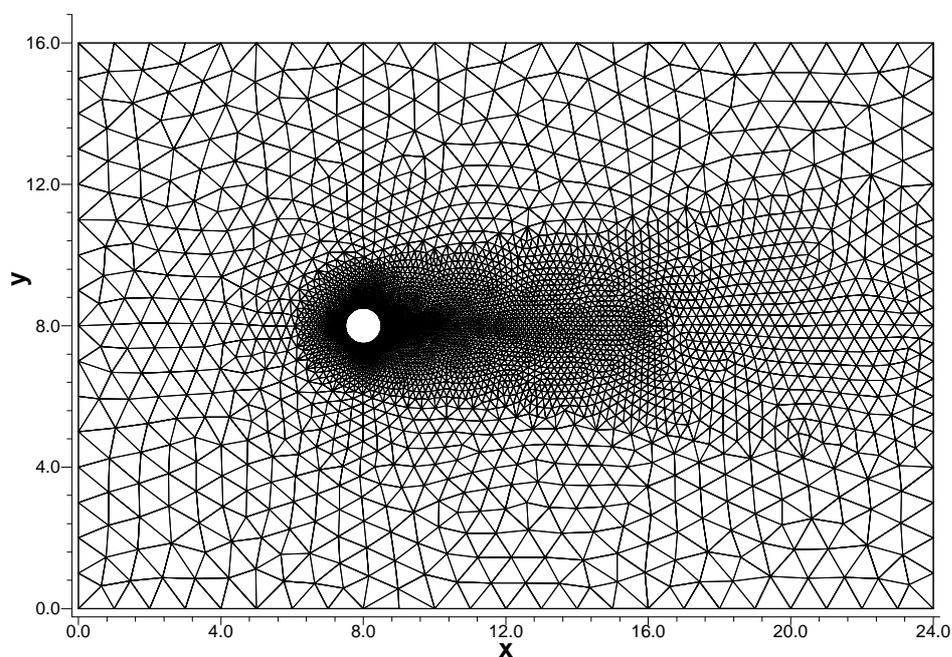


Figura 5.5.14: Malha no plano xy (vista lateral do cilindro).

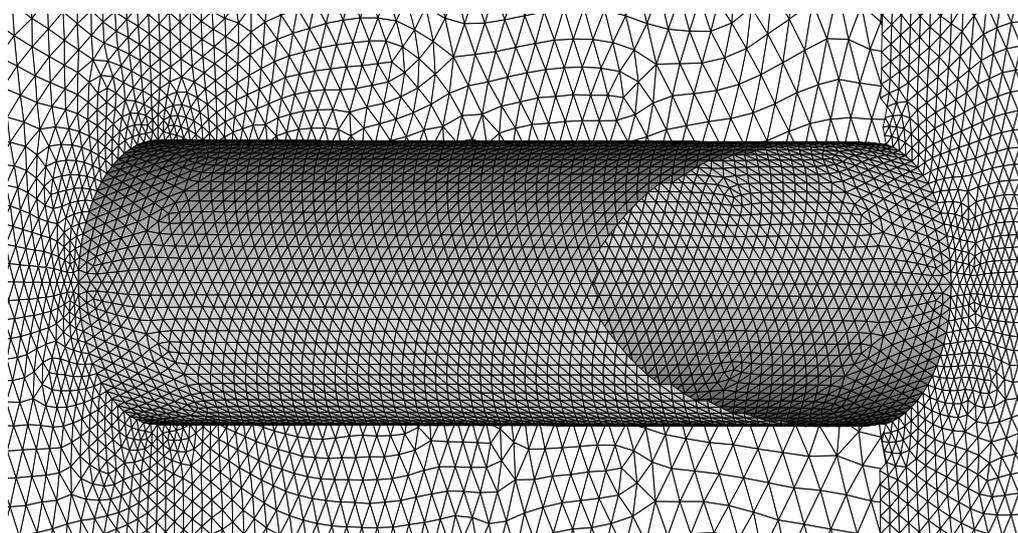


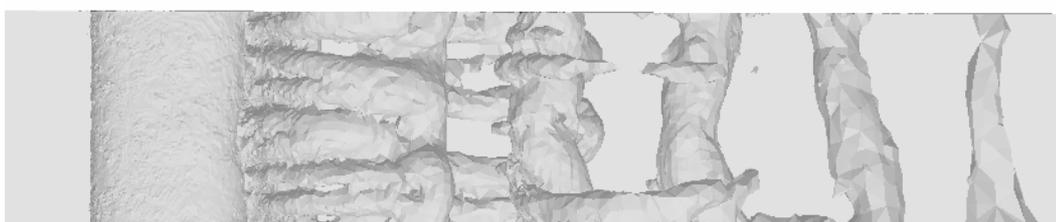
Figura 5.5.15: Detalhes da malha junto à superfície do cilindro, em 3D.

As Figuras 5.5.16 e 5.5.17 permitem a visualização das estruturas da esteira de vórtices de von Kármán. Além do desprendimento dos vórtices primários, que se deslocam na mesma direção do escoamento, observa-se a formação de pares de vórtices longitudinais de menor

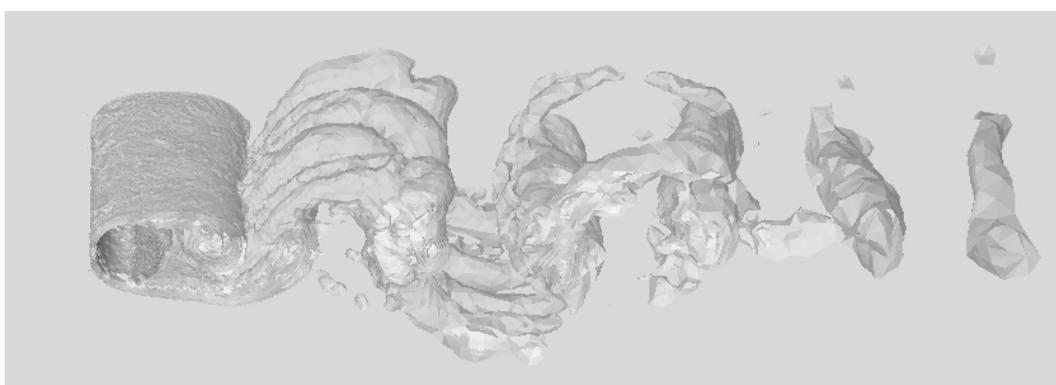
escala, entre as estruturas de vórtices primários. Segundo Williamson (1996), o regime de transição da esteira é caracterizado por dois distintos modos de instabilidade tridimensionais: instabilidades associadas ao centro dos vórtices primários, durante o processo de desprendimento; e instabilidades originadas na camada cisalhante da esteira de vórtices. Detalhes relativos às estruturas de vórtices e seus mecanismos podem ser encontrados em Williamson (1989 e 1996) e Rebeiro (2002).

Williamson (1996), com base em resultados experimentais, verificou que o comprimento de onda dos vórtices longitudinais é de $1d$ (um diâmetro). Analisando as Figuras 5.5.16 e 5.5.17, observam-se aproximadamente três estruturas longitudinais de vórtices, numa largura de $3d$, o que leva a um resultado semelhante ao experimental.

Observando as isosuperfícies de concentração apresentadas na Figura 5.5.18, verifica-se que o comportamento na dispersão de poluente apresenta uma superfície semelhante às superfícies dos vórtices apresentadas nas figuras anteriores. Com base nestes resultados, pode-se concluir que as estruturas de vórtices longitudinais, embora de pequenas escalas, influenciam na dispersão de poluentes.

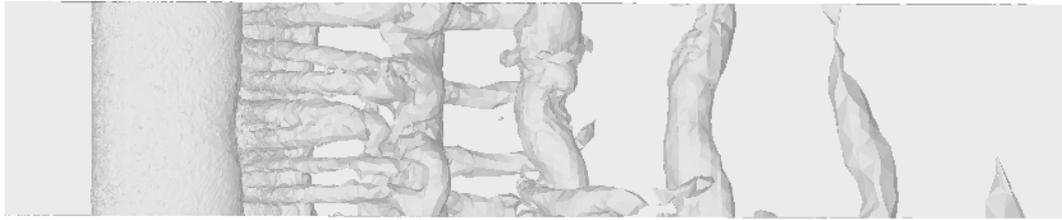


(a)

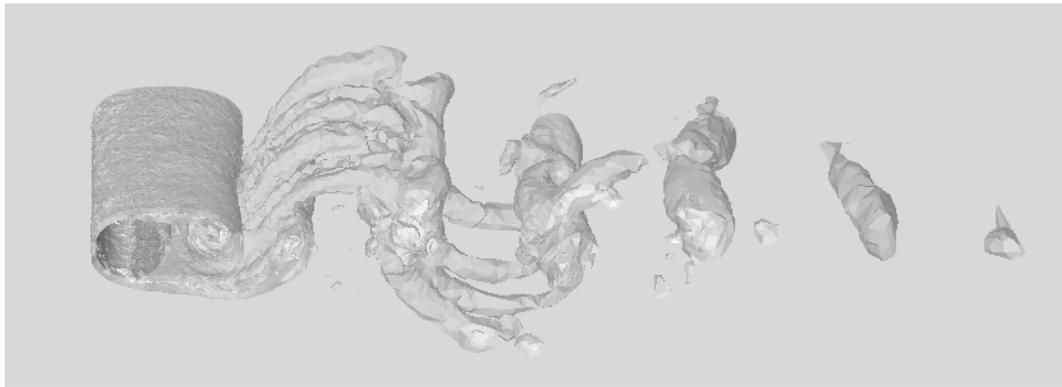


(b)

Figura 5.5.16: Isosuperfícies de vorticidade, $w = 0,56$, (a) vista do topo e (b) detalhes em perspectiva.

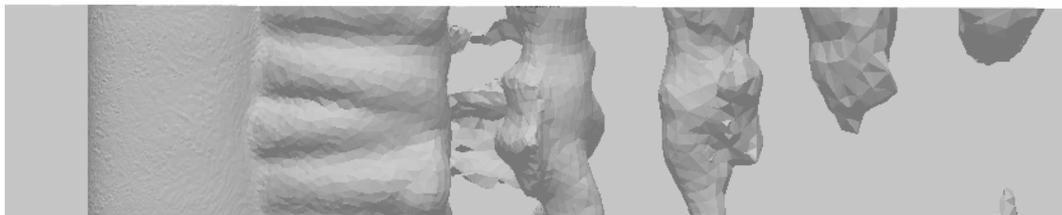


(a)

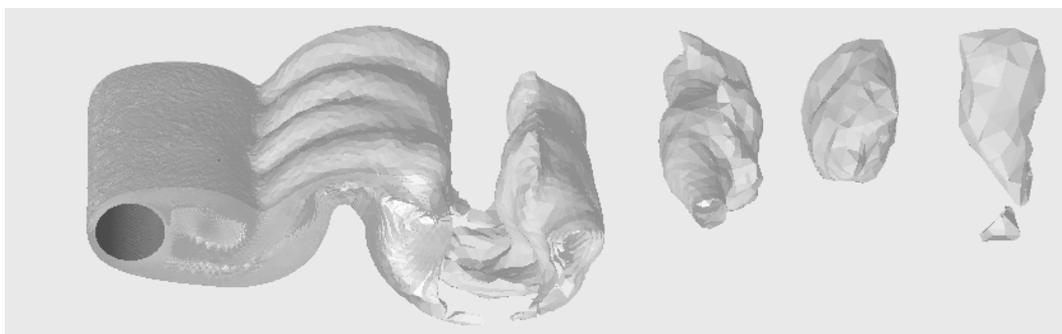


(b)

Figura 5.5.17: Isosuperfícies de vorticidade, $w = 0,80$, (a) vista do topo e (b) detalhes em perspectiva.



(a)



(b)

Figura 5.5.18: Isosuperfícies de concentração, $C = 0,12$, (a) vista do topo e (b) detalhes em perspectiva.

5.6 TRANSPORTE DE POLUENTE NUM CAMPO DE VELOCIDADES UNIFORMES

Nesta aplicação é analisado o transporte de poluentes num salto na variável escalar f (concentração), em um campo de velocidades uniformes. Para obter soluções numéricas com melhor precisão é utilizada a estratégia de adaptação automática de malhas, aplicada na obtenção de soluções numéricas permanentes e transientes.

O domínio computacional do problema e as condições de contorno estão mostradas na Figura 5.6.1. Como pode ser observado, os vetores do campo de velocidades uniformes são paralelos ao segmento de reta (linha sólida), o qual passa pelo centro do domínio computacional, forma um ângulo θ com o eixo x , separando as duas diferentes condições de contorno da variável escalar (poluente). A condição de contorno para o poluente, acima da linha sólida é considerada como sendo $f = 1,0$ e, abaixo da mesma linha, é imposta a condição de $f = 0,0$. Se a linha sólida interseccionar um nó de contorno, um valor de $f = 0,5$ é designado para este ponto. A condição inicial para os nós, que se encontram no interior do domínio computacional do problema, é $f = 0,0$.

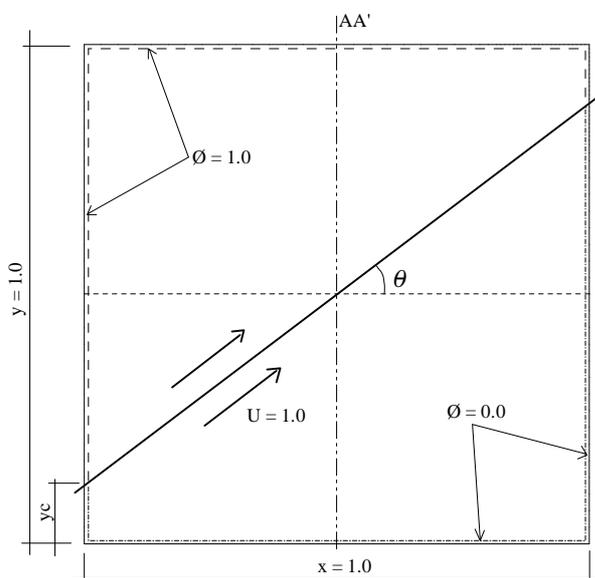


Figura 5.6.1: Domínio computacional do problema e condições de contorno.

Inicialmente, o domínio computacional foi discretizado com uma malha contendo 2180 nós e 6228 elementos, uniformemente distribuídos e com uma única camada de elementos na

direção z , pois se trata de um escoamento bidimensional. A malha inicial, no plano xy , está mostrada na Figura 5.6.2.

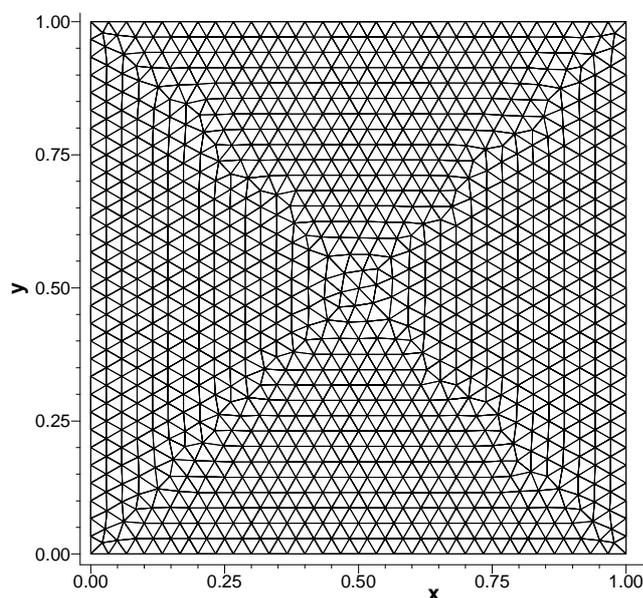


Figura 5.6.2: Malha inicial, plano xy .

Foram obtidas soluções numéricas, com o campo de velocidades uniformes ($U = 1,0$) atuando nas seguintes direções: $\mathbf{q} = 0^\circ$, $\mathbf{q} = 26,57^\circ$ e $\mathbf{q} = 45^\circ$. O coeficiente de difusividade do poluente foi considerado como sendo $D = 0,002$, que corresponde a um valor do número de Peclet igual a 50. Para esta aplicação, Raithby (1976) utiliza a seguinte expressão, para o cálculo do número de Peclet

$$Pe = \frac{\mathbf{r}U\Delta x}{D} \quad (5.6.1)$$

onde \mathbf{r} é a massa específica do fluido, unitária; U é o valor do vetor de velocidade resultante, unitário; Δx representa o comprimento característico, considerado 1/10 do comprimento do domínio computacional, ou seja, 0,1 e D corresponde à difusividade do poluente.

Para propiciar soluções de melhor qualidade, foram realizados dois níveis de refinamentos, utilizado o indicador de erro de gradientes da concentração, com o coeficiente $a_1 = 0,0$, ou seja, foram refinados todos os elementos com indicador de erro acima da média

dos gradientes de concentração. As soluções do perfil da concentração, calculadas na secção AA' ($x = 0,5$) para os campos de velocidades atuando em três diferentes direções, nos ângulos $\mathbf{q} = 0^\circ$, $\mathbf{q} = 26,57^\circ$ e $\mathbf{q} = 45^\circ$, estão representadas, respectivamente, nas Figuras 5.6.3, 5.6.4 e 5.6.5. Salienta-se que os valores da solução analítica, apresentada por Raithby (1976), foram integrados juntamente com os resultados do presente trabalho. Comparando as duas soluções, verifica-se que os resultados do presente trabalho são de boa qualidade, pois as aproximações são fortemente evidenciadas.

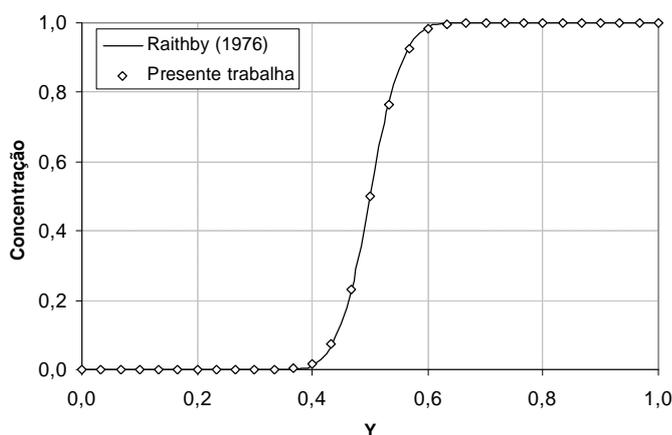


Figura 5.6.3: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $\mathbf{q} = 0^\circ$ e $Pe = 50$.

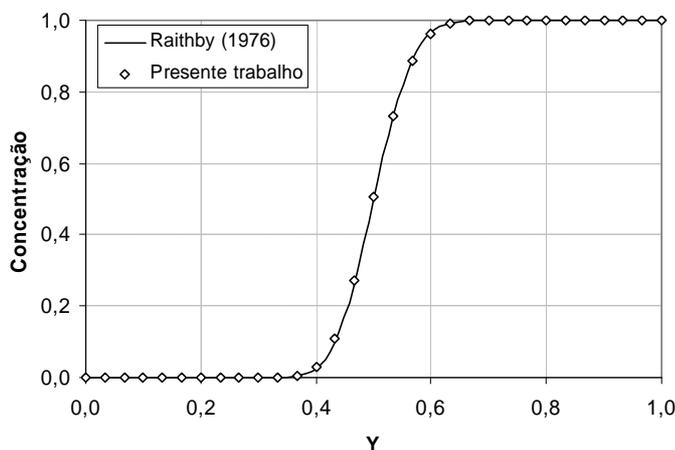


Figura 5.6.4: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $\mathbf{q} = 26,57^\circ$ e $Pe = 50$.

Na Figura 5.6.6, para proporcionar uma visualização global de uma das soluções desta aplicação, são apresentadas as isolinhas de concentração do terceiro caso simulado, ou seja com o valor do ângulo $\mathbf{q} = 45^\circ$. Para o mesmo caso, na Figura 5.6.7, é mostrada a malha refinada, a qual foi utilizada para obter as soluções apresentadas nas Figuras 5.6.5 e 5.6.6.

Para obter as demais soluções, também foram realizados dois níveis de refinamentos, onde os mesmos foram realizados quando as soluções grosseiras se aproximam do regime permanente.

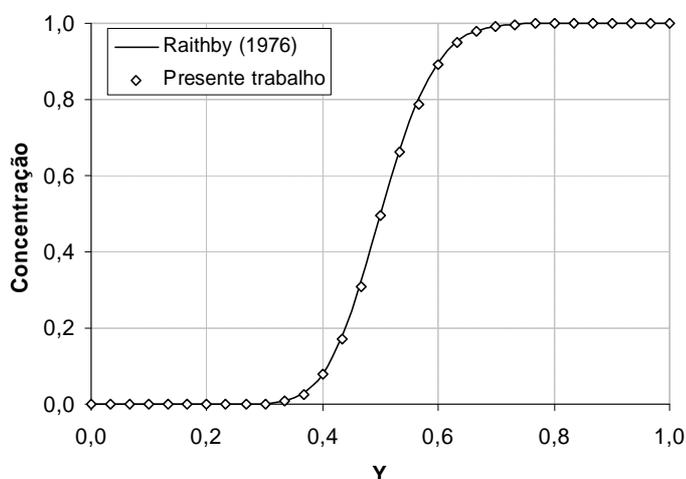


Figura 5.6.5: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$.

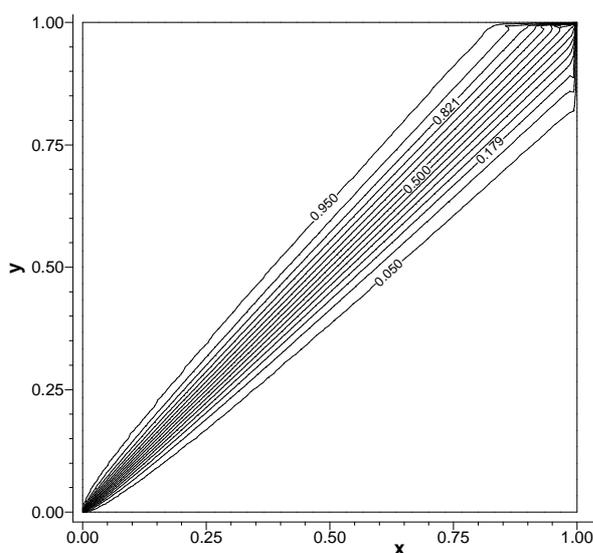


Figura 5.6.6: Isolinhas de concentração do poluente, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 50$.

De forma semelhante, na Figura 5.6.8, é apresentado o perfil de concentração, obtido da simulação numérica, onde foi considerado o coeficiente de difusividade $D = 0,005$, que equivale ao número de Peclet $Pe = 20$. Como pode ser verificado, o resultado simulado tem uma boa aproximação com o resultado analítico apresentado por Raithby (1976). Na Figura 5.6.9, são apresentadas as isolinhas do campo de concentração para todo o domínio computacional e, na Figura 5.6.10, a malha utilizada.

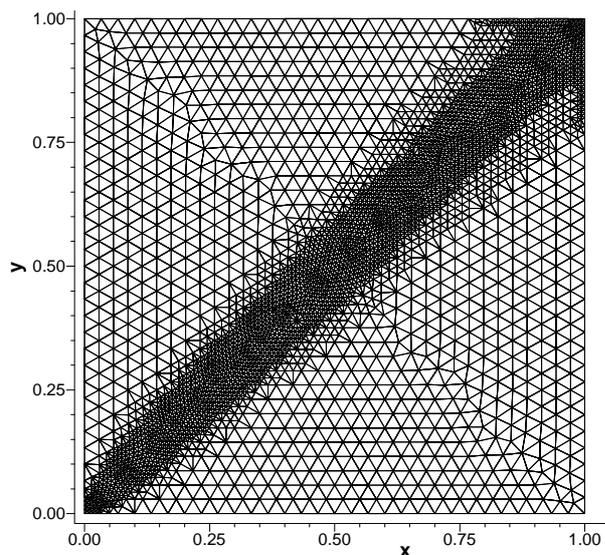


Figura 5.6.7: Malha final utilizada para obter a solução em regime permanente, caso de $\mathbf{q} = 45^\circ$ e $Pe = 50$.

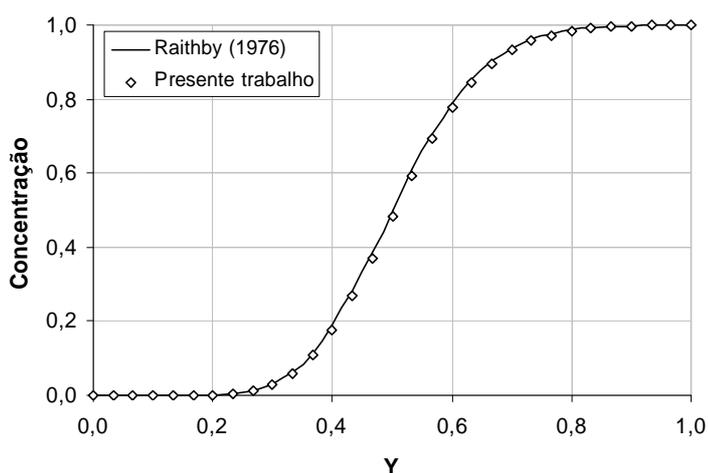


Figura 5.6.8: Perfil da concentração, em $x = 0,5$, para o caso de $\mathbf{q} = 45^\circ$ e $Pe = 20$.

Com o propósito de visualizar o comportamento da solução do problema, desde as condições iniciais até o regime permanente, bem como analisar a performance da estratégia de adaptação automática de malhas, tomou-se o caso da aplicação com o campo de velocidades uniformes atuando sob um ângulo de $\mathbf{q} = 45^\circ$ e com $Pe = 20$. A solução é iniciada com o domínio computacional discretizado, conforme a malha apresentada na Figura 5.6.2. Os primeiros dois níveis de refinamentos foram realizados quando, decorrido o tempo de 0,025s (que equivale ao tempo adimensionalizado $Ut/L = 0,025$) e daí por diante, a cada intervalo de tempo de 0,025s, a malha foi atualizada. O indicador de erro de gradiente de concentração,

com o coeficiente a_1 igual a zero, foi utilizado para realizar os refinamentos. Assim procedendo, foram obtidas as soluções transientes da aplicação, até atingir o regime permanente.

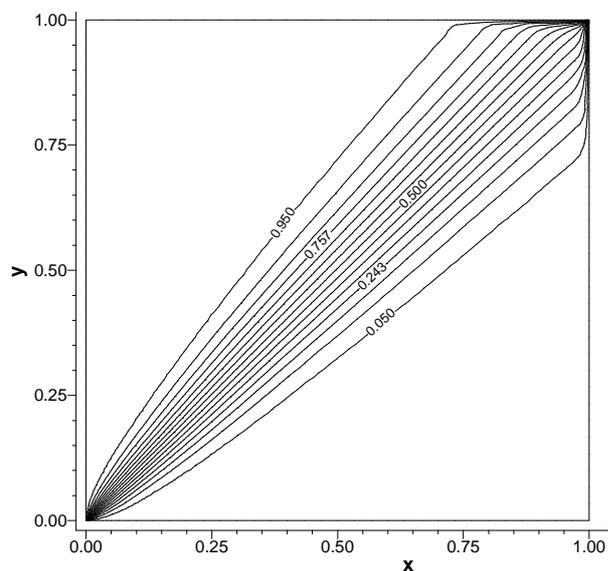


Figura 5.6.9: Isolinhas de concentração do poluente, para o caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 20$.

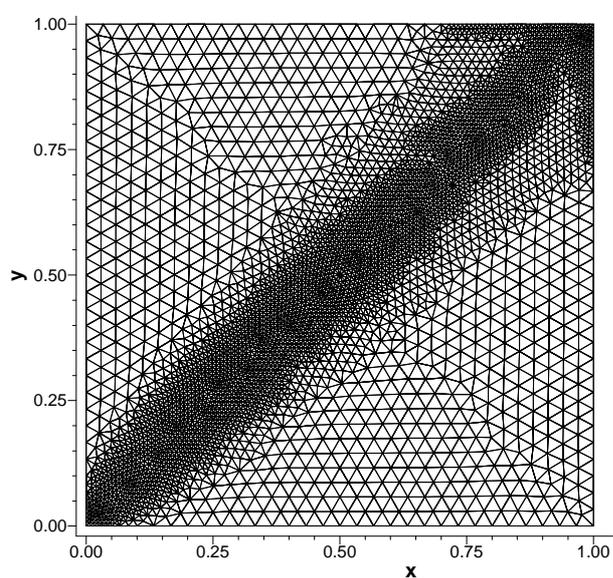
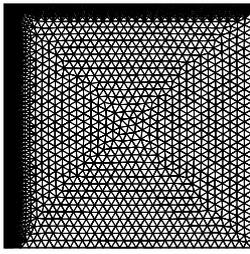
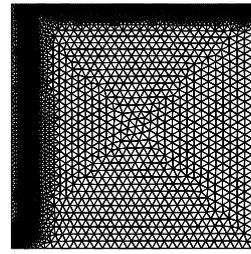
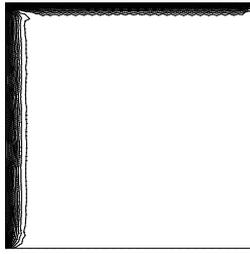
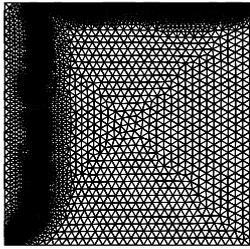
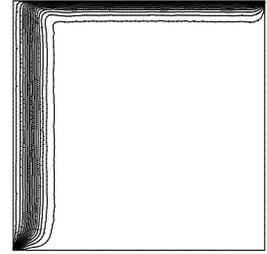
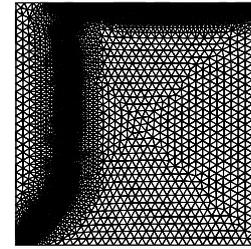
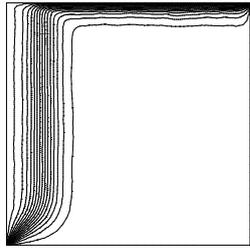
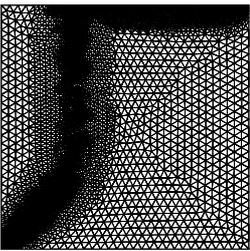
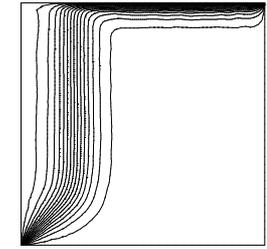
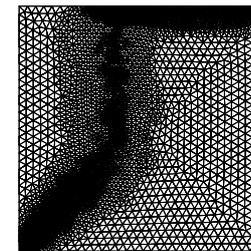
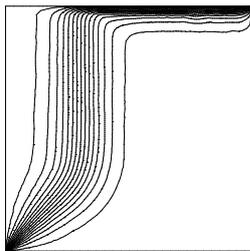
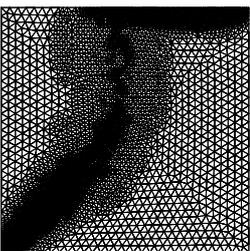
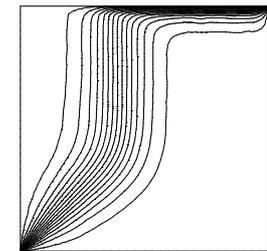
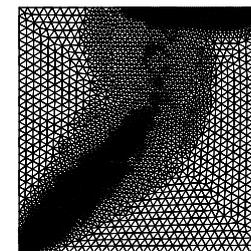
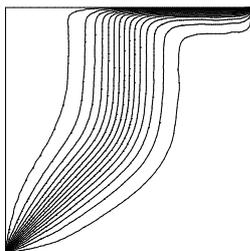
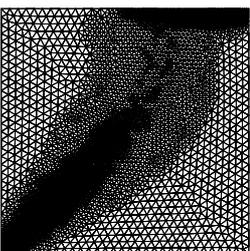
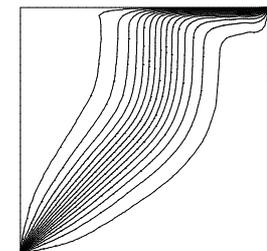
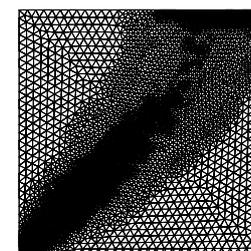
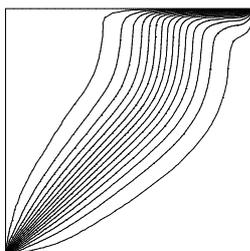
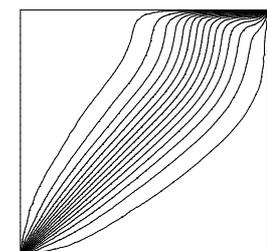


Figura 5.6.10: Malha refinada utilizada para obter a solução em regime permanente, tempo $t = 4,16s$, caso de $q = 45^\circ$ e $Pe = 20$.

Uma seqüência de soluções transientes, são representadas através de isolinhas de concentração, ao longo do tempo, com as respectivas malhas, são mostradas na Figura 5.6.11.

 $t = 0,035s$  $t = 0,110s$  $t = 0,210s$  $t = 0,335s$  $t = 0,460s$  $t = 0,585s$  $t = 0,710s$  $t = 0,835s$  $t = 0,960s$  $t = 1,085s$ 

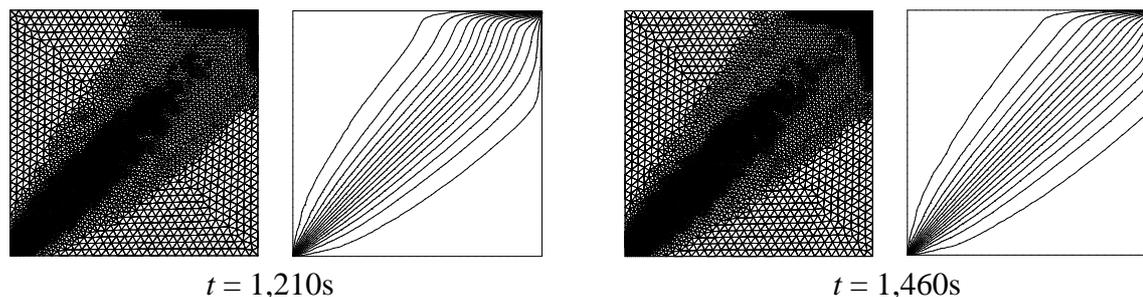


Figura 5.6.11: Seqüência de soluções transientes, ao longo do tempo, caso com $\mathbf{q} = 45^\circ$ e $Pe = 20$: (a) malha refinada e (b) isolinhas de concentração do poluente.

Analisando os resultados apresentados nas Figuras 5.6.9 – 5.6.11, verifica-se que, em todos os momentos, as atualizações da malha, realizadas através de uma estratégia de adaptação automática de malhas, acompanharam as soluções transientes da aplicação, refinando a malha onde realmente se fazia necessário, ou seja, onde os gradientes de concentração são mais elevados.

Salienta-se que os dois níveis de refinamentos foram executados no mesmo instante de tempo e tomando como base para os refinamentos os dados dos nós da malha original. Este procedimento dá rapidez às atualizações da malha, sem perder de vista a qualidade da solução numérica, além de não necessitar executar o processo de desrefinamento – que tem um custo computacional elevado. Assim, as sucessivas malhas refinadas são utilizadas como uma ferramenta para proporcionar a obtenção de soluções numéricas de melhor qualidade. No entanto, observe-se que as soluções apresentadas são resultantes da malha refinada e não da malha base – malha da discretização inicial do domínio computacional, pois os dados desta somente são utilizados no momento da transição das atualizações da malha. Por exemplo, as soluções apresentadas na Figura 5.6.11, correspondem às malhas refinadas, quando decorrido 2/5 do intervalo de tempo de cada uma das atualizações da malha.

No caso do cálculo da solução referente á concentração, verificou-se que, em todas as situações simuladas, os resultados obtidos são fortemente semelhantes, com os valores calculados através da equação analítica apresentada por Raithby (1976).

5.7 DISPERSÃO DE POLUENTE NUM AMBIENTE URBANO

O crescimento das grandes cidades e dos parques industriais são as principais razões para o aumento da poluição ambiental, abrangendo parte do ecossistema formado pelo ar, pela terra e pela água. Em vista disto, uma gama de trabalhos tem sido publicada com ênfase no estudo de fontes poluidoras que, devido a sua natureza, prejudicam o meio ambiente e a saúde humana. Nas regiões urbanas, as principais fontes poluidoras têm origem nas indústrias e na circulação de veículos motorizados, entre outras.

A poluição emitida pelos motores dos veículos, segundo Chan et al. (2002), tem impacto direto na saúde humana, especialmente sobre os condutores e passageiros, ciclistas, pedestres, pessoas trabalhando nas proximidades e em seus ambientes residenciais, principalmente em regiões próximas a ruas com alto nível de tráfego e cercadas por elevadas construções. Conforme Guedes e Oliveri (1999), Xia e Leung (2001) e Chan et al. (2002), vários fatores influenciam na circulação de ar e na dispersão de poluentes nestes ambientes urbanos, tais como: a geometria das construções, a dimensão da rua, o efeito térmico, o movimento do tráfego, a arborização e a rugosidade da superfície.

Nos últimos anos, devido aos problemas associados à poluição urbana do ar das grandes cidades, extensivos trabalhos têm sido realizados para estudar o comportamento do escoamento do vento, associado à dispersão de poluentes ao redor de uma construção (obstáculo) ou de um ambiente urbano, como apresentado por Kim et al. (2001). Estes autores apresentam o estudo do escoamento do vento e a dispersão de poluente sobre um ambiente constituído de uma montanha e duas construções. Brzoska et al. (1997), Selvam (1997), e Li e Stathopoulos (1998) simulam a dispersão de um poluente ao redor de uma construção isolada. O escoamento do vento e a dispersão de poluente ao redor de uma construção com geometria em ele é estudada por Cowan et al. (1997) e Castro et al. (1999). O problema da dispersão de poluentes, em ruas de grandes cidades, com um elevado nível de tráfego, em várias configurações geométricas, foram investigadas por Sini et al. (1996), Meroney et al. (1996), Pavageau e Schatzmann (1999), Gerdes e Olivari (1999), Xia e Leung (2001), Chan et al. (2002), Baker et al. (2003) e Assimakopoulos et al. (2003), entre outros.

Dentre as alternativas, no presente trabalho é estudada a dispersão de poluente, originado do escapamento dos motores dos veículos, numa rua localizada entre duas construções (*street*

canyon), e este ambiente está inserido no interior de uma rugosidade urbana. Sobre esta aplicação, além dela apresentar uma das geometrias reais de ambientes urbanos, existem, na literatura especializada da área, vários trabalhos publicados, como os de simulações experimentais apresentados por Meroney et al. (1996), e Pavageau e Schatzmann (1999). Assim, os resultados aqui obtidos podem ser comparados e analisados, com o propósito de validar o código computacional implementado, aplicado à engenharia do vento.

O maior interesse desta simulação, além de validar o código computacional (modelo de turbulência, dispersão de poluente e adaptação de malhas), está voltado para o entendimento dos mecanismos da dispersão de poluentes devidos ao escape de motores de veículos em uma região urbana, podendo os resultados servir de base para a orientação na localização de equipamentos para monitorar a intensidade de poluentes em ambientes urbanos.

Meroney et al. (1996) realizou uma série de medidas experimentais de concentração de poluente no túnel de vento de camada limite atmosférica, do Instituto de Meteorologia da Universidade de Hamburgo. O modelo físico, que configurando um domínio urbano, foi construído com perfis de madeira de comprimento $L = 0,90$ m (representando as construções), colocados transversalmente ao túnel de vento. Os perfis de madeira, com seção transversal de largura $B = 0,06$ m e de altura $H = 0,06$ m, foram distribuídos ao longo do comprimento do túnel de vento, com um espaçamento (representando as ruas) de $W = 0,06$ m. O modelo foi construído com 28 perfis de madeira de iguais dimensões, sendo que 20 foram colocados à montante da rua onde foram realizadas as medições experimentais da concentração de poluente e 8 perfis, à jusante.

Para modelar o escape dos motores dos veículos (poluente), foram construídos alguns mecanismos/aparatos para simular uma fonte poluidora, localizados ao longo do eixo central da rua, entre as duas construções. Uma mistura homogênea de ar e etano foi usada para simular o poluente expelido pelos motores dos veículos. Durante o experimento, a mistura foi ejetada horizontalmente, em ambos os lados da linha da fonte. Tratava-se de uma mistura homogênea, composta de 100 l de ar e 4 l de etano. Detalhes adicionais dos mecanismos e aparatos usados no túnel de vento, para simular a camada limite atmosférica, para obter o perfil de velocidade média vertical e para estudar o comportamento da dispersão de poluente, podem ser encontrados na publicação de Meroney et al. (1996). O perfil de velocidade

vertical, para a camada limite atmosférica totalmente desenvolvida, pode ser representada pela lei da potência, expressa por:

$$U(y) = U_{ref} \left(\frac{y - d_0}{\mathbf{d} - d_0} \right)^n \quad (5.7.1)$$

onde $U(y)$ é a velocidade média na altura y , U_{ref} é a velocidade de referência para a altura \mathbf{d} da camada limite acima da rua, d_0 representa a altura do deslocamento do plano-zero e o expoente n é função do tipo de rugosidade local. Na simulação experimental, a velocidade de referência U_{ref} foi registrada para uma altura $\mathbf{d} = 0,65$ m acima do nível da rua. A geometria do experimento corresponde a um modelo físico de escala 1:500, na representação de um ambiente urbano real.

As concentrações medidas experimentalmente são apresentadas em termos adimensionais, dadas por

$$K = \frac{C U_{ref} H L}{Q_s} \quad (5.7.2)$$

onde C é a fração do volume de etano, U_{ref} é a velocidade de referência para a altura da camada limite, H é a altura da construção, L representa o comprimento da linha da fonte (igual à largura do túnel de vento) e Q_s corresponde à taxa do fluxo volumétrico da mistura homogênea de ar e etano.

O domínio computacional usado para a simulação numérica é semelhante ao utilizado por Chan et al. (2002) e, esquematicamente, está mostrado na Figura 5.7.1. A relação entre a largura (W) da rua e a altura (H) da construção é $W/H = 1$. A lei da potência (Eq. 5.7.1) é usada para o perfil de velocidade média vertical, onde a velocidade de referência é tomada com o mesmo valor da simulação experimental, $U_{ref} = 2,0$ m/s; a uma altura da camada limite, $\mathbf{d} = 0,65$ m; o deslocamento do plano-zero é $d_0 = 0,06$ m (igual à altura da construção H) e $n = 0,20$ é adotado como expoente, conforme indicado por Meroney et al. (1996), que levam em consideração o tipo de rugosidade desta aplicação. Na simulação experimental e nesta aplicação, para representar o poluente, foi ejetado, horizontalmente, em ambos os lados da

linha da fonte localizada no eixo central da rua, uma mistura homogênea de ar e etano, numa proporção de $Q_a = 100$ l/h de ar e $Q_e = 4$ l/h de etano.

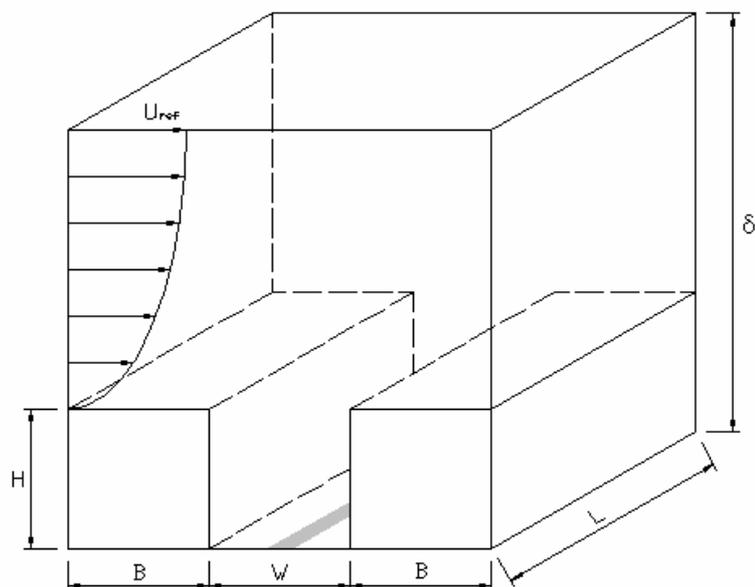


Figura 5.7.1: Domínio computacional de simulação do ambiente urbano.

Para discretizar o domínio computacional foi gerada uma malha não estruturada com elementos mais finos, localizados na parte superior das duas construções e, na cavidade da rua, entre as duas construções. No entanto, durante o cálculo da simulação numérica, com o propósito de obter uma solução com mais precisão, foi realizado um nível de refinamento, abrangendo as regiões de soluções mais críticas, ou seja, nas regiões de gradientes de velocidades e de concentração mais acentuados. Em ambos os gradientes, foram utilizados os valores de $\mathbf{a}_1 = 0,5$ para os dois indicadores de erro.

Na Figura 5.7.2a, é apresentada a malha refinada do domínio computacional completo e, na Figura 5.7.2b, é mostrada em detalhes a região de maior interesse, a cavidade da rua entre as duas construções.

Os resultados apresentados nesta aplicação correspondem ao regime permanente. O campo de concentração de poluente do domínio computacional simulado está apresentado na Figura 5.7.3. Os valores numéricos junto às isolinhas representam a concentrações de poluente adimensionalizado, calculadas através da Eq. (5.7.2).

As concentrações de poluente, calculadas numericamente junto às paredes das construções, à montante e à jusante da fonte poluidora, foram plotadas, respectivamente, nas Figuras 5.7.4 e 5.7.5 e, juntamente a estas soluções foram incorporados os resultados obtidos experimentalmente por Meroney et al. (1996), e Pavageau e Schatzmann (1999). De forma semelhante, na Figura 5.7.6, são apresentados graficamente os resultados da concentração de poluente na parte superior da construção à jusante da fonte poluidora, juntamente com os resultados experimentais de Meroney et al. (1996).

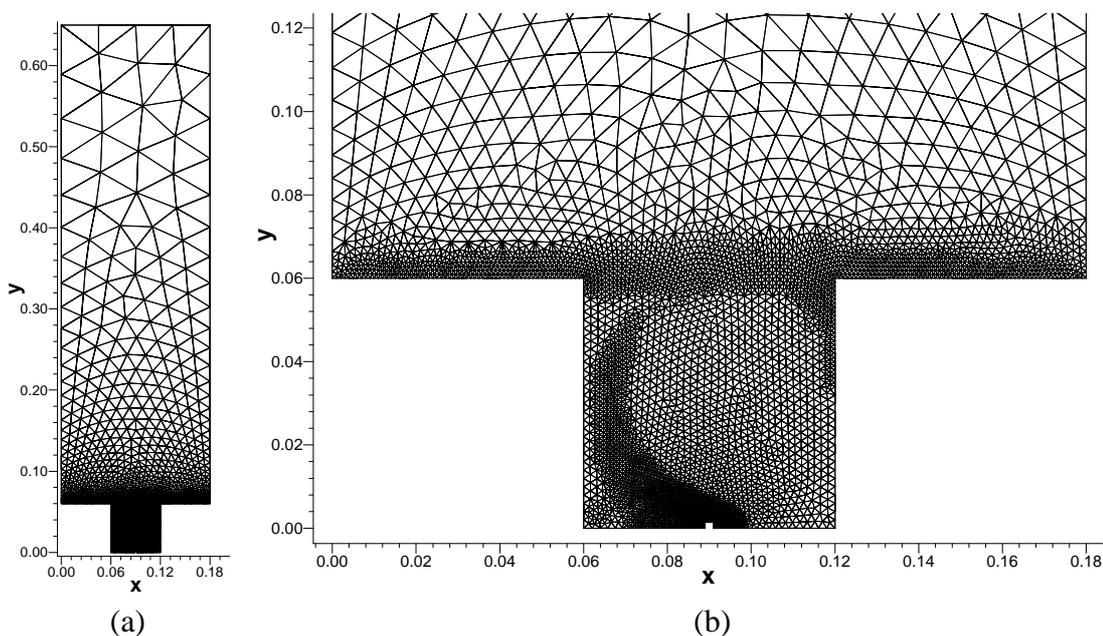


Figura 5.7.2: Malha refinada e suavizada: (a) domínio computacional completo e (b) detalhes junto à cavidade da rua e as duas construções.

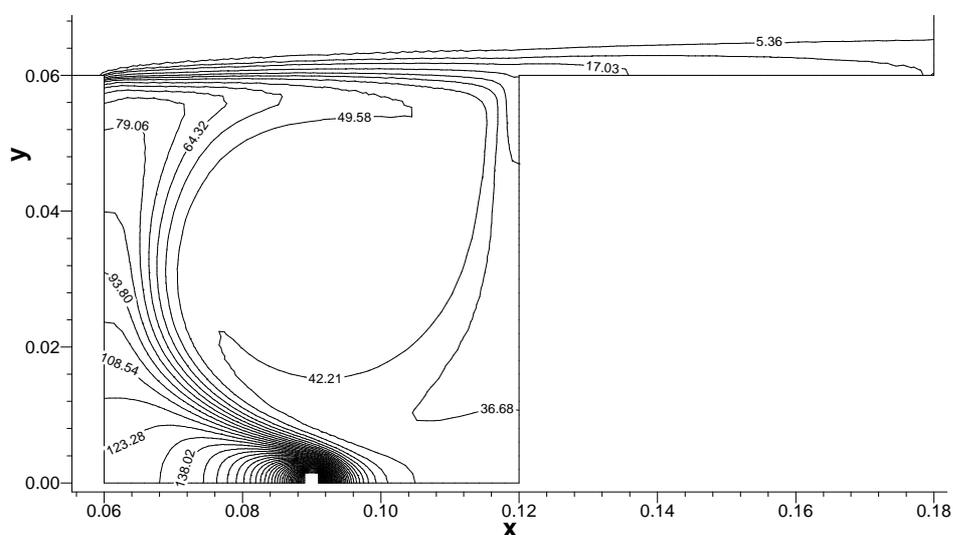


Figura 5.7.3: Isolinas do campo de concentração do poluente adimensionalizada.

Adicionalmente, nas Figuras 5.7.7, 5.7.8 e 5.7.9, são apresentadas as concentrações de poluente, respectivamente, nos eixos centrais, horizontal e vertical, da cavidade entre as duas construções e, transversalmente à rua, no nível do solo.

Comparando as soluções numéricas com os resultados experimentais, aqui incorporados, verifica-se que, de uma forma geral, têm comportamento semelhantes. Analisando a solução junto à parede da construção à montante, verifica-se que os resultados da Figura 5.7.4 têm uma melhor aproximação com os resultados experimentais de Meroney et al. (1996) e estão mais afastados dos resultados experimentais de Pavageau e Schatzmann (1999). Da mesma forma, ocorre quando comparados os resultados na parede da construção à jusante – Figura 5.7.5; novamente os resultados deste trabalho têm uma melhor concordância com os resultados obtidos por Meroney et al. (1996).

A concentração de poluente na cobertura da construção à jusante tem um comportamento semelhante ao apresentado por Meroney et al. (1996), mas levemente inferior, quando comparada com o resultado experimental.

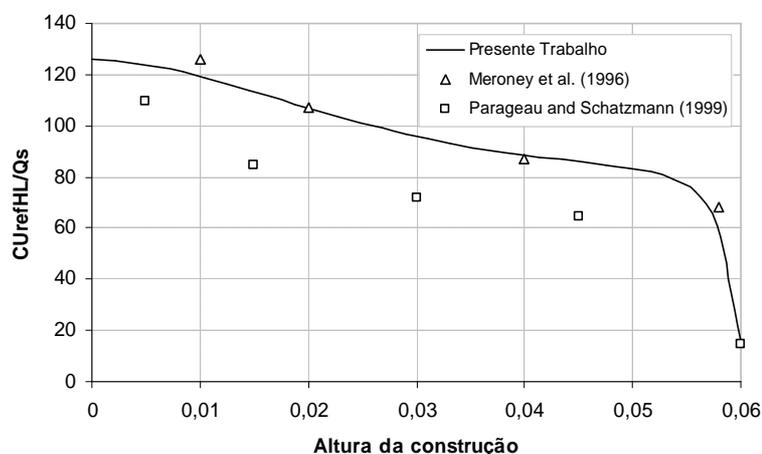


Figura 5.7.4: Concentração do poluente na parede da construção à montante da fonte.

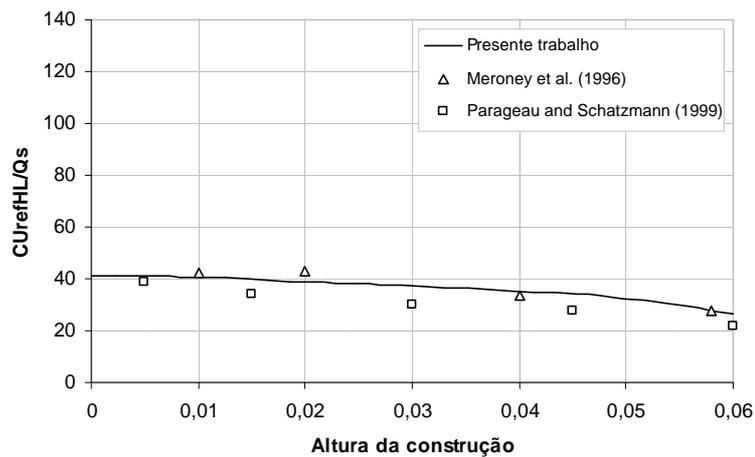


Figura 5.7.5: Concentração do poluente na parede da construção à jusante da fonte.

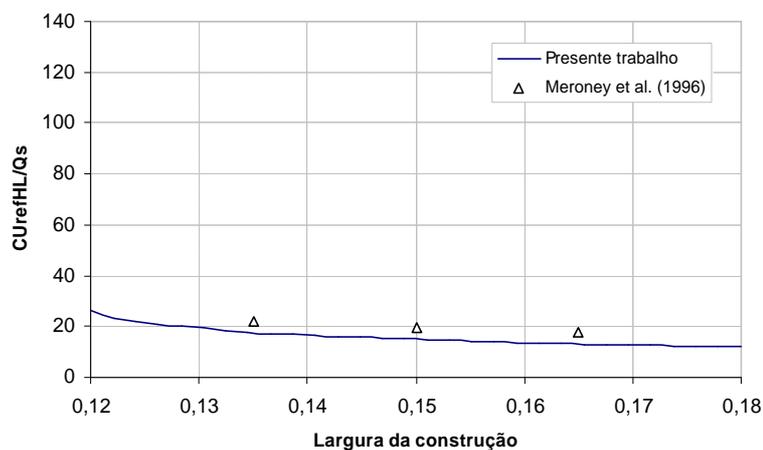


Figura 5.7.6: Concentração do poluente na parte superior da construção à jusante da rua.

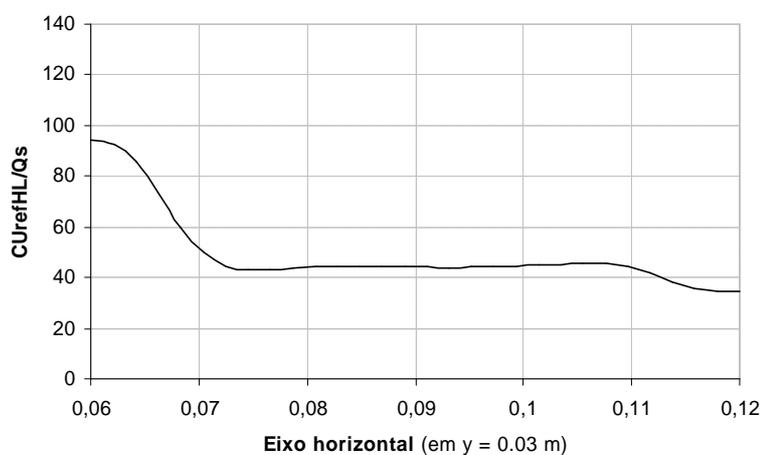


Figura 5.7.7: Concentração do poluente no eixo horizontal central da cavidade da rua.

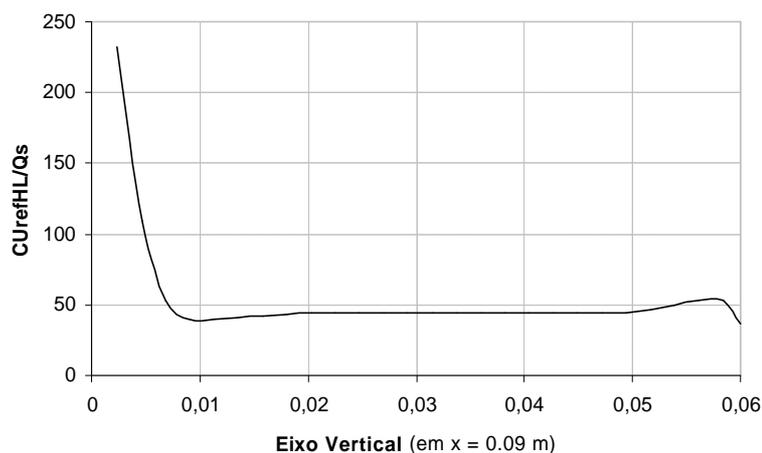


Figura 5.7.8: Concentração do poluente no eixo vertical central da cavidade da rua.

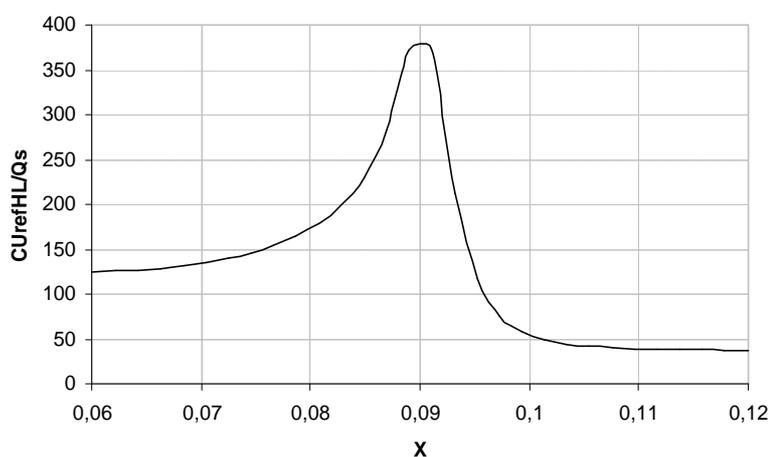


Figura 5.7.9: Concentração do poluente junto ao solo da cavidade da rua.

Analisando os resultados numéricos da dispersão de poluentes, apresentados na Figura 5.7.3 e detalhados nas Figuras 5.7.4 – 5.7.9, percebe-se claramente que os níveis de concentração de poluente mais intensos, além da região próxima à fonte poluidora, localizam-se na primeira metade da rua à montante da fonte e na parede da construção à montante. Na parede da construção à montante, o nível de concentração de poluente decresce ao longo da altura, como pode ser observado nas Figuras 5.7.3 e 5.7.4. Na parede da construção à jusante, a concentração de poluente decresce em função da altura, aqui em níveis mais baixos (ver Figuras 5.7.3 e 5.7.5). Na cobertura da construção à jusante, os níveis de concentração de poluente são bem mais baixos e decrescem levemente à medida que se afasta da cavidade da rua, como mostram as Figuras 5.7.3 e 5.7.6. Conforme mostram as Figuras 5.7.3, 5.7.7 e 5.7.8, a concentração de poluente na região central da cavidade mantém-se constante, $K \approx 44$.

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

No presente trabalho, com o objetivo de aprimorar e dar maior versatilidade, ao código computacional de elementos finitos tridimensionais, utilizado para simular escoamentos incompressíveis em regime laminar, este foi adaptado para simular as grandes escalas de escoamentos turbulentos. Para representar os efeitos das escalas sub-malha, foram implementados, independentemente, dois modelos de viscosidade turbulenta: o modelo clássico de Smagorinsky e o modelo Dinâmico. Na equação de quantidade escalar, foi incluída a influência das escalas sub-malha, no termo de difusão. Além disto, na equação de quantidade de movimento, foi inserido o termo fonte, que leva em consideração as forças de empuxo, devido a efeitos de gradientes de temperatura – possibilitando, assim, simular escoamentos não isotérmicos, em regime de convecção mista.

Com o propósito de obter soluções de melhor qualidade, foi implementada uma estratégia de adaptação de malhas, que permite construir uma malha de forma interativa com o cálculo da solução numérica, que se ajustasse dinamicamente aos fenômenos físicos do escoamento. A estratégia foi construída com indicadores de erro, um critério de adaptação, um esquema de refinamento/desrefinamento, um processo de suavização laplaciana e uma estrutura de dados, capaz de organizar, gerenciar e integrar a estratégia de adaptação ao código que simula o escoamento.

Na validação dos procedimentos implementados, foram realizadas e analisadas aplicações envolvendo escoamentos laminares, turbulentos, isotérmicos, não isotérmicos, simulações com soluções permanentes e transientes, e problemas de dispersão de poluentes. O algoritmo para a simulação de escoamentos de fluidos incompressíveis foi implementado, utilizando um esquema semi-implícito de Taylor-Galerkin de dois passos.

As análises das soluções numéricas, obtidas com o código computacional tridimensional, utilizado para a simulação numérica direta das equações de Navier-Stokes (DNS), ou para a simulação de grandes escalas de escoamentos turbulento (LES) e acoplado a uma estratégia de adaptação automática de malhas, mostraram-se eficientes em todas as situações. Assim, os objetivos de obter soluções numéricas de qualidade a um baixo custo computacional foram alcançados.

O custo computacional não foi avaliado somente pela quantidade de elementos utilizados na malha final da simulação numérica, mas sim pelo fato que o esquema de adaptação de malhas permite conduzir o cálculo da simulação, por um longo intervalo de tempo, com a malha grosseira¹. Com base nas simulações de escoamentos apresentadas neste trabalho, onde a solução permanente foi alcançada, cerca de 70% a 90% do tempo de simulação foi realizada com a malha grosseira. Nestes casos, o tempo de processamento, para realizar os refinamentos das malhas, é praticamente desprezível.

As duas primeiras aplicações foram realizadas exclusivamente para analisar a performance da simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos. Na primeira aplicação, que trata do escoamento tridimensional numa cavidade, dois casos foram analisados, para $Re = 1000$ e $Re = 3200$. No primeiro caso, os resultados do campo de velocidades, linhas de corrente e perfil de velocidade mostraram-se satisfatórios, quando comparados com os resultados obtidos por outros autores. As soluções apresentadas, na forma de trajetórias de partículas, permitiram visualizar o complexo comportamento da dinâmica do escoamento na cavidade 3D. No segundo caso, um estudo estatístico da turbulência foi realizado, cujos resultados, para as componentes da velocidade média, intensidade de turbulência e tensões de Reynolds, foram qualitativamente coerentes com os dados experimentais publicados na literatura especializada.

Com relação ao escoamento 2D e 3D, num canal com degrau, várias abordagens foram realizadas, tais como a influência do número de Reynolds, comparações entre os modelos de escalas sub-malha de Smagorinsky e o dinâmico, e as diferenças entre os escoamentos 2D e 3D. Bons resultados foram obtidos, quando $Re < 600$, para o comprimento de recolamento do vórtice principal, em escoamentos 2D e 3D. No entanto, no escoamento 2D com $600 \leq Re \leq 1000$, os resultados da solução numérica, para comprimento de recolamento, são menores que os obtidos com trabalhos experimentais. Mas, para o escoamento 3D, os resultados numéricos e experimentais são coerentes. Para este intervalo do número de Reynolds, o modelo de Smagorinsky simulou valores menores do comprimento de recolamento do que os obtidos com o modelo dinâmico e as diferenças crescem quando o número de Reynolds aumenta. Em função destes resultados, ficou confirmado que o modelo de Smagorinsky é mais dissipativo do que o modelo dinâmico e que a turbulência é um fenômeno tridimensional. No escoamento 3D, na região do vórtice principal, ocorre um escoamento transversal, do plano da parede em

¹ Observe-se que o passo de tempo utilizado para malha grosseira é maior do que aquele usado nas malhas refinadas.

direção ao plano de simetria. Para a simulação 2D com $600 \leq Re \leq 1000$, os comprimentos de separação dos vórtices secundários foram semelhante aos valores apresentados na literatura técnica. Entretanto, aqui neste trabalho, o regime transiente ocorreu para o número de Reynolds menor daquele apresentado no trabalho experimental de Armaly et al. (1983). Foi mostrado que, para os números de Reynolds mais elevados ($Re = 10000$ e $Re = 40000$), os vórtices oscilam e o resfriamento de fluido é mais acentuado à medida que o número de Reynolds aumenta, devido ao efeito da transferência de calor por advecção ser cada vez mais dominante nas duas direções.

Boas malhas foram geradas nas aplicações, onde o esquema de adaptação automática de malhas foi utilizado. O critério de adaptação mostrou ser eficiente na análise dos indicadores de erro, identificando de forma correta os elementos que deveriam ser refinados, para propiciar a obtenção de soluções numéricas de melhor qualidade. O esquema de subdivisão de elementos, juntamente com o processo de suavização laplaciana com restrição, produziram malhas de boa qualidade, tanto sob os aspectos geométricos, como na suavização da transição de elementos de diferentes tamanhos. A propagação de refinamentos e a geração de elementos inversos, não foram constatadas.

Nas aplicações, cujas soluções transientes foram calculadas utilizando sucessivas atualizações de malha, verificou-se que o esquema de adaptação automática de malhas teve um bom desempenho e o custo computacional para realizar as atualizações mostrou-se viável, representando cerca de 20% do tempo total de processamento da simulação.

Na aplicação do escoamento sobre um cilindro, em 3D e $Re = 300$, verificou-se que, além dos vórtices primários, as estruturas de vórtices longitudinais, embora de pequenas escalas, influenciam na dispersão de poluentes.

Excelentes resultados foram obtidos nas aplicações que envolveram o transporte de poluente, tanto no exemplo que trata do transporte de poluente num salto da variável escalar, quanto na dispersão de poluente num ambiente urbano.

Em síntese, as principais contribuições deste trabalho são a formulação e a aplicação de uma estratégia de adaptação de malhas e a inclusão dos modelos de turbulência, integrados com um algoritmo utilizado para simular complexos escoamentos de fluidos, viscosos, incompressíveis, bi e tridimensionais, laminares, turbulentos, isotérmicos, não isotérmicos, transientes e envolvendo o transporte de quantidades escalares.

Após realizar as pesquisas relacionadas ao desenvolvimento da tese de doutorado e pela experiência adquirida, várias sugestões de trabalhos futuros podem ser apresentadas. Dentre elas, a implementação de outros modelos de turbulência seria um bom estudo relacionado à simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos.

A simulação numérica direta das equações de Navier-Stokes, integrada com um esquema de adaptação de malhas, é um bom tema para ser desenvolvido, com o objetivo específico de estudar, minuciosamente, o comportamento das grandes e pequenas escalas de escoamentos turbulentos. Para que esta pesquisa, porém, tenha sucesso, obrigatoriamente deve ser providenciada a utilização de uma estrutura computacional de grande porte, em termos de capacidade de armazenagem de informação e de velocidade de processamento.

Um bom trabalho poderia ser desenvolvido através da implementação de modelos de turbulência e uma estratégia da adaptação automática de malhas para a simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos compressíveis.

Para dar continuidade ao aperfeiçoamento do código computacional desenvolvido, pode ser incluída a técnica de passo de tempo variável, a qual parece ser uma perfeita combinação com a técnica de adaptação de malhas. Também poderá ser incluído um processo de realocação nodal, com o propósito de concentrar os elementos da malha nas regiões de elevados indicadores de erro, como um adicional ao esquema de refinamento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ainsworth, M.; Zhu, J. Z.; Craig, A. W.; Zienkiewicz, O. C. Analysis of the Zienkiewicz-Zhu. A posteriori error estimator in the finite element method. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 28, p. 2161-2174, 1989.
- Ait-Ali-Yahia, D.; Habashi, W. G.; Tam, A.; Vallet, M. G.; Frotin M. A directionally adaptive methodology using an edge-based error estimate on quadrilateral grids. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 23, p. 673-690, 1996.
- Argyris, J.; Doltsinis, T. S.; Friz, H. Studies on computational reentry aerodynamics. **Computer Methods in Applied Mechanics Engineering**, vol. 81, p. 257-187, 1990.
- Armaly, B. F.; Durst, F. J.; Pereira, C. F.; Schönung, B. Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow. **Journal Fluid Mechanics**, vol. 127, p. 473-496, 1983.
- Assimkopoulos, V. D.; Apsimon, H. M.; Moussiopoulos, N. A numerical study of atmospheric pollutant dispersion in different two-dimensional street canyon configurations. **Atmospheric Environment**, vol. 37, p. 4037-4049, 2003.
- Babuska, I.; Miller, A. The post-processing approach in the finite element method – Part 3: A posteriori error estimates and adaptive mesh selection. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 20, p. 2311-2324, 1984.
- Baker, J.; Walker, H. L.; Cai, X. A study of the dispersion and transport of reactive pollutants in and above street canyons – a large eddy simulation. **Atmospheric Environment**, vol. 38, p. 6883-6892, 2004.
- Balas, L.; Özhan, E. An implicit three-dimensional numerical model to simulate transport processes in coastal water bodies. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 34, p. 307-339, 2000.
- Bank, R. E.; Sherman, A. H.; Weise, A. Refinement algorithms and data structures for regular local mesh refinement. **Scientific Computing**, p. 3-17, 1983.

- Bey, J. Tetrahedral grid refinement. **Computing**, vol. 55, p. 355-378, 1995.
- Biswas, R.; Strawn, R. C. A new procedure for dynamic adaption of three-dimensional unstructured grid. **Applied Numerical Mathematics**, vol. 13, p. 437-452, 1994.
- Bono, G.; Awruch, A. M. Adaptação via movimento de malhas em escoamentos compressíveis. ENIEF 2004 - XIV Congresso sobre métodos numéricos ysus aplicaciones, 2004, San Carlos de Bariloche. **Asociación Argentina de Mecánica Computacional**, v. XXIII. p. 2517-2530, 2004.
- Bornemann, F.; Erdmann, B.; Kornhuber, R. Adaptive multilevel methods in three space dimensions. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 36, p. 3187-3203, 1993.
- Brzoska, M. A.; Stock D.; Lamb, B. Determination of plume capture by the building wake. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 67-68, p. 909-922, 1997.
- Castro, I. P.; Cowan, I. R.; Robins, A. G. Simulation of flow and dispersion around building. **Journal of Aerospace Engineering**, vol. 12, p. 145-160, 1999.
- Chan, T. L.; Dong, G.; Leung, C. W.; Cheung, C. S.; Hung, W. T. Validation of a two-dimensional pollutant dispersion model in an isolated street canyon. **Atmospheric Environment**, vol. 36, p. 861-872, 2002.
- Chiang, T. P.; Sheu, T. W. H. Time evolution of laminar flow over a three-dimensional backward-facing step. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 31, p. 721-745, 1999.
- Choi, H. G.; Choi, H.; Yoo, J. Y. A fractional four-step finite element formulation of the unsteady incompressible Navier-Stokes equations using SUPG and linear equal-order element methods. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 143, p. 333-348, 1997.
- Clack, R. A.; Ferziger, J. H.; Reynolds, W. C. Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. **Journal Fluid Mechanics**, vol. 91, p. 1-16, 1979.

- Connell, S. D.; Holmes, D. G. Three-dimensional unstructured adaptive multigrid scheme for the Euler equations. **AIAA Journal**, vol. 32 n. 8, p.1626-1632, 1994.
- Cowan, I. R.; Castro, I. P.; Robins, A. G. Numerical considerations for simulations of flow and dispersion around buildings. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 67&68, pp 535-545, 1997.
- Dannelongue, H. H.; Tanguy, P. A. Efficient data structures for adaptive remeshing with the FEM. **Journal of Computations Physics**, vol. 91, p. 94-109, 1990.
- Deardoff, J. W. On the magnitude of the subgrid scale eddy coefficient. **Journal of Computational Physics**, vol. 7, p. 120-133, 1971.
- Demkowicz, L.; Oden, J. T.; Rachowicz, W.; Hardy, O. An h - p Taylor-Galerkin element method for compressible Euler equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 88, p. 363-396, 1991.
- Demkowicz, L.; Oden, J. T.; Strouboulis, T. Adaptive finite elements for flow problems with moving boundaries. Part I: Variational principles and a posteriori estimates. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 88, p. 217-251, 1984.
- Denaro, F. M. Towards a new model-free simulation of high-Reynolds-flow: Local average direct numerical simulation. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 23, p. 125-142, 1996.
- Devloo, P.; Oden, L. T.; Strouboulis, T. Implementation of an adaptive refinement technique for the SUPG algorithm. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 61, p. 339-358, 1987.
- Devloo, P.; Oden, J. T.; Tattani, P. An h - p adaptive finite element method for the numerical simulation of compressible flow. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 70, p. 203-235, 1988.
- Findikakis, A. N.; Street, R. L. Mathematical description of turbulent flows. **Journal of Hydraulics Division, ASCE**, V108, No.HY8, paper 17265, p. 887-903, 1982.

- Freitag, L. A.; Ollivier-Gooch, C. A comparison of tetrahedral mesh improvement techniques. **5th International Meshing Roundtable**, p. 87-100, 1996
- Freitag, L. A.; Ollivier-Gooch, C. Tetrahedral mesh improvement using swapping and smoothing. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 40, p. 3979-4002, 1997.
- Freire, A. P. S.; Menut, P. P. M.; Su, J. **Turbulência**. Associação Brasileira de Ciências Mecânica, Rio de Janeiro, Brasil, 1998.
- Fuenmayor, F. J.; Oliver, J. L. Criteria to achieve nearly optimal meshes in the *h*-adaptive finite element method. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 39, p. 4039-4061, 1996.
- Gerde, F.; Olivari, D. Analysis of pollutant dispersion in an urban street canyon. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 82, p. 105-124, 1999.
- Germano, M., Piomelli, U.; Moin, P.; Cabot, W. H. **A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. Physics and Fluids A**, vol. 3, p. 1760-1765, 1991.
- Ghosal, S. G.; Lund, T.; Mion P.; Akselvoll, K. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. **Journal Fluid Mechanics**, vol. 286, p. 229-255, 1995.
- Golias, N. A.; Tsiboukis, T. D. An approach to refining three-dimensional tetrahedral meshes based on Delaunay transformations. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 37, p. 793-812, 1994.
- Grosso, R.; Lürig, C.; Ertl, T. The multilevel finite element method for adaptive mesh optimization and visualization of volume data. **IEEE**, vol. 97, p. 387-394, 1997.
- Habashi, W. G.; Dompierre, J.; Bourgault, Y.; Ait-ali-Yahia, D.; Fortin, M.; Vallet M.-G. Anisotropic mesh adaptation: toward user-independent, mesh independent and solver-independent CFD. Part I: general principles. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 32, p. 725-744, 2000.
- Hatanaka, K.; Kawahara, M. A numerical study of vortex shedding around a heated/cooled circular cylinder by the three-step Taylor-Galerkin method. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 21, p. 857-867, 1995.

- Hinze, J. O. **Turbulence, an introduction to its mechanism and theory**. McGraw-Hill Book Company, New York, 1959.
- Ivanenko, S. A.; Azarenok, B. N. Application of moving adaptive grids for numerical solution of 2D nonstationary problems in gas dynamics. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 39, p. 1-22, 2002.
- Jimack, P. K.; Mahmood, R.; Walkley, M. A.; Berzins, M. A multilevel approach for obtaining locally optimal finite element meshes. **Advances in Engineering Software**, vol. 33, p. 403-415, 2002.
- Kallinderis, Y.; Vijayan, P. Adaptive refinement-coarsening scheme for three-dimensional unstructured meshes. **AIAA Journal**, vol. 31, p.1440-1447, 1993.
- Kim, J.; Kline, S. J.; Johnston, J. P. Investigation of a reattachment turbulent shear layer: flow over a backward-facing step. **Journal Fluid Engineering**, ASME, vol. 102, p. 302-308, 1980.
- Kim, J.; Moin, P. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. **Journal of Computational Physics**, vol. 59, p. 308-323, 1985.
- Kim, J. J.; Baik, J. J.; Chun, H. Y. Two-dimensional numerical modeling of flow and dispersion in the presence of hill and buildings. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 89, p. 947-966, 2001.
- Knight, D.; Zhou, G.; Okong'o, N.; Shukla, V. Compressible large eddy simulation using unstructured grids. **AIAA Journal**, n° 980535, 1998.
- Lauder, B. E.; Spalding, D. B. **Lectures in Mathematic models in turbulence**. Academic Press, London, 1972.
- Lauder, B. E.; Spalding, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 3, p. 269-289, 1974.
- Lee, S. Numerical study of wake structure behind a square cylinder at high Reynolds number. **Wind and Structures**, vol. 1, p. 127-144, 1998.

- Leonard, A. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. **Advance in Geophysics**, vol. 18A, p. 237-248, 1974.
- Lesieur, M. **Turbulence in Fluids**. third edition, Kluwer Academic Publishers, London, 1987.
- Li, Y.; Stathopoulos, T. Computational evaluation of pollutant dispersion around buildings: Estimation of numerical errors. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 77 e 78, p. 619-630, 1998.
- Lilly, D.K. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. **Physics and Fluids A**, vol. 4, p. 633-635, 1992.
- Lo, S. H. Generating quadrilateral element on plane and over curved surfaces. **Computer Structure**, vol. 31, p. 421-426, 1989.
- Löhner, R. An adaptive finite element scheme for transient problems in CFD. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 61, p. 323-338, 1987.
- Löhner, R. Adaptive remeshing for transient problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 75, p. 195-214, 1989.
- Löhner, R.; Morgan, K.; Zienkiewicz, O. C. An adaptive finite element procedure for compressible high speed flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 51, p. 441-465, 1985.
- Markatos, N. C. The mathematical modelling of turbulent flows. **Applied Mathematical Modelling**, vol. 10, p. 190-220, 1986.
- Mason, P. J.; Callen, N. S. On the magnitude of the subgrid-scale eddy coefficient in large-eddy simulations of turbulent channel flow. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 162, p. 439-462, 1986.
- Mavriplis, D. J. Adaptive meshing technique for viscous flow calculations on mixed element unstructured meshes. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 34, p. 93-111, 2000.
- Meneveau, C.; Lund, T.; Cabot, W. H. A lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. **Journal Fluid Mechanics**, vol. 319, p. 353-385, 1996.

- Meroney, R. N.; Pavageau, M.; Rafailidis, S.; Schatzmann, M. Study of line source characteristics for 2-D physical modeling of pollutant dispersion in street canyons. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 62, p. 37-56, 1996.
- Moin, P.; Kim, J. Numerical investigation of turbulent channel flow. **Journal Fluid Mechanics**, vol. 118, p. 341-377, 1982.
- Möller, S. V.; Silvestrini, J. H. Turbulência: fundamentos, **Anais da IV escola de primavera de transição e turbulência – ETT 2004**, p. 1-32, 2004
- Murakami, S. Current status and future trends in computational wind engineering. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 67-68, p. 3-34, 1997.
- Murakami, S. Overview of turbulence models applied in CWE-1997. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 74-76, p. 1-24, 1998.
- Nakayama, A.; Vengadesan, S. N. On the influence of numerical schemes and subgrid-stress models on large eddy simulation of turbulent flow past a square cylinder. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 38, p. 227-253, 2002.
- Nambiar, R. V.; Valera, R. S.; Lawrence, K. L.; Morgan, R. B.; Amil, D. An algorithm for adaptive refinement of triangular element meshes. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 36, p. 499-509, 1993.
- Oden, J. T.; Srouboulis, T.; Devloo, P. Adaptive finite element methods for the analysis of inviscid compressible flows: Part I. Fast refinement/unrefinement and moving mesh methods for unstructured meshes. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 59, p. 327-362, 1986.
- Padilla, E. L. M.; Silveira Neto, A. Influência de diferentes tipos de filtros para modelagem dinâmica em simulação de grandes escalas. **Anais do XXIV Iberian Latin-American Congresso n Computacional Methods in Engineering**, Ouro Preto, 2003.
- Pavageau, M.; Schatzmann, M. Wind tunnel measurements of concentration fluctuations in an urban street canyon. **Atmospheric Environment**, vol. 33, p. 3961-3971, 1999.
- Peraire, J.; Vahdati, M.; Morgan, K.; Zienkiewicz, O. C. Adaptive Remeshing for compressible flow computations. **Journal of Computations Physics**, vol. 72, p. 449-466, 1987.

- Petry, A. P. **Análise numérica de escoamento turbulentos tridimensionais empregando o método de elementos finitos e simulação de grandes escalas**, Tese de Doutorado, Porto Alegre, PROMEC/UFRGS, 2001.
- Piomelli, U. High Reynolds number calculations using the dynamics subgrid-scale stress model. **Physics and Fluids A5**, vol. 6, p. 1484-1490, 1993.
- Piomelli, U.; Lui, J. Large-eddy simulation of rotating channel flows using a localized dynamic model. **Physics and Fluids**, vol. 7, p. 839-848, 1995.
- Piomelli, U.; Yu, Y.; Adrian, R. J. Subgrid-scale energy transfer and near-wall turbulence structure. **Physics and Fluids**, vol. 8 (1), p. 215-224, 1996.
- Plaza, A.; Padrón, M.A.; Carey, G.F. A 3D refinement/derefinement algorithm for solving evolution problems. **Applied Numerical Mathematics**, vol. 32, p. 401-418, 2000.
- Popiolek, T. L.; Awruch, A. M. Numerical simulation of incompressible flows using adaptive unstructured meshes and pseudo-compressibility hypothesis. **Advances in Engineering Software**, p. 1-15, 2005 – in Press.
- Popiolek, T. L.; Awruch, A. M.; Teixeira, P. R. F. Finite element analysis of laminar and turbulent flows using LES and subgrid-scale model. **Applied Mathematics Modelling**, p. 1-23, 2005 – in Press.
- Probert, J.; Hassan, O.; Peraire, J.; Morgan, K. An adaptive finite element method for transient compressible flows. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 32, p. 1145-1159, 1991.
- Raithby, G. D. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flow. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, vol. 9, p. 153-164, 1976.
- Ramakrishnan, R.; Bey, K. S.; Thornton, E. A. Adaptive quadrilateral and triangular finite element scheme for compressible flows. **AIAA journal**, vol. 28, p. 51-59, 1990.
- Ribeiro, P. A. R. **Desprendimento de vórtices e controle em esteira de cilindros por simulação numérica direta**. Dissertação de Mestrado, Porto Alegre, IPH/UFRGS, 2002.

- Richter, R.; Leyland, P. Entropy correcting schemes and non-hierarchical auto-adaptive dynamic finite element-type meshes: Applications to unsteady aerodynamics. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 20 p. 853-868, 1995.
- Riccius, J.; Schweizerhof, K.; Baumann, M. Combination of Adaptivity and mesh smoothing for the finite element analysis of shells with intersections. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 40, p. 2459-2474, 1997.
- Rivara, M. C. A grid generator based in 4-triangles conforming mesh-refinement algorithms. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 24, p. 1343-1354, 1987.
- Rodi, W. **Turbulence models and their application in hydraulics - A state of the art review**. Institute Association of Hydraulics research (IAHR), Delft Netherlands, 1984.
- Sagaut, P.; Troff, B.; Lê, T. H.; Loc, T. P. **Two-dimensional simulations with subgrid scale models for separated flow**. Printed in the Netherlands, p. 109-120, 1994.
- Salvam, R. P. Numerical simulation of pollutant dispersion around a building using FEM. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, vol. 67 e 68, p. 805-814, 1997.
- Salvetti, M. V.; Banerjee, S. A priori tests of a new dynamic subgrid-scale model for finite-difference large-eddy simulations. **Physics and Fluids**, vol. 7, p. 2831-2847, 1995.
- Schlichting, H. **Boundary-Layer Theory**. Sixth edition, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.
- Silveira Neto, A.; Grand, D.; Lesieur, M. A numerical investigation of the coherent vortices in turbulence behind a backward-facing step. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 256, p. 1-25, 1993.
- Silveira Neto, A.; Mansur, S. S.; Silvestrini, J. H. Equações da turbulência média versus filtragem. Anais da **III Escola de Primavera e Transição e Turbulência**, Florianópolis, 2002.
- Sini, J. F., Anquetin, S.; Mestayer, P. G. Pollutant dispersion and thermal effects in urban street canyons. **Atmospheric Environment**, vol. 30, p. 2659-2677, 1996.

- Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment. **Monthly Weather Review**, vol. 91, p. 99-164, 1963.
- Sohn, J. L. Evaluation of FIDAP on some classical laminar and turbulent benchmarks. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 8, p. 1469-1490, 1988.
- Speares, W.; Berzins, M. A 3D unstructured mesh adaptation algorithm for time-dependent shock-dominated problems. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 25, p. 81-104, 1997.
- Tang, L. Q.; Cheng, T.; Tsang, T. T. H. Transient solutions for three-dimensional lid-driven cavity flows by a least-squares finite element method. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 21, p. 413-432, 1995.
- Teixeira, P. R. F. **Simulação numérica da interação de escoamentos tridimensionais de fluidos compressíveis e incompressíveis e estruturas deformáveis usando o método de elementos finitos**. Tese de Doutorado, Porto Alegre, PPGEC/UFRGS, 2001.
- Tennekes, H.; Lumley, J. L. **A first course in turbulence**. fifteenth printing, Cambridge, Massachusetts and London, England, 1972.
- Thoutireddy, P.; Molinari, J. F.; Repetto E. A.; Ortiz, M. Tetrahedral composite finite elements. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 53, p. 1337-1351, 2002.
- Vilsmeier, R.; Hänel, D. Adaptive solutions for unsteady laminar flows on unstructured grids. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 22, p. 85-101, 1995.
- Vreman, B.; Geurst, B.; Kuerten, H. On the formulation of the dynamic mixed subgrid-scale model, **Physics and Fluids A**, vol. 6, p. 4057-4059, 1994.
- Williams, P. T.; Baker, A. J. Numerical simulations of laminar flow over a 3D backward-facing step. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 24, p. 1159-1183, 1997.
- Williamson, C. H. K. Oblique and parallel modes of vortex shedding in the wake of a circular cylinder at low Reynolds numbers. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 206, p. 579-627, 1989.

- Williamson, C. H. K. Three-dimensional wake transition. **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 328, p. 345-407, 1996.
- Wilnslow, A. M. Numerical solution of the quasilinear Poisson equation in a nonuniform triangular mesh. **Journal of Computations Physics**, vol. 2, p. 149-172, 1967.
- Xia, J.; Leung, D. Y. C. Pollutant dispersion in urban street canopies. **Atmospheric Environment**, vol. 35, p. 2033-2043, 2001.
- Zang, Y.; Street, R. L.; Koseff J. R. A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. **Physics and fluids A**, vol. 5, p. 3186-3196, 1993.
- Zhou, T.; Shimada, k. An angle-based approach to two-dimensional mesh smoothing. **9th International Meshing Roundtable**, p. 373-384, 2000.
- Zienkiewicz, O. C.; Codina, R. A general algorithm for compressible and incompressible flow. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 20, p. 869-885, 1995.
- Zienkiewicz, O.C.; Mithiarasu, P.; Codina, R.; Vazquez, M.; Ortiz P. The characteristic-based-split procedure: an efficient and accurate algorithm for fluid problems. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 31, p. 359-392, 1999.
- Zienkiewicz, O. C.; Zhu, J. Z. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 24, p. 337-357, 1987.
- Zienkiewicz, O. C.; Wu, J. A general explicit of semi explicit algorithm for compressible and incompressible flows, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 35, p. 457-479, 1992.