

Resumo

O objectivo principal deste trabalho foi a simulação do transporte de escalares passivos em escoamentos turbulentos, através da simulação numérica directa (DNS—*Direct Numerical Simulation*) e da simulação das grandes escalas da turbulência (LES—*Large Eddy Simulation*), visando a simulação de escoamentos em geometrias complexas.

Utilizando a simulação numérica directa (DNS) simulámos o transporte de escalares passivos em turbulência isotrópica, forçada e em decaimento, e sujeita ao efeito de corte e gradiente vertical do campo escalar, com número de Reynolds baseado na microescala de Taylor (R_λ) de 40 e número de Prandtl (Pr) igual a 0.7 e 10. Os cálculos foram efectuados num cubo periódico com graus de distorção diversos para avaliar a capacidade dos métodos numéricos utilizados na resolução deste tipo de problemas. Os resultados obtidos mostraram que as distribuições estatísticas do campo escalar, derivadas da velocidade, correlações entre vorticidade e gradiente escalar e correlações entre taxas de deformação e gradiente escalar apresentam evoluções idênticas para qualquer dos graus de distorção da malha. Deste modo, concluímos que os métodos numéricos utilizados são adequados e o programa de cálculo pode ser usado na resolução de problemas de maior complexidade geométrica.

De seguida, estudámos os efeitos da curvatura e do corte na turbulência, por simulação do escoamento com corte no interior de um canal com curvatura e sem camada limite, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) de 68000, do qual são conhecidos resultados experimentais de Holloway and Tavoularis (1992). Utilizámos a simulação das grandes escalas da turbulência (LES) e as tensões de *submalha* foram modeladas através do modelo dinâmico Lagrangeano. Nas fronteiras superior e inferior do canal utilizou-se a condição de escorregamento livre, na direcção transversal condições periódicas e na saída a condição convectiva, discretizada com recurso ao método de Euler explícito. Estudou-se a influência do tempo de integração, da malha e da condição de entrada. Foram testadas três condições de entrada distintas: (i) baseada em números aleatórios com distribuição Gaussiana; (ii) um campo com distribuição Gaussiana em que a correlação entre as componentes das tensões de Reynolds é especificada e (iii) obtida a partir de um campo desenvolvido numa simulação prévia usando um cubo de turbulência isotrópica. Concluímos que: as médias devem ser efectuadas entre o 6º e 12º segundos após o início do cálculo; a malha necessita de 64×64 nós na direcção transversal e a condição de entrada (iii) foi a mais adequada. Verificámos que: na zona recta do canal, as tensões de Reynolds aumentam

fruto de uma transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte e que na zona curva o crescimento das tensões de Reynolds é mais acentuado e é provocado pela curvatura.

Por último, simulou-se o escoamento turbulento no interior de um canal com dupla curvatura, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) de 68000 e número de Prandtl (Pr) igual a 1, com corte e gradiente do escalar na direcção vertical. As simulações foram efectuadas usando a metodologia da simulação das grandes escalas da turbulência (LES), as tensões de *submalha* foram modeladas através do modelo dinâmico Lagrangeano e os resultados foram validados pelos resultados experimentais de Chebbi et al. (1998). Considerámos 18 intensidades de corte ($S \in [-0.1560; 0.044]$) e do gradiente escalar ($s \in [-1.557; 0.445]$) e vários canais com raios de curvatura R_c iguais a 1, 2 e 3.5 metros. A condição de entrada para os campos de velocidade e escalar foi obtida numa simulação prévia de um escoamento com corte e gradiente escalar na direcção vertical, usando a simulação numérica directa (DNS). Verificámos que os resultados numéricos e experimentais apresentam discordâncias pontuais da ordem dos 30%, cuja origem atribuímos (i) à condição de entrada do trabalho numérico e (ii) ao desenvolvimento da camada limite nas secções curvas do trabalho experimental. Foram analisadas as tensões de Reynolds e a sua anisotropia, a anisotropia das tensões principais e os fluxos e a variância escalares, para concluirmos que: a curvatura e contra-curvatura e a sua intensidade, bem como a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar, promovem o aumento da intensidade da turbulência quando o corte e a curvatura são negativos e diminuem a sua intensidade quando o corte e a curvatura são positivos.

Abstract

The main purpose of this work was the simulation of passive scalars transport in turbulent flows, by direct numerical simulation (DNS) and the large eddy simulation (LES) of turbulence, with the ultimate objective of simulating flows in complex geometries.

Using a direct numerical simulation (DNS), we simulated the passive scalar transport in forcing and decaying isotropic turbulence, and with shear and vertical gradient of the scalar field, with a Reynolds number based on the Taylor microscale (R_λ) of 40 and a Prandtl number (Pr) equal to 0.7 and 10. The calculations were performed in a periodical cube with several distortion degrees to evaluate the capacity of the numerical methods being used for solving these problems. The results showed that statistical distributions of the scalar field, velocity derivatives, vorticity and scalar gradient correlations and rate of strain and scalar gradient correlations are identical for any distortion mesh. We concluded that the numerical methods used are appropriate and the computer code can be used in more complex geometries.

The effects of curvature and shear in turbulence were also studied, by simulating a uniformly sheared flow along a single curved duct without boundary layer, with a Reynolds number based on half-height of the channel (Re_b) of 68000. This was based on the experimental results by Holloway and Tavoularis (1992). We used the large eddy simulation of turbulence (LES) and the *subgrid* stresses were modeled through the Lagrangian dynamic model. In the upper and lower boundary of the channel we used a free slip condition, periodic boundary conditions in the spanwise direction and in the outlet we used a convective condition, discretized by the explicit Euler method. We studied the influence of the integration time, mesh and inlet condition. Three different inlet conditions were tested: (i) based on random numbers with Gaussian distribution; (ii) a field with Gaussian distribution in which the correlation between the components of the Reynolds stresses is specified and (iii) obtained from a field developed in a previous simulation using an isotropic turbulent cube. We concluded that: the averages should be made between 6th and 12nd seconds after the beginning of calculation; the mesh needs 64×64 nodes in the spanwise direction and the inlet condition (iii) was the most appropriate. We verified that: in the straight region of the channel, Reynolds stresses increase due to a energy transfer of the mean field to the turbulent field by action of the shear and in the curved region the growth of the Reynolds stresses is more accentuated and due to the curvature.

Finally, the turbulent flow inside a channel with shear and curvature was simulated, with Reynolds number based on half-height of the channel (Re_b) of 68000 and Prandtl number (Pr) equal to 1, with shear and scalar gradient in the vertical direction. The simulations were performed using the large eddy simulation of turbulence (LES), the *subgrid* stresses were modeled using the Lagrangian dynamic model and the results were validated by experimental results of Chebbi et al. (1998). We considered 18 shear intensities ($S \in [-0.1560; 0.044]$) and scalar gradient ($s \in [-1.557; 0.445]$) and several channels with radius of curvature R_c equal to 1, 2 e 3.5 meters. The inlet condition for velocity and scalar fields were obtained in a previous simulation of a flow with shear and scalar gradient in the vertical direction, using the direct numerical simulation (DNS). We verified that the numeric and experimental results present differ in about 30%, which origin is attributed (i) to the inlet condition of the numeric work and (ii) to the development of the boundary layer in the curved sections of the experimental work. Analyzing Reynolds stresses and its anisotropy, the anisotropy of the principal stresses and the scalar fluxes and scalar variance, we concluded that: the curvature and counter curvature and its intensity, as well as the intensity of shear and scalar vertical gradient, promote the increase of turbulence intensity when the shear and curvature are negative and reduce its intensity when the shear and curvature are positive.