

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto



Simulação das Grandes Escalas da Turbulência em Geometrias Complexas

José Alexandre Costa da Silva Lopes
(Licenciado em Engenharia Mecânica)

Dissertação para a obtenção do grau de
Doutor em Engenharia Mecânica
pela Universidade do Porto

Janeiro de 2000

Simulação das Grandes Escalas da Turbulência em Geometrias Complexas

José Alexandre Costa da Silva Lopes

Resumo

O objectivo principal deste trabalho foi desenvolver um programa de computador para a simulação de escoamentos em geometrias complexas, baseado no método da simulação das grandes escalas da turbulência (LES — *Large Eddy Simulation*) e num sistema de coordenadas genérico. O programa de trabalhos efectuado incluiu a simulação de vários escoamentos, nos quais se compararam dois métodos de modelação da turbulência, se estudou o efeito da estratificação do fluido e se analisou o efeito da utilização do sistema de coordenadas genérico.

Usando uma malha Cartesiana, procedeu-se à comparação entre os resultados obtidos com o método das grandes escalas da turbulência e o modelo de Smagorinsky e os apurados com o método das médias de Reynolds (RaNS — *Reynolds averaged Navier-Stokes*) e o modelo $k-\varepsilon$ na simulação do escoamento em torno de um prisma de secção quadrada, com número de Reynolds $Re = 21400$. No caso do modelo $k-\varepsilon$, usaram-se, além do modelo original, três variantes, para tentar eliminar a produção excessiva de energia cinética da turbulência junto da face frontal do prisma prevista pelo modelo original. Relativamente aos resultados obtidos com o método das médias de Reynolds, os do método das grandes escalas da turbulência previram com mais exactidão o coeficiente de arrasto, o comprimento da zona de recirculação e as tensões de Reynolds. No entanto, verificaram-se algumas deficiências na previsão da componente longitudinal da velocidade junto das faces horizontais do prisma e uma recuperação excessiva da velocidade na esteira, que julgamos deverem-se a uma resolução insuficiente da malha.

Usando uma malha não-ortogonal, simulou-se também o escoamento bidimensional, laminar e estavelmente estratificado em torno de um cilindro, com números de Reynolds entre 20 e 500 e números de Froude interno (F_i) iguais ou superiores a quatro. O objectivo foi avaliar o efeito da estratificação em alguns perfis da velocidade e em parâmetros como o número de Strouhal (St) ou os coeficientes de arrasto e de sustentação (C_d e C_l). O efeito da estratificação só se fez sentir para números de Froude interno inferiores a 100. Nesses casos, o aumento da estratificação provocou sempre a diminuição do número de Strouhal e das oscilações dos coeficientes de arrasto e de sustentação dos escoamentos que ocorriam em regime periódico. As evoluções temporais dos ângulos de estagnação e de separação (θ_s e θ_d) foram pouco afectadas pela estratificação, tal como o comprimento médio da zona de recirculação, que nunca se alterou em mais de 5%. Contudo, a máxima velocidade negativa

chegou a reduzir-se de 36% no caso do escoamento com $Re = 500$.

O efeito da não-ortogonalidade da malha foi estudado através da simulação numérica directa (DNS — *Direct Numerical Simulation*) do decaimento da turbulência isotrópica (com $Re_\lambda \approx 40$) em malhas regularmente espaçadas com 64^3 e 128^3 nós; os domínios físicos tinham a forma de paralelepípedos rectos periódicos, com apenas duas faces não paralelas a um dos planos Cartesianos. As simulações foram iniciadas com campos de velocidade com o mesmo espectro de energia e de correlações; porém, devido ao modo como eram calculadas as derivadas nas malhas não-ortogonais, as distribuições estatísticas de algumas componentes da vorticidade e do tensor das taxas de deformação eram diferentes. No entanto, após cerca de metade do *eddy turnover time* as diferenças não eram maiores do que as observadas entre simulações iniciadas com campos de velocidade diferentes num domínio Cartesiano e o alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação principais, relevante para a transferência de energia, nunca foi influenciado pela não-ortogonalidade da malha. Por isso, concluímos que era possível utilizar malhas não-ortogonais com os métodos da simulação numérica directa e das grandes escalas da turbulência.

Por último, simulámos o escoamento sobre o monte de Askervein, para verificar as capacidades do programa na simulação de escoamentos atmosféricos reais. Os parâmetros que mais influenciaram os resultados, particularmente na esteira do monte, foram a resolução da malha e o tempo de desenvolvimento (tempo simulado antes do cálculo das estatísticas). O aumento da resolução da malha no plano horizontal acentuava os valores extremos das tensões de Reynolds, enquanto a influência do tempo de desenvolvimento era maior próximo de uma zona de recirculação junto ao solo, devido à menor velocidade. A modelação do escoamento próximo do solo foi deficiente; cremos que este aspecto poderá ser melhorado utilizando um modelo de tensões residuais mais preciso do que o modelo de Smagorinsky.

Abstract

The main purpose of this work was the development of a computer program for flow simulation on complex geometries based on the large eddy simulation (LES) method and on a generic coordinate system. The work plan carried out included the simulation of several flows, in which two methods of turbulence modelling were compared, the effect of fluid stratification was studied and the effect of the use of a generic coordinate system was analysed.

Using a Cartesian grid, a comparison was established between results obtained with the large eddy simulation method and the Smagorinsky model and the ones reached with the Reynolds averaged Navier-Stokes (RaNS) method and the $k-\varepsilon$ model in the simulation of the flow around a square cylinder, with Reynolds number $Re = 21400$. In case of the $k-\varepsilon$ model, apart from the original model, three variants were used, to try to eliminate the excessive production of turbulence kinetic energy close to the front face of the square cylinder predicted by the original model. As for the results obtained with the Reynolds averaged method, the ones from the large eddy simulation method predicted with higher accuracy the drag coefficient, the recirculation zone length and the Reynolds stresses. However, some deficiencies were reported in the prediction of the longitudinal velocity component next to the horizontal faces of the square cylinder and an excessive velocity recovery in the wake, which we think might be due to insufficient grid resolution.

Using a non-orthogonal mesh, we have also simulated the two-dimensional, laminar and stably stratified flow around a circular cylinder, with Reynolds numbers (Re) between 20 and 500 and internal Froude numbers (Fi) equal or above four. The purpose was the assessment of the effect of stratification on some velocity profiles and on parameters such as the Strouhal number (St) or the drag and lift coefficients (C_d and C_l). The stratification effect was only reported on the internal Froude numbers below 100. In such cases, the stratification increase always caused the reduction of the Strouhal number and of the drag and lift coefficients oscillations of the flows that occurred in periodic regime. The temporal evolutions of the stagnation and detachment angles (θ_s and θ_d) were little affected by the stratification, like the average length of the recirculation zone that never changed more than 5%. However, the maximum negative velocity was reduced as much as 36% in the case of the flow with $Re = 500$.

The effect of the non-orthogonality of the grid was studied using the direct numerical simulation (DNS) of the decay of isotropic turbulence (with $Re_\lambda \approx 40$) in regularly spaced grids with 64^3 and 128^3 nodes; the physical domains were shaped as periodic straight parallelepipeds with only two faces non parallel to one of the Cartesian planes. The simulations were started with velocity fields with the same energy and correlation spectra; nevertheless, due to the way the derivatives were calculated in the non-orthogonal grids, the statistical distributions of some components of the vorticity and the rate of strain tensor were different. However, about half of the eddy turnover time the differences were not greater than the ones registered between simulations started with different velocity fields in a Cartesian domain and the alignment between the vorticity and the principal rates of strain, relevant to the energy transfer, was never influenced by the non-orthogonality of the grid. Because of that, we concluded that it was possible to use non-orthogonal grids with the methods of direct numerical simulation and of large eddy simulation.

Finally, we have simulated the flow over Askervein hill, to check the program abilities in the simulation of real atmospheric flows. The main parameters to influence results, particularly on the wake of the hill, were the grid resolution and the development time (time simulated before the statistics calculation). The higher grid resolution on the horizontal plane accentuated the extreme values of Reynolds stresses, while the influence of the development time was greater close to a recirculation zone near the ground, due to the lower velocity. The flow modelling close to the ground was deficient; we believe that this aspect can be improved by using a residual stress model more accurate than the Smagorinsky model.

Résumé

L'objectif principal de ce travail a été de développer un programme d'ordinateur pour la simulation d'écoulements en géométries complexes, basé sur la méthode de la simulation des grandes échelles de la turbulence (LES — *Large Eddy Simulation*) et dans un système de coordonnées générique. Le programme de travail mené à bien comprend la simulation de plusieurs écoulements, dans lesquels nous avons comparé deux méthodes de modélisation de la turbulence, avons étudié l'effet de la stratification du fluide et avons analysé l'effet de l'utilisation du système de coordonnées générique.

En utilisant un maillage Cartésien, nous avons comparé les résultats obtenus avec la méthode des grandes échelles de la turbulence et le modèle de Smagorinsky et ceux obtenus avec la méthode des moyennes de Reynolds (RaNS — *Reynolds averaged Navier-Stokes*) et le modèle $k-\varepsilon$ dans la simulation de l'écoulement autour d'un prisme quadrangulaire, avec nombre de Reynolds $Re = 21400$. Pour ce qui est du modèle $k-\varepsilon$, nous avons utilisé, outre le modèle original, trois variantes, pour essayer d'éliminer la production excessive d'énergie cinétique de la turbulence tout contre la face frontale du prisme prévue par le modèle original. En comparaison avec les résultats obtenus avec la méthode des moyennes de Reynolds, ceux de la méthode des grandes échelles de la turbulence ont prévu plus exactement le coefficient de traînée, la longueur de la zone de recirculation et les tensions de Reynolds. Néanmoins, nous avons vérifié quelques insuffisances dans la prévision de la composante longitudinale de la vitesse tout contre les faces horizontales du prisme et une récupération excessive de la vitesse dans le sillage, que nous pensons être dues à une insuffisante résolution du maillage.

En utilisant un maillage non-orthogonal, nous avons également simulé l'écoulement bidimensionnel, laminaire et stablement stratifié autour d'un cylindre, avec des nombres de Reynolds entre 20 et 500 et des nombres de Froude interne (F_i) égaux ou supérieurs à quatre. L'objectif a été d'évaluer l'effet de la stratification sur certains profils de la vitesse et sur des paramètres tels que le nombre de Strouhal (St) ou sur les coefficients de traînée et de portance (C_d et C_l). L'effet de la stratification n'est apparu que pour des nombres de Froude interne inférieurs à 100. Dans ces cas, l'augmentation de la stratification a toujours provoqué la diminution du nombre de Strouhal et des oscillations des coefficients de traînée et de portance des écoulements qui survenaient en régime périodique. Les évolutions temporelles des angles de stagnation et de séparation (θ_s et θ_d) ont été peu

affectées par la stratification, tout comme la longueur moyenne de la zone de recirculation, qui ne s'est jamais modifiée de plus de 5%. Cependant, la vitesse négative maximale en est venue à se réduire de 36% pour le cas de l'écoulement avec $Re = 500$.

L'effet de la non-orthogonalité du maillage a été étudié au moyen de la simulation numérique directe (DNS — *Direct Numerical Simulation*) du décroissement de la turbulence isotropique (avec $Re_\lambda \approx 40$) dans des maillages régulièrement espacés avec 64^3 et 128^3 nœuds; les domaines physiques avaient la forme de parallélépipèdes droits périodiques, avec juste deux faces non parallèles à l'un des plans Cartésiens. Les simulations ont commencé avec des champs de vitesse avec le même spectre d'énergie et de corrélations; néanmoins, du fait dont les dérivées dans les maillages non-orthogonaux étaient calculées, les distributions statistiques de certaines composantes de la vorticit  et du tenseur des taxes de d formation  taient diff rentes. Cependant, apr s la moiti  environ du *eddy turnover time*, les diff rences n' taient pas plus importantes que celles constat es entre simulations commenc es avec des champs de vitesse diff rents dans un domaine Cart sien et l'alignement de la vorticit  sur les taxes de d formation principales, significatif pour le transfert d' nergie, n'a jamais  t  influenc  par la non-orthogonalit  du maillage. Ce pourquoi nous avons conclu qu'il  tait possible d'utiliser des maillages non-orthogonaux avec les m thodes de simulation num rique directe et des grandes  chelles de la turbulence.

Pour terminer, nous avons simul  l' coulement sur le mont Askervein pour tester les capacit s du programme lors de la simulation d' coulements atmosph riques r els. Les param tres qui ont le plus influenc  les r sultats, en particulier dans le sillage du mont, ont  t  la r solution du maillage et le temps de d veloppement (temps simul  avant le calcul des statistiques). L'augmentation de la r solution du maillage sur le plan horizontal accentuait les valeurs extr mes des tensions de Reynolds, tandis que l'influence du temps de d veloppement se faisait sentir plus   proximit  d'une zone de recirculation pr s du sol, du fait d'une moindre vitesse. La mod lisation de l' coulement pr s du sol s'est r v l e d ficient; nous pensons que cet aspect pourra  tre am lior  par l'utilisation d'un mod le de tensions r siduelles plus pr cis que le mod le de Smagorinsky.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Doutor José Manuel Laginha Mestre da Palma a confiança que depositou em mim, propondo-me este trabalho, e a disponibilidade que sempre manifestou na sua orientação. Agradeço também ao Fernando Aristides Castro, amigo e colega, todas as sugestões que dele recebi. Aos outros amigos e colegas que me incentivaram, e que não necessito de nomear, mostro também a minha gratidão.

A todos os que partilham com a comunidade tempo e conhecimentos, participando no desenvolvimento do Linux, do gcc, do XEmacs, do Ispell, do T_EX e do L^AT_EX, deixo um muito obrigado pelo quanto facilitaram a minha actividade.

Por último, agradeço à Fundação para a Ciência e a Tecnologia o apoio inestimável que me proporcionou, concedendo a bolsa PRAXIS XXI/BD/3990/94, e que financiou este trabalho no quadro do projecto PRAXIS XXI/EMG/1967/95.

*Aos meus pais,
por tudo aquilo que fazem por mim.*

Índice

Resumo	i
Abstract	iii
Résumé	v
Agradecimentos	vii
Nomenclatura	xxiii
1 Introdução	1
1.1 Papel da Simulação Numérica no Estudo da Mecânica de Fluidos	1
1.2 Métodos para a Simulação de Escoamentos	2
1.3 Conteúdo da Tese	4
2 Modelos Matemáticos e Técnicas Numéricas	7
2.1 Introdução	7
2.2 Equações Fundamentais e Modelação da Turbulência	8
2.2.1 Método das Médias de Reynolds (RaNS)	10
2.2.2 Método da Simulação das Grandes Escalas da Turbulência (LES) .	13
2.3 Discretização Temporal	18
2.3.1 Comparação dos Métodos de Discretização Temporal	19
2.4 Discretização Espacial	21
2.4.1 Equação de Transporte Genérica	21
2.4.2 Discretização das Equações de Continuidade e de Navier-Stokes . .	26
2.5 Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes	29
2.5.1 Algoritmo SIMPLE	30
2.5.2 Algoritmo Semi-Implícito	32
2.6 Resolução de Sistemas de Equações Lineares	34
2.6.1 Comparação de Algoritmos de Resolução de Sistemas de Equações Lineares	34
3 Escoamento em Torno de um Prisma de Secção Quadrada	37
3.1 Introdução	38

3.2	Métodos	39
3.2.1	Modelos Matemáticos e Algoritmos	39
3.2.2	Métodos Numéricos	40
3.2.3	Domínio de Cálculo	40
3.2.4	Condições de Fronteira	41
3.2.5	Cálculo das Médias de Fase	41
3.3	Resultados e Discussão	42
3.3.1	Perfis da Velocidade Média, Tensões de Reynolds e Periódicas	45
3.3.2	Desprendimento de Vórtices	55
3.3.3	Viscosidade Turbilhonar nas Variantes do Modelo $k-\epsilon$	56
3.4	Conclusões	60
4	Escoamento Estavelmente Estratificado em Torno de um Cilindro	63
4.1	Introdução	63
4.2	Métodos	66
4.2.1	Modelo Matemático e Algoritmo	67
4.2.2	Domínio de Cálculo	67
4.2.3	Condições de Fronteira e Condição Inicial	68
4.2.4	Cálculo das Médias de Fase	71
4.3	Resultados e Discussão	71
4.3.1	Escoamento Sem Estratificação	71
4.3.2	Escoamento Estratificado	76
4.4	Conclusões	83
5	Dcaimento da Turbulência Isotrópica	89
5.1	Introdução	90
5.2	Modelo Matemático e Algoritmo	91
5.3	Resultados e Discussão	94
5.3.1	Influência da Não-Ortogonalidade da Malha nas Derivadas Discreti- zadas	95
5.3.2	Campos Iniciais	101
5.3.3	Evolução Temporal de Parâmetros Estatísticos	108
5.3.4	Campos Após o Dcaimento	111
5.4	Conclusões	115
6	Escoamento Atmosférico Sobre o Monte de Askervein	117
6.1	Introdução	117
6.2	Métodos	119
6.2.1	Modelo Matemático e Algoritmo	119
6.2.2	Resolução do Sistema de Equações Lineares	120
6.2.3	Domínio de Cálculo	121
6.2.4	Condições de Fronteira e Inicial	124
6.2.5	Condição de Entrada Variável	125

6.3	Resultados e Discussão	126
6.3.1	Ponto RS	128
6.3.2	Linha A	132
6.3.3	Linha AA	141
6.3.4	Linha B	143
6.3.5	Ponto HT	145
6.3.6	Ponto CP'	149
6.4	Conclusões	152
7	Conclusões e Trabalho Futuro	155
7.1	Conclusões	155
7.2	Trabalho Futuro	157

Lista de Figuras

2.1	Erro de vários métodos explícitos de discretização temporal, em função do intervalo de tempo.	20
2.2	Volume de controlo bidimensional típico e notação usada para designar as suas faces e os volumes de controlo vizinhos.	21
3.1	Evolução temporal dos coeficientes de arrasto e de sustentação de duas simulações realizadas com o modelo $k-\varepsilon$, a definição de P_ε proposta por Leschziner and Rodi (1981) e esquemas distintos de interpolação da velocidade nas faces.	43
3.2	Campo de velocidade média e linha de separação média previstos pela simulação LES4.	45
3.3	Perfis da velocidade média, das tensões de Reynolds e das tensões periódicas, na secção $y = 0$	46
3.4	Perfis da velocidade média e das tensões de Reynolds, obtidos das simulações com o método das médias de Reynolds, em três secções verticais.	50
3.5	Perfis das tensões periódicas, obtidos das simulações com o método das médias de Reynolds, em três secções verticais.	51
3.6	Perfis da velocidade média e das tensões de Reynolds, obtidos das simulações com o método das grandes escalas da turbulência, em três secções verticais.	53
3.7	Perfis das tensões periódicas, obtidos das simulações com o método das grandes escalas da turbulência, em três secções verticais.	54
3.8	Variação da coordenada longitudinal dos extremos de vorticidade (x_p) com o tempo e trajectória ($y_p = f(x_p)$) nas simulações realizadas com o método das médias de Reynolds.	57
3.9	Variação da coordenada longitudinal dos extremos de vorticidade (x_p) com o tempo e trajectória ($y_p = f(x_p)$) nas simulações realizadas com o método das grandes escalas da turbulência.	58
3.10	Comparação dos campos de viscosidade turbilhonar média ($\bar{\nu}_t$) obtidos com as diversas variantes do modelo $k-\varepsilon$	59
4.1	Sistema físico do escoamento estavelmente estratificado em torno de um cilindro.	66
4.2	Volumes de controlo da malha utilizada.	68
4.3	Localização das zonas de amortecimento e suas dimensões.	70

4.4	Componente longitudinal da velocidade média, na secção $y = 0$, nos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$).	74
4.5	Coefficiente de fricção médio e r.m.s., na superfície do cilindro, nos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$).	75
4.6	Evolução temporal do ângulo de descolamento nas simulações dos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$) com $Re = 200$ e 500 .	75
4.7	Coefficiente de pressão médio e r.m.s., na superfície do cilindro, nos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$).	76
4.8	Coefficiente de fricção médio e r.m.s., na superfície do cilindro, nos escoamentos com $Re = 100$ e estratificação.	78
4.9	Coefficiente de pressão médio e r.m.s., na superfície do cilindro, nos escoamentos com $Re = 500$ e estratificação.	79
4.10	Perfis da componente longitudinal da velocidade média, na secção $y = 0$, nos escoamentos estratificados com $Re = 20, 50, 100, 200$ e 500 .	80
4.11	Perfis das tensões periódicas normais, na secção $y = 0$, nos escoamentos estratificados com $Re = 100$ e 500 .	81
4.12	Perfis da velocidade média e da perturbação média da massa específica, em três secções verticias, nos escoamentos estratificados com $Re = 500$.	82
4.13	Linhas de iso-vorticidade na fase 1 dos escoamentos com $Re = 200$ e $F_i = 100, 10, 5$, e 4 .	84
4.14	Linhas de iso-vorticidade na fase 1 dos escoamentos com $Re = 50$ e $F_i = 100, 10, 5$, e 4 .	85
4.15	Campo da massa específica na fase 1 dos escoamentos com $Re = 200$ e $F_i = 100, 10, 5$ e 4 .	86
5.1	Domínios físicos com ângulos de 0 e 30° entre as direcções z e ζ .	92
5.2	Representação esquemática da distorção da malha no plano xz .	93
5.3	Quociente Q_2 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão, e da derivada exacta, na malha ortogonal ($\alpha = 0^\circ$), em função da componente k_z^* do vector número de onda.	98
5.4	Quociente Q_2 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão, e da derivada exacta, para $\alpha = 15, 30$ e 45° , em função das componentes k_x^* e k_z^* do vector número de onda.	99
5.5	Quociente Q_4 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão, e da derivada exacta, na malha ortogonal ($\alpha = 0^\circ$), em função da componente k_z^* do vector número de onda.	101
5.6	Quociente Q_4 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão, e da derivada exacta, para $\alpha = 15, 30$ e 45° , em função das componentes k_x^* e k_z^* do vector número de onda.	102

5.7	Funções densidade de probabilidade normalizadas da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s.	105
5.8	Funções densidade de probabilidade normalizadas das derivadas longitudinal e lateral da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s.	106
5.9	Funções densidade de probabilidade normalizadas da vorticidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s.	106
5.10	Funções densidade de probabilidade normalizadas das derivadas longitudinal e lateral da velocidade (calculadas nas malhas com 128^3 nós), no instante $t = 0$ s.	107
5.11	Funções densidade de probabilidade normalizadas da vorticidade (calculadas nas malhas com 128^3 nós), no instante $t = 0$ s.	107
5.12	Espectro da dissipação (calculado na malha com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s.	108
5.13	Funções densidade de probabilidade dos ângulos entre a vorticidade e as taxas de deformação principais (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s.	109
5.14	Evolução temporal da energia cinética da turbulência nas simulações com a malha com 64^3 nós.	110
5.15	Evolução temporal do coeficiente de simetria da derivada longitudinal da velocidade nas simulações com a malha com 64^3 nós.	110
5.16	Evolução temporal do coeficiente de achatamento da derivada longitudinal e lateral da velocidade nas simulações com a malha com 64^3 nós.	111
5.17	Funções densidade de probabilidade normalizadas da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s.	113
5.18	Funções densidade de probabilidade normalizadas da pressão (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s.	113
5.19	Funções densidade de probabilidade normalizadas das derivadas longitudinal e lateral da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s.	114
5.20	Funções densidade de probabilidade normalizadas da vorticidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s.	114
5.21	Funções densidade de probabilidade dos ângulos entre a vorticidade e as taxas de deformação principais (calculadas na malha com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s.	115
6.1	Curvas de nível do monte de Askervein.	122
6.2	Evolução temporal da velocidade de fricção no escoamento sobre uma placa plana.	126
6.3	Espectros da componente u da velocidade nas simulações A4 e B4 (calculado entre $t=5000$ e 20000 s), no ponto CP, no nó adjacente ao solo.	127

6.4	Perfis da componente horizontal da velocidade média e das tensões de Reynolds, no local de referência (ponto RS), obtidos de simulações com malhas diferentes.	130
6.5	Perfis das tensões normais de Reynolds, no local de referência (ponto RS), obtidos de simulações com condições de fronteira na secção de entrada diferentes.	131
6.6	Perfis das tensões de Reynolds, resolvidas e totais, no local de referência (ponto RS), obtidos na simulação E.	132
6.7	Perfis da topografia, da componente longitudinal da velocidade média, do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente e da componente vertical da velocidade média, ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.	133
6.8	Perfis da topografia, das tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$ e $\overline{w'w'}$, ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.	135
6.9	Perfis da topografia e da tensão de Reynolds $\overline{u'u'}$, ao longo da linha A, obtidos de simulações com a malha B e tempos de desenvolvimento diferentes.	136
6.10	Perfis da topografia e da tensão de Reynolds total $\overline{w'w'} + \tau_{33}^E$, ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.	138
6.11	Perfis da topografia e da tensão de Reynolds $\overline{u'w'}$, ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.	139
6.12	Perfis da topografia e das tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$ e $\overline{w'w'}$, ao longo da linha A, obtidos numa simulação com o modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997) e na simulação D.	140
6.13	Perfis da topografia, da componente longitudinal da velocidade média, do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente e da componente vertical da velocidade média, ao longo da linha AA, obtidos de simulações com malhas diferentes.	142
6.14	Perfis da topografia, das tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$ e $\overline{w'w'}$, ao longo da linha AA, obtidos de simulações com malhas diferentes.	144
6.15	Perfis da topografia e da tensão de Reynolds $\overline{u'w'}$, ao longo da linha AA, obtidos de simulações com malhas diferentes.	145
6.16	Perfis da topografia e da componente longitudinal da velocidade média, ao longo da linha B, obtidos de simulações com malhas diferentes.	146
6.17	Perfis do <i>speedup</i> , da componente vertical da velocidade média e das tensões de Reynolds, no local mais alto do monte (ponto HT), obtidos de simulações com malhas diferentes.	147
6.18	Perfis das tensões de Reynolds, resolvidas e totais, no local mais alto do monte (ponto HT), obtidos na simulação E.	148
6.19	Perfis do <i>speedup</i> , no local mais alto do monte (ponto HT), obtidos numa simulação com o modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997) e na simulação D.	150

6.20 Perfis do <i>speedup</i> , do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente, da componente vertical da velocidade média e das tensões de Reynolds, no centro do monte (ponto CP'), obtidos de simulações com malhas diferentes.	151
---	-----

Lista de Tabelas

2.1	Tempo de execução e memória utilizada pelos programas de teste dos algoritmos de resolução de sistemas de equações.	36
3.1	Características das simulações realizadas.	43
3.2	Parâmetros integrais obtidos nas simulações e em alguns trabalhos experimentais: número de Strouhal (St), coeficiente de arrasto médio e r.m.s. ($\overline{C_d}$ e $C_{d_{rms}}$), coeficiente de sustentação r.m.s. ($C_{l_{rms}}$) e comprimento médio da zona de recirculação ($\overline{\ell_r}$).	44
3.3	Valores máximos da velocidade negativa, das tensões de Reynolds e das tensões periódicas, na secção $y = 0$, previstos pelas simulações e medidos por Lyn et al. (1995).	47
3.4	Velocidades dos vórtices previstas pelas simulações e medidas por Lyn et al. (1995).	56
4.1	Intervalos de tempo e coeficientes de sub-relaxação da pressão usados, em função do número de Reynolds do escoamento.	67
4.2	Parâmetros globais dos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$): número de Strouhal (St), coeficiente de arrasto médio e r.m.s. ($\overline{C_d}$ e $C_{d_{rms}}$), coeficiente de sustentação r.m.s. ($C_{l_{rms}}$), ângulo de estagnação r.m.s. ($\theta_{s_{rms}}$), ângulo de separação médio e r.m.s. ($\overline{\theta_d}$ e $\theta_{d_{rms}}$) e comprimento da zona de recirculação ($\overline{\ell_r}$).	73
4.3	Parâmetros globais obtidos nas simulações de Persillon and Braza (1998), do escoamento bidimensional sem estratificação.	73
4.4	Parâmetros globais dos escoamentos estratificados: número de Strouhal (St), coeficiente de arrasto médio e r.m.s. ($\overline{C_d}$ e $C_{d_{rms}}$), coeficiente de sustentação r.m.s. ($C_{l_{rms}}$), ângulo de estagnação r.m.s. ($\theta_{s_{rms}}$), ângulo de separação médio e r.m.s. ($\overline{\theta_d}$ e $\theta_{d_{rms}}$) e comprimento da zona de recirculação ($\overline{\ell_r}$).	77
5.1	Medidas da isotropia dos campos no instante $t = 0$ s.	103
5.2	Medidas da isotropia dos campos no instante $t = 0.8$ s.	112

-
- 6.1 Características das simulações realizadas: número de nós da malha, espaçamento mínimo na direcção vertical, medido na zona do domínio em que o terreno é uniforme ($\Delta z_{\min}$), factores de expansão em cada uma das direcções Cartesianas (f_x , f_y e f_z), intervalo de tempo (Δt), tempo de desenvolvimento ($t_{\text{desenv.}}$) e tipo de condição de fronteira considerada na secção de entrada. . 124

Nomenclatura

Caracteres Romanos

A	coeficiente das equações algébricas do método SIMPLE
A	matriz dos coeficientes de um sistema de equações algébricas
A^+	constante da função de amortecimento de van Driest
B^{ij}	variável auxiliar usada no cálculo dos fluxos difusivos quando se utiliza um sistema de coordenadas genérico
c	velocidade média
C_1	constante usada para estimar a energia do campo residual
C_d	coeficiente de arrasto
C_f	coeficiente de fricção
C_K	constante de Kolmogorov
C_l	coeficiente de sustentação
C_p	coeficiente de pressão
C_S	constante de Smagorinsky
$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_\mu$	constantes do modelo $k-\varepsilon$
$C'_{\varepsilon 1}, C''_{\varepsilon 1}$	constantes do modelo $k-\varepsilon$ alterado por Leschziner and Rodi (1981)
D	comprimento da aresta de um quadrado; diâmetro; dissipação da energia cinética da turbulência
E	energia cinética da turbulência
e_1, e_2, e_3, e_i	direcções principais das taxas de deformação (vectores próprios do tensor das taxas de deformação)

F	coeficiente de achatamento
f	frequência; função genérica
F^c	fluxo convectivo
F^d	fluxo difusivo
F_i	número de Froude interno
f_x, f_y, f_z	factores de expansão da malha em cada uma das direcções Cartesianas
G	função filtro
g	módulo do vector aceleração da gravidade
$\mathbf{g}$	vector aceleração da gravidade
g_1, g_2, g_3, g_4	coeficientes utilizados no esquema QUICK
g_i	componentes do vector aceleração da gravidade num referencial Cartesiano
H	altura
H_i	soma dos termos convectivos e difusivos na equação de transporte de quantidade de movimento
i, j, k, i_i	vectores coordenados num referencial Cartesiano
J	determinante Jacobiano
K	razão entre a velocidade máxima de propagação das ondas gravíticas e a do escoamento incidente num canal de profundidade finita
k	energia cinética da turbulência; número de onda
$\mathbf{k}$	vector número de onda
k_c	frequência de corte
k_i	componentes do vector número de onda
$k_{\max}$	número da onda de maior frequência passível de se propagar numa malha com espaçamento Δ
k_p	número de onda para o qual é máxima a energia cinética da turbulência
k_r	energia do campo residual
k_x, k_y, k_z	componentes do vector número de onda

k_x^*, k_y^*, k_z^*	componentes do vector número de onda adimensionalizado por $k_{\max}$
$\mathcal{L}$	matriz triangular inferior
ℓ	comprimento
ℓ_0	comprimento característico das escalas residuais no interior do escoamento (usado por Mason and Thomson, 1992)
L_{ij}	componentes de um tensor resolvido utilizado por alguns modelos de tensões residuais
ℓ_r	comprimento de uma zona de recirculação
ℓ_s	comprimento característico das escalas residuais no modelo de Smagorinsky
M	variável auxiliar usada no cálculo da tensão numa superfície sólida
$\mathcal{M}$	matriz de iteração
$\dot{m}$	caudal mássico
$\dot{m}'$	correção do caudal mássico
N	dimensão do sistema de equações diferenciais ordinárias; frequência de Brunt-Väisälä; número de nós da malha numa direcção
$\mathcal{N}$	matriz utilizada nos métodos iterativos de resolução de sistemas de equações lineares
n	coordenada local, medida sobre um eixo normal a uma dada superfície
$\mathbf{n}$	vector normal a uma dada superfície
N_{xyz}	número total de nós da malha
n^+	distância adimensional a uma superfície sólida
p	pressão
p'	correção da pressão
$\mathbf{p}'$	vector da correção da pressão em todos os pontos do domínio
P_k	taxa de produção de energia cinética da turbulência
P_ϵ	taxa de produção de dissipação da energia cinética da turbulência
Q	quociente entre modos de Fourier das derivadas discretizadas e das derivadas exactas; taxa de produção ou destruição de uma variável integrada num volume de controlo

Q	vector da taxa de produção ou destruição de uma variável integrada num volume de controlo em todos os pontos do domínio
q	taxa de produção ou destruição de uma variável
Q_2	quociente entre modos de Fourier das derivadas discretizadas por diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão e das derivadas exactas
Q_4	quociente entre modos de Fourier das derivadas discretizadas por diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão e das derivadas exactas
Q_i^g	componente da força de impulsão integrada num volume de controlo
Q_i^p	componente da força resultante do gradiente de pressão integrada num volume de controlo
R	termo que representa o amortecimento de Rayleigh
Re	número de Reynolds
Re_λ	número de Reynolds baseado na microescala de Taylor
S	coeficiente de simetria; superfície; superfície de controlo; variável auxiliar usada no modelo $k-\varepsilon$
ΔS	<i>speedup</i>
S	vector superfície
S	tensor das taxas de deformação
S_i	componentes do vector superfície
S_{ij}	componentes do tensor das taxas de deformação
S_{ns}	taxa de deformação na direcção da linha de corrente
Sc	número de Schmidt
St	número de Strouhal
t	tempo
$t_{\text{desenv.}}$	tempo simulado antes do cálculo das estatísticas
U	velocidade de um escoamento uniforme
U	matriz triangular superior de diagonal unitária
u, v, w, u_i	componentes do vector velocidade num referencial Cartesiano

U_{p1}, U_{p2}	velocidades dos extremos de vorticidade
u', v', w', u'_i	correção das componentes do vector velocidade
u^*	velocidade de fricção
V	volume; volume de controlo
$\mathbf{v}$	vector velocidade
$\mathbf{v}_t$	vector velocidade tangencial a uma superfície
$\mathbf{x}, \mathbf{x}'$	vector de posição
x, y, z, x_i	coordenadas num referencial Cartesiano
x_p, y_p	coordenadas dos extremos de vorticidade
z'	distância a uma superfície, medida na vertical
z_0	comprimento característico da rugosidade de uma superfície

Caracteres Gregos

α	ângulo; coeficiente de difusão da massa específica; intensidade do amortecimento
α_p	coeficiente de sub-relaxação da pressão
β	matriz de mudança de coordenadas
β^{ij}	componentes da matriz de mudança de coordenadas
Γ	coeficiente de difusão
Δ	comprimento característico da malha
δ	vector correção
δ_{ij}	tensor de Kronecker
ε	taxa de dissipação da energia cinética da turbulência
θ	ângulo entre o vector velocidade e o eixo dos xx
θ_d	ângulo de descolamento
θ_i	ângulo entre o vector vorticidade e a direcção principal das taxas de deformação representada pelo vector $\mathbf{e}_i$

θ_s	ângulo de estagnação
κ	constante de von Kármán
λ	coeficiente de interpolação linear; comprimento de onda; microescala de Taylor
$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$	taxas de deformação principais (valores próprios do tensor das taxas de deformação)
μ	viscosidade molecular dinâmica
μ_r	viscosidade residual dinâmica
μ_t	viscosidade turbilhonar dinâmica
ν	viscosidade molecular cinemática
ν_t	viscosidade turbilhonar cinemática
ξ, η, ζ, ξ_i	coordenadas num sistema de coordenadas genérico
ρ	massa específica
$\boldsymbol{\rho}$	vector resíduo
ρ_0	massa específica de referência
ρ_{hid}	massa específica num estado de equilíbrio hidrostático
ρ'	perturbação da massa específica relativamente ao estado de equilíbrio hidrostático
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	constantes do modelo $k-\varepsilon$
τ_{ij}	componentes do tensor das tensões viscosas
τ_{ij}^r	componentes do tensor das tensões residuais
τ_{wall}	tensão numa superfície sólida
$\boldsymbol{\tau}_{\text{wall}}$	vector tensão numa superfície sólida
ϕ	variável genérica
$\Delta\phi$	ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente
Ω	variável auxiliar usada no modelo $k-\varepsilon$
ω	módulo do vector vorticidade
$\boldsymbol{\omega}$	vector vorticidade

$\omega_x, \omega_y, \omega_z, \omega_i$ componentes do vector vorticidade

Índices e Expoentes

*	referente a um campo de velocidade que não satisfaz a equação da continuidade
P, E, W, etc.	referentes ao centro de um volume de controlo
e, w, etc.	referentes a uma face de um volume de controlo
m	iteração
max	máximo
min	mínimo
n	instante de tempo
rms	<i>root mean square</i>
x, y, z	referente a uma das direcções Cartesianas
u, v, w	referente a uma componente do vector velocidade
ϕ	referente à variável genérica ϕ
ρ	referente à massa específica do fluido em questão

Operadores

$(\overline{\quad})$	filtragem espacial; interpolação espacial; média temporal
$(\widehat{\quad})$	filtragem espacial adicional utilizada por alguns modelos de tensões residuais
$(\widetilde{\quad})$	componente periódica; quantidade dimensional
$(\quad)'$	perturbação
$\langle (\quad) \rangle$	média de fase
$\Delta(\quad)$	diferença
$\delta(\quad)/\delta(\quad)$	derivada discretizada
$\nabla(\quad)$	gradiente

$\nabla^2()$ Laplaciano

Abreviaturas

Bi-CGSTAB	<i>BiConjugate Gradient Stabilized</i>
CDS	<i>central differencing scheme</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
GMRES	<i>Generalized Minimal Residual</i>
ILU(0)	<i>Incomplete LU factorization with zero fill in</i>
ILUT	<i>Incomplete LU factorization Threshold</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
QMR	<i>Quasi-Minimal Residual</i>
QUICK	<i>Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics</i>
RaNS	<i>Reynolds averaged Navier-Stokes</i>
r.m.s.	<i>root mean square</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
SIP	<i>Strongly Implicit Procedure</i>
SOR	<i>Successive Over-Relaxation</i>
TDMA	<i>TriDiagonal Matrix Alghoritm</i>
UDS	<i>upwind differencing scheme</i>

Capítulo 1

Introdução

1.1 Papel da Simulação Numérica no Estudo da Mecânica de Fluidos

Tradicionalmente existiam apenas duas abordagens para o estudo da Mecânica de Fluidos: a teórica e a experimental. O maior obstáculo da abordagem teórica é apenas ser possível, no estágio actual do conhecimento, resolver as equações de Navier-Stokes para escoamentos relativamente simples, de aplicação prática reduzida. Assim, a contribuição desta abordagem tem-se limitado à identificação dos parâmetros relevantes no estudo dos escoamentos e à previsão de algumas relações entre eles, a partir da análise dimensional ou das soluções que se logram alcançar para as equações de Navier-Stokes. Para estudos mais detalhados de um escoamento, o único meio era efectuar medições no escoamento real ou num modelo em laboratório.

Com o aparecimento dos computadores surgiu uma terceira alternativa para o estudo da Mecânica de Fluidos: a simulação numérica. À primeira vista, esta abordagem poderia concorrer com a experimentação, relativamente à qual apresenta vantagens como, por exemplo, a maior facilidade na reprodução das condições do escoamento real e a inexistência de qualquer perturbação do escoamento pelo equipamento de medição. Além disso, como a razão desempenho/custo dos computadores não tem parado de crescer (e.g., Stadtherr, 1998), a simulação numérica é cada vez mais atractiva. De facto, a evolução tem sido tão grande que, enquanto os primeiros computadores construídos efectuavam apenas algumas operações por segundo, em breve poderemos ter na nossa mesa de trabalho uma máquina capaz de efectuar um gigaflop (10^9 operações em vírgula flutuante por segundo) por processador. A capacidade de armazenamento de dados também tem crescido rapidamente e a quantidade de memória e de armazenamento em disco que podemos ter hoje é idêntica à dos super-computadores de há uma década atrás.

No entanto, os resultados de uma simulação numérica só podem considerar-se credíveis

se existir previamente uma *verificação* do código que os produziu e uma *validação* desses mesmos resultados. O objectivo da *verificação* é eliminar os *erros numéricos* e determinar se o código produz a solução das equações contínuas quando o espaçamento da malha diminui. As razões para que tal não aconteça são, além dos erros de programação, as aproximações efectuadas no processo de discretização revelarem-se incorrectas e o facto de geralmente se usar um processo iterativo para resolver as equações discretizadas, que permite obter a solução exacta apenas se for executado durante um tempo muito longo. O objectivo da *validação* é determinar se existe algum *erro de modelação*, ou seja, se as aproximações e idealizações efectuadas são válidas e, consequentemente, as soluções obtidas têm alguma relação com o problema físico. Uma definição proposta por Roache (1998) é de que a *verificação* consiste em determinar se as equações foram resolvidas correctamente e a *validação*, em determinar se foram resolvidas as equações correctas. Num significado mais restrito, um código pode ser verificado, mas apenas um conjunto de cálculos realizados por ele podem ser validados. Na validação, é necessário dispor de resultados experimentais ou de resultados numéricos já validados, para que se possa averiguar a concordância com os resultados das simulações. Em síntese: a simulação numérica está dependente da experimentação e não a substituirá totalmente.

Na verdade, a simulação numérica e a experimentação complementam-se. As experiências são um meio eficiente de medir parâmetros globais, como o arrasto ou a sustentação. Todavia, o desenvolvimento tecnológico e a optimização dos desenhos que lhe está associada requerem conhecimentos que muitas vezes não estão disponíveis na base de dados de experiências já realizadas. Obtê-los realizando novas experiências pode ser muito caro ou muito demorado. Nesses casos, a simulação numérica pode ser capaz de fornecer a resposta adequada. Por isso, é comum utilizar a simulação numérica para estabelecer um desenho, durante a fase inicial de desenvolvimento de um produto, e um modelo para efectuar a optimização, na fase final.

Além destas contribuições no âmbito da engenharia, as simulações são capazes de fornecer dados que não podem ser obtidos nas experiências destinadas a um estudo mais fundamental dos escoamentos. Por exemplo, o alinhamento da vorticidade com as direcções principais das taxas de deformação foi descoberto por Kerr (1985) através de simulações.

1.2 Métodos para a Simulação de Escoamentos

Como as equações que governam os escoamentos são conhecidas (a equação da continuidade e as equações de Navier-Stokes), à primeira vista seria sempre possível efectuar uma simulação e obter uma solução com a precisão pretendida, utilizando o método designado por *simulação numérica directa* (DNS — *Direct Numerical Simulation*). No entanto, se os escoamentos forem turbulentos, que é o caso da maior parte dos com interesse para aplicações no domínio da engenharia (Moin and Kim, 1997), a gama de escalas de comprimento e de tempo que possuem obriga a utilizar recursos computacionais muito elevados.

Tal pode não ser realizável, seja por esses recursos não estarem disponíveis, seja por o custo da sua utilização não ser comportável. Por isso, as contribuições para a engenharia realizadas com este método limitam-se ao estudo do efeito da curvatura e da rotação em escoamentos turbulentos, embora seja de esperar, num futuro próximo, contribuições no estudo de escoamentos no interior de turbo-máquinas, devido à sua complexidade e ao número de Reynolds moderado.

A introdução de modelos que permitam obter resultados importantes para um dado projecto e necessitem de menos recursos computacionais torna-se uma necessidade. São possíveis duas abordagens: uma, usar o método das médias de Reynolds (RaNS — *Reynolds averaged Navier-Stokes*) e um modelo de turbulência ou, outra, o método das grandes escalas da turbulência (LES — *Large Eddy Simulation*) e um modelo de tensões residuais.

A maior parte das aplicações de engenharia usa o método das médias de Reynolds e um modelo de turbulência. Actualmente, o modelo $k-\varepsilon$ é o de utilização mais frequente, embora os modelos das tensões de Reynolds sejam considerados mais precisos (Rabbitt, 1997). Tal acontece porque os modelos das tensões de Reynolds necessitam de uma afinação cuidada das constantes do modelo cada vez que se pretenda simular um novo escoamento e a sua exigência em recursos computacionais faz com que nem sempre sejam competitivos quando comparados com o método das grandes escalas da turbulência, mais robusto e preciso. Além disso, existem variantes do modelo $k-\varepsilon$ (e.g., o modelo não-linear de Speziale, 1987) que permitem obter melhores resultados, sem que os recursos computacionais exigidos sejam significativamente maiores que os do modelo original.

O método das grandes escalas da turbulência pode ser considerado como intermédio entre o método das médias de Reynolds e o da simulação numérica directa, pois simula as escalas maiores da turbulência, que são responsáveis pela maior parte do transporte, de acordo com o que a malha utilizada permitir. Visto a turbulência ser instacionária e quase sempre tridimensional, este método obriga a utilizar um modelo com as mesmas características, logo necessita de mais recursos computacionais que o método das médias de Reynolds. Contudo, não atinge os requisitos do método da simulação numérica directa. A sua vantagem é não necessitar de modelar as escalas maiores, que dependem necessariamente da geometria e para as quais não existe esperança de encontrar um modelo universal. Assim, é necessário apenas um modelo para as escalas mais pequenas, que se espera seja mais simples.

Isso mesmo é confirmado pelo sucesso do modelo de Smagorinsky, que não é capaz de prever a transferência de energia das escalas menores para as maiores e, por isso, numa análise *a priori* mostra uma correlação reduzida entre as tensões reais e as modeladas. Contudo, como é capaz de prever correctamente a transferência de energia das escalas maiores para as menores, geralmente produz resultados correctos para o campo médio e para as correlações de segunda ordem, que são as quantidades mais importantes para a engenharia. Já no caso de alguns escoamentos geofísicos, em que a turbulência é quase bidimensional e a transferência de energia se verifica das escalas menores para as maiores,

o modelo de Smagorinsky prevê um decaimento das perturbações em vez do aumento que se verifica na prática. Neste caso, é necessário utilizar um modelo capaz de prever a transferência de energia das escalas menores para as maiores. Segundo Piomelli (1993), na generalidade dos escoamentos a quantidade de energia transferida das escalas menores para as maiores depende do filtro considerado: é maior no filtro espectral de corte abrupto (*sharp cut-off*), intermédia no filtro de média espacial no interior do volume de controlo e menor no filtro Gaussiano. Deste modo, a sua modelação é mais crítica quando se utiliza um método espectral do que quando se usam diferenças finitas.

O método das grandes escalas da turbulência tornou possível estudar a estrutura da turbulência quando o número de Reynolds não permite usar o método da simulação numérica directa. Por isso, tal como ele tem sido utilizado principalmente no estudo fundamental da turbulência: a sua física, o desenvolvimento de modelos e a avaliação de teorias de fecho (Herring and Metais, 1989; Reynolds, 1989; Kaltenbach et al., 1994). A sua utilização em engenharia tem vindo a aumentar (Piomelli, 1993), aproveitando as áreas de aplicação em que as suas vantagens prevalecem sobre as desvantagens. Um exemplo típico é o estudo de escoamentos turbulentos com rotação, nos quais as tensões de Reynolds não estão alinhadas com as taxas de deformação, como num escoamento de corte simples, o que torna a sua modelação difícil. O desenvolvimento do método das grandes escalas da turbulência também tem permitido simular escoamentos com fenómenos físicos mais complexos, como seja a turbulência compressível (Erlebacher and Hussaini, 1993) ou a combustão (Frankel et al., 1993). Contudo, antes deste método encontrar uma aplicação generalizada são necessárias algumas evoluções: desenvolvimento de programas que utilizem sistemas de coordenadas genéricos, de condições de fronteira para a secção de entrada que incluam a turbulência, de modelos para a região da parede e de modelos de tensões residuais melhores, designadamente na previsão da transferência inversa de energia.

1.3 Conteúdo da Tese

A presente tese divide-se em sete capítulos, incluindo este, de introdução, e o último, em que se contêm as conclusões principais do trabalho desenvolvido e se formulam algumas propostas de trabalho futuro. Pretendeu-se dispor, a final do trabalho, de um programa de computador que usasse o método das grandes escalas da turbulência e um sistema de coordenadas genérico, capaz, por isso, de simular escoamentos em geometrias complexas.

Os capítulos 2 a 6 iniciam-se, cada um, com um pequeno resumo, informativo dos assuntos neles versados, facilitando a tarefa do leitor. Também para facilitar a leitura e porque, com excepção dos métodos numéricos tratados no capítulo 2, a que os capítulos seguintes fazem referência, os assuntos tratados são relativamente independentes, optou-se por efectuar a revisão bibliográfica pertinente em cada capítulo, em vez de a fazer aqui, abordando todos os temas tratados ao longo da tese.

Conforme já referimos, o capítulo 2 descreve os modelos matemáticos e as técnicas numéricas utilizadas. Os métodos numéricos incluem os esquemas de discretização espacial e temporal das equações diferenciais, a transformação para um sistema de coordenadas genérico, os métodos de resolução e ainda os algoritmos para a resolução de sistemas de equações lineares. Apresenta também comparações entre esquemas de discretização temporal explícitos e entre algoritmos para a resolução de sistemas de equações lineares, com o que se pretende justificar as escolhas efectuadas.

Do capítulo 3 é tema o escoamento em torno de um prisma de secção quadrada com $Re = 21400$. Este escoamento é considerado um bom teste para os métodos numéricos, porque inclui diversos fenómenos como separação, recolamento e desprendimento de vórtices, permitindo avaliar a capacidade dos modelos em lidar com todos eles. Além disso, estão disponíveis medições experimentais detalhadas, incluindo uma divisão em 20 fases, em que a referência é um sinal da pressão filtrado. É um escoamento com características diferentes daqueles em que foi calibrado o modelo $k-\varepsilon$, também, por isso, próprio para testar as suas características. A principal diferença é ser um escoamento periódico, enquanto a calibração foi efectuada usando escoamentos estacionários. Além disso, quando se iniciou este trabalho já eram conhecidas as deficiências do modelo $k-\varepsilon$ na modelação da produção de energia cinética da turbulência junto da face frontal, assim como a proposta de Kato and Launder (1993) para tentar remediar este problema. No entanto, também eram conhecidas outras propostas alternativas para melhorar o modelo $k-\varepsilon$ que não tinham ainda sido testadas neste escoamento. Constituiu também uma oportunidade para efectuar os primeiros testes com o modelo das grandes escalas da turbulência e comparar o seu desempenho com o do modelo $k-\varepsilon$, utilizando um sistema de coordenadas Cartesianas, mais simples que o da versão final, e permitiu determinar o esquema de integração temporal a incluir na versão final.

O capítulo 4 versa o escoamento em torno do cilindro. Este escoamento mostra algumas semelhanças com o escoamento em torno do prisma, nomeadamente quanto aos fenómenos que apresenta. No entanto, os números de Reynolds escolhidos correspondem a escoamentos laminares, permitindo evitar os problemas da utilização de modelos de turbulência. A sua simulação serviu como teste para o sistema de coordenadas genérico, que depois foi incorporado no programa da simulação das grandes escalas da turbulência. A simulação de um escoamento simples (bidimensional e laminar) permitiu que nos concentrássemos apenas neste aspecto. No entanto, aproveitámos o ensejo para estudar a influência da estratificação neste escoamento — aspecto relevante para o estudo de escoamentos atmosféricos sobre topografia real. Os dados experimentais disponíveis eram mais reduzidos que no caso do escoamento em torno do prisma de secção quadrada, mas, mesmo assim, permitiram-nos confrontar alguns resultados. A nossa atenção concentrou-se nas alterações promovidas pela estratificação nos perfis de velocidade média, nos coeficientes de fricção e de pressão e no arrasto e na sustentação.

No capítulo 5, abordámos o decaimento da turbulência homogénea, para estudar a influência da utilização de uma malha não-ortogonal com o método da simulação numérica

directa. Escolhemos este assunto dado ser frequente a necessidade de recorrer a malhas não-ortogonais para a simulação de escoamentos e não se conhecer o efeito da sua utilização com métodos que precisam de resolver um conjunto de escalas maior que as que resolve o método das médias de Reynolds. Foi nossa preocupação escolher um escoamento em que pudéssemos concentrar a nossa atenção apenas na influência da não-ortogonalidade da malha; para isso o decaimento da turbulência homogênea pareceu-nos o mais adequado, por as suas propriedades não dependerem nem da posição, nem da direcção considerada. É um escoamento em que a abordagem experimental e numérica são diferentes, pois experimentalmente estuda-se o decaimento da turbulência atrás de uma malha enquanto numericamente se simula o decaimento de um campo de velocidade inicial, com características pré-definidas, no interior de um domínio com condições de fronteira periódicas. Está bem documentado em termos de resultados numéricos e permitiu-nos confrontar vários aspectos, como estatísticas, funções densidade de probabilidade, isotropia dos campos de velocidade e vorticidade e alinhamento das direcções principais das taxas de deformação com a vorticidade.

O capítulo 6 apresenta os resultados de simulações numéricas do escoamento em torno do monte de Askervein, usando o método das grandes escalas da turbulência. Este monte apresenta as vantagens de ter uma altura reduzida, o que permite desprezar os efeitos da estratificação, e de estar rodeado por um terreno aproximadamente plano, facilitando a especificação das condições de fronteira. Além disso, estão disponíveis medições experimentais detalhadas do escoamento. Com esta simulação pretendemos identificar quais os aspectos que é necessário melhorar no programa desenvolvido, para que seja possível utilizar com sucesso o método das grandes escalas da turbulência na simulação de escoamentos atmosféricos sobre topografia complexa.

Capítulo 2

Modelos Matemáticos e Técnicas Numéricas

Conteúdo do Capítulo

Neste capítulo descrevemos as abordagens utilizadas na simulação numérica de escoamentos incompressíveis: os modelos matemáticos dos métodos da simulação numérica directa (DNS), das médias de Reynolds (RaNS) e das grandes escalas da turbulência (LES). Versamos também o modelo $k-\epsilon$ (versão original e três alternativas), para a modelação das tensões de Reynolds no método das médias de Reynolds, e alguns modelos de tensões residuais aplicáveis no método das grandes escalas da turbulência, com particular ênfase no modelo de Smagorinsky. Tratamos, ainda, os métodos de discretização temporal e as aproximações efectuadas na discretização espacial das equações, tanto em coordenadas Cartesianas como não-ortogonais. Por último, referimos os algoritmos utilizados para obter a solução das equações discretizadas e para resolver os sistemas de equações lineares.

2.1 Introdução

O modelo matemático dos escoamentos incompressíveis é constituído por um sistema de equações diferenciais acopladas e não-lineares. Pode comportar simplificações das leis exactas, destinadas a facilitar a resolução, sem que a precisão do resultado final seja afectada significativamente. Os modelos matemáticos que consideramos são descritos na secção 2.2.

Para obter uma solução numérica, é necessário um método de discretização, a fim de aproximar as equações diferenciais por meio de um sistema de equações algébricas, cujas incógnitas são definidas num conjunto discreto de pontos no espaço e no tempo. Existem

vários métodos, sendo os mais comuns o dos volumes finitos, o das diferenças finitas e o dos elementos finitos. Outros métodos, como os espectrais, também são utilizados, mas limitam-se a categorias específicas de problemas. Neste trabalho, recorreremos apenas à abordagem dos volumes finitos.

Após a escolha do método de discretização, é necessário seleccionar as aproximações a efectuar na discretização das equações. No caso dos volumes finitos, tal consiste na escolha das aproximações a efectuar no cálculo de integrais de superfície e volúmicos. O objectivo é alcançar um compromisso entre o erro e o esforço computacional exigido. As aproximações que utilizamos são descritas nas secções 2.3 e 2.4, para a discretização temporal e espacial, respectivamente.

Impõe-se, ainda, escolher um método para a resolução do sistema de equações algébricas obtidas após o processo de discretização. Existem vários, baseados geralmente em métodos para a resolução de problemas de valor inicial. O problema cuja resolução se empreender determinará a escolha do mais apropriado. No presente trabalho, utilizámos dois algoritmos distintos, temas das secções 2.5.1 e 2.5.2.

É também necessário um algoritmo para resolver sistemas de equações algébricas lineares. A escolha do mais adequado depende do problema considerado. Os utilizados neste trabalho são descritos na secção 2.6.

2.2 Equações Fundamentais e Modelação da Turbulência

A aplicação de princípios físicos de conservação à porção de fluido contida em certa região do espaço — denominada *volume de controlo* — resulta nas equações fundamentais da mecânica de fluidos. Ao longo deste trabalho, considerámos as seguintes hipóteses simplificativas: escoamentos incompressíveis, fluidos Newtonianos e aproximação de Boussinesq.

Da aplicação do princípio de conservação de massa resulta a equação da continuidade, apresentada em notação tensorial e num referencial com velocidade constante (cfr. Hoffmann et al., 1996):

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.1)$$

em que x_i são as coordenadas do referencial Cartesiano, u_i , as componentes da velocidade e ρ , a massa específica.

O segundo princípio de conservação considerado é a segunda lei de Newton (conservação de quantidade de movimento). Resulta nas equações de Navier-Stokes ou de transporte de quantidade de movimento, apresentadas também em notação tensorial, num referencial

com velocidade constante e na forma conservativa:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho' g_i, \quad (2.2)$$

em que t é o tempo, p , a pressão e g_i , as componentes da aceleração da gravidade no referencial Cartesiano. Como o fluido é Newtoniano, existe uma relação linear entre o tensor das taxas de deformação,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

e o das tensões viscosas (τ_{ij}), dada por

$$\tau_{ij} = 2 \mu S_{ij}.$$

Quando o escoamento é estratificado, é necessário considerar uma equação de transporte adicional, para o transporte da perturbação da massa específica relativamente a um estado de equilíbrio hidrostático (ρ'), definida por

$$\rho = \rho_{\text{hid}} + \rho'.$$

A frequência de Brunt-Väisälä (N) é calculada por

$$N^2 = \frac{\mathbf{g} \cdot \nabla \rho_{\text{hid}}}{\rho_0},$$

em que ρ_0 é a massa específica de referência. A equação de transporte é:

$$\frac{\partial(\rho \rho')}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \rho')}{\partial x_j} = -\rho u_j \frac{\rho_0 N^2}{g^2} g_j + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \rho'}{\partial x_j} \right). \quad (2.3)$$

Sc é o número de Schmidt, quociente entre os coeficientes de difusão de quantidade de movimento e de massa específica do fluido em questão ($Sc = \mu/\alpha$).

É possível resolver numericamente as equações (2.1), (2.2) e (2.3), sem qualquer aproximação além das necessárias discretizações numéricas. Designa-se este método por *simulação numérica directa* (DNS — *Direct Numerical Simulation*). No entanto, grande parte dos escoamentos que se verificam em aplicações de engenharia são turbulentos e possuem uma gama de escalas de comprimento e de tempo muito maiores que os escoamentos laminares, o que dificulta a sua resolução. De facto, de acordo com Reynolds (1989), o número total de nós necessário para uma simulação numérica directa de turbulência isotrópica é $N_{xyz} \approx 0.1 Re_\lambda^{9/2}$, em que Re_λ é o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor (λ). Se considerarmos que, por questões de estabilidade, o passo temporal tem de diminuir com o espaçamento da malha, o tempo de computação deve ser proporcional a $N_{xyz}^{4/3}$, ou

seja, a Re_λ^6 . Deste modo, a simulação numérica directa exige recursos computacionais elevados, pois para simular um escoamento com Re_λ duas vezes maior é necessário multiplicar o número total de nós por 20 e a simulação demorará 64 vezes mais tempo.

Esta situação justifica a existência de outros métodos, que permitem obter soluções relevantes para as aplicações em causa e são menos exigentes em recursos computacionais. Dois desses métodos foram usados neste trabalho: o método das *médias de Reynolds* (RaNS — *Reynolds averaged Navier-Stokes*) e o método da *simulação das grandes escalas da turbulência* (LES — *Large Eddy Simulation*). Eles resolvem apenas uma parte das escalas presentes no escoamento e tentam modelar o efeito que as não resolvidas têm naquelas. As diferenças residem na escolha das escalas resolvidas e na modelação dos efeitos das escalas não resolvidas. Refira-se, a propósito, que, por não ter sido utilizada no estudo de escoamentos estratificados qualquer uma dessas abordagens, as equações diferenciais (2.5) e (2.16) não incluem o termo de impulsão ($\rho'g_i$).

2.2.1 Método das Médias de Reynolds (RaNS)

O método das médias de Reynolds foi proposto por Reynolds (1895) e consiste em decompor o valor instantâneo de cada variável na soma do seu valor médio temporal, com uma flutuação atribuída à turbulência:

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \bar{u}_i(\mathbf{x}, t) + u'_i(\mathbf{x}, t) .$$

Posteriormente, foi estendido por Hussain (1983) a escoamentos em regime transiente, passando a considerar-se o valor médio numa dada fase do escoamento, em vez do valor médio temporal:

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \langle u_i(\mathbf{x}, t) \rangle + u'_i(\mathbf{x}, t) .$$

No caso de escoamentos periódicos, o valor médio de uma dada fase pode ser decomposto na soma do valor médio temporal e de uma componente periódica:

$$\langle u_i(\mathbf{x}, t) \rangle = \bar{u}_i(\mathbf{x}) + \tilde{u}_i(\mathbf{x}, t) .$$

Efectuando a média das equações (2.1) e (2.2), obtêm-se equações diferenciais para as quantidades médias:

$$\frac{\partial(\rho\langle u_i \rangle)}{\partial x_i} = 0 , \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial(\rho\langle u_i \rangle)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\langle u_j \rangle \langle u_i \rangle)}{\partial x_j} = \frac{\partial(\langle \tau_{ij} \rangle - \rho\langle u'_i u'_j \rangle)}{\partial x_j} - \frac{\partial\langle p \rangle}{\partial x_i} . \quad (2.5)$$

Em razão da não-linearidade das equações de Navier-Stokes, surgiu o termo adicional $-\rho\langle u'_i u'_j \rangle$, que necessita de ser modelado. Devido à complexidade da turbulência, não é de esperar que um só modelo permita obter resultados satisfatórios em todos os escoamentos (Kline et al., 1980). Neste trabalho, foi utilizado o modelo $k-\varepsilon$ (Launder and Spalding, 1972), descrito a seguir. Uma descrição de outros modelos e suas variantes pode ser encontrada, por exemplo, em Launder and Spalding (1972) ou em Launder et al. (1975).

2.2.1.1 Modelo $k-\varepsilon$

No modelo $k-\varepsilon$, as tensões de Reynolds são relacionadas com a taxa de deformação do fluido, recorrendo ao conceito de Boussinesq de viscosidade turbilhonar (μ_t):

$$-\rho\langle u'_i u'_j \rangle = 2\mu_t \langle S_{ij} \rangle - \frac{2}{3}\rho\langle k \rangle \delta_{ij} . \quad (2.6)$$

A viscosidade turbilhonar é obtida por

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\langle k \rangle^2}{\langle \varepsilon \rangle} , \quad (2.7)$$

em que C_μ é uma constante empírica, k , a energia cinética da turbulência e ε , a sua taxa de dissipação. Estas quantidades são apuradas mediante a resolução de duas equações de transporte adicionais:

$$\frac{\partial(\rho\langle k \rangle)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\langle u_j \rangle \langle k \rangle)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \langle k \rangle}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho\langle \varepsilon \rangle , \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial(\rho\langle \varepsilon \rangle)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\langle u_j \rangle \langle \varepsilon \rangle)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \langle \varepsilon \rangle}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\langle \varepsilon \rangle}{\langle k \rangle} P_k - \rho C_{\varepsilon 2} \frac{\langle \varepsilon \rangle^2}{\langle k \rangle} . \quad (2.9)$$

P_k representa a produção da energia cinética da turbulência, definida por

$$P_k = -\rho\langle u'_i u'_j \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} . \quad (2.10)$$

No modelo proposto por Launder and Spalding (1972), este termo é modelado usando a aproximação (2.6) para as tensões de Reynolds:

$$P_k \approx \mu_t \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} = \rho C_\mu \langle \varepsilon \rangle S^2 , \quad (2.11)$$

em que

$$S = \frac{\langle k \rangle}{\langle \varepsilon \rangle} \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right)^2} .$$

As constantes do modelo de turbulência utilizadas neste trabalho são as propostas por Launder and Spalding (1972):

$$C_\mu = 0.09 ; \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44 ; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92 ; \quad \sigma_k = 1.0 ; \quad \sigma_\varepsilon = 1.22 .$$

As equações (2.8) e (2.9) não são válidas em zonas onde o efeito da viscosidade molecular é importante (e.g., junto de fronteiras sólidas); daí o recurso às funções de parede propostas por Launder and Spalding (1974). Esta aproximação foi preferida ao uso do modelo válido para baixos números de Reynolds, devido ao seu menor esforço computacional.

A proposta original de modelação da produção de turbulência (2.11), que depende apenas da taxa de deformação do campo médio, nem sempre se mostra adequada. Em particular, em regiões de estagnação, a taxa de deformação do campo médio é elevada, mas a produção de turbulência é reduzida ou mesmo negativa. Para obviar a este problema, alguns autores sugerem outras formas de modelar o termo (2.10). Duas delas foram usadas neste trabalho: as propostas por Kato and Launder (1993) e por Jin and Braza (1994).

2.2.1.2 Modelo de Kato and Launder (1993)

A sugestão de Kato and Launder (1993) é que a produção de turbulência seja também dependente da vorticidade:

$$P_k \approx \rho C_\mu \langle \varepsilon \rangle S \Omega , \quad (2.12)$$

em que

$$\Omega = \frac{\langle k \rangle}{\langle \varepsilon \rangle} \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} - \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right)^2} .$$

2.2.1.3 Modelo de Jin and Braza (1994)

Jin and Braza (1994) sugerem que a produção de turbulência dependa apenas da vorticidade:

$$P_k \approx \rho C_\mu \langle \varepsilon \rangle \Omega^2 . \quad (2.13)$$

2.2.1.4 Modelo de Leschziner and Rodi (1981)

Uma outra variante do modelo $k-\varepsilon$ foi usada neste trabalho. Por as tensões de corte serem mais eficazes que as tensões normais na dissipação da turbulência, o que não é considerado

pelo modelo original, Leschziner and Rodi (1981) propõem que o termo de *produção de dissipação* na equação de transporte de ε ,

$$P_\varepsilon = C_{\varepsilon 1} \frac{\langle \varepsilon \rangle}{\langle k \rangle} P_k ,$$

seja substituído por

$$P_\varepsilon = \frac{\langle \varepsilon \rangle}{\langle k \rangle} (C'_{\varepsilon 1} P_k - 4 C''_{\varepsilon 1} \mu_t \langle S_{ns} \rangle^2) . \quad (2.14)$$

$\langle S_{ns} \rangle$ é a taxa deformação do campo médio na direcção da linha de corrente e é dada por

$$\langle S_{ns} \rangle = \frac{1}{2} (\langle S_{yy} \rangle - \langle S_{xx} \rangle) \sin(2\theta) + \langle S_{xy} \rangle \cos(2\theta) ,$$

em que θ é o ângulo entre o vector velocidade e o eixo dos xx . $C'_{\varepsilon 1}$ e $C''_{\varepsilon 1}$ são duas constantes empíricas:

$$C'_{\varepsilon 1} = 2.24 ; \quad C''_{\varepsilon 1} = 0.8 .$$

Dado que $C'_{\varepsilon 1} - C''_{\varepsilon 1} = C_{\varepsilon 1}$, este modelo proporciona os mesmos resultados do modelo original quando existem apenas tensões normais.

2.2.2 Método da Simulação das Grandes Escalas da Turbulência (LES)

O método da simulação das grandes escalas da turbulência, cuja primeira aplicação é atribuída a Deardorff (1970), pode ser visto, em termos de escalas resolvidas, como intermédio entre as abordagens das médias de Reynolds e da simulação numérica directa. Baseia-se na decomposição de um campo em duas contribuições: o campo das grandes escalas, designado *campo resolvido*, e o campo das pequenas escalas, designado *campo residual* ou *submalha* (*subgrid*). A designação *campo residual* parece-nos mais correcta, uma vez que não é obrigatório que este campo contenha apenas escalas menores que o espaçamento da malha. A utilização do método das grandes escalas da turbulência tem substituído a do método das médias de Reynolds em escoamentos complexos, nos quais a rotação, a curvatura, a libertação de calor ou a estratificação afectam a geração de turbulência. Quando os escoamentos são dominados por tensões normais à direcção principal, os métodos das médias de Reynolds produzem resultados satisfatórios (Ferziger, 1997).

A separação entre o campo resolvido e o campo residual é conseguida por meio de uma operação de filtragem espacial (Leonard, 1974)

$$\bar{u}_i(\mathbf{x}, t) = \int u_i(\mathbf{x}', t) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' ,$$

em que $\bar{u}_i$ é o campo resolvido e G , uma função filtro. Para que as equações para o campo filtrado sejam semelhantes às de Navier-Stokes, é necessário que a função G seja tal que a filtragem possa permutar com a derivação ($\overline{\partial u_i / \partial x_i} = \partial \bar{u}_i / \partial x_i$). Tal não acontece se a malha não for uniforme. Contudo, Ghosal and Moin (1995) argumentam que, quando se usam as equações derivadas supondo possível a comutação, o erro introduzido é da mesma ordem de grandeza do provocado pela discretização por um esquema de diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão. Assim sendo, apenas é necessário considerar este facto quando se emprega um método com resolução espacial de ordem superior àquele.

Filtrando as equações (2.1) e (2.2) e admitindo que a operação de filtragem pode permutar com a derivação, obtemos as equações para o campo resolvido:

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j \bar{u}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial(\bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^r)}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}. \quad (2.16)$$

O efeito que o campo residual tem no campo resolvido manifesta-se pelas tensões residuais

$$\tau_{ij}^r = -\rho(\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j)$$

e necessita de ser modelado.

Os modelos de tensões residuais dividem-se em quatro categorias: de viscosidade turbilhonar, de similaridade, mistos (combinam expressões dos dois tipos anteriores) e dinâmicos.

2.2.2.1 Modelos de Viscosidade Turbilhonar

Os modelos de viscosidade turbilhonar pressupõem que

$$\tau_{ij}^r - \frac{1}{3} \tau_{kk}^r \delta_{ij} = 2 \mu_r \bar{S}_{ij}, \quad (2.17)$$

em que $\bar{S}_{ij}$ é o tensor das taxas de deformação das grandes escalas e μ_r , a viscosidade do campo residual. Os modelos deste tipo mais divulgados são o de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963) e os propostos por Kraichnan (1976) e Chollet and Lesieur (1981) para turbulência homogénea. Uma descrição pormenorizada de vários modelos deste tipo pode ser encontrada em Lesieur and Métais (1996).

Neste trabalho, usámos o modelo de Smagorinsky, originalmente proposto para o estudo de escoamentos atmosféricos. Este modelo é o mais divulgado em aplicações de engenharia e baseia-se na noção de comprimento de mistura, pois considera que a viscosidade turbilhonar é proporcional a um comprimento característico das escalas residuais (ℓ_s) e ao módulo do tensor das taxas de deformação das grandes escalas:

$$\mu_r = \rho \ell_s^2 |\bar{S}|; \quad |\bar{S}| = (2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{1/2}. \quad (2.18)$$

O comprimento ℓ_s é proporcional à largura do filtro Δ :

$$\ell_s = C_S \Delta ; \quad \Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} , \quad (2.19)$$

em que C_S é a constante de Smagorinsky. A teoria permite estimar um valor para essa constante, admitindo que a frequência de corte no espaço de Fourier ($k_c = \pi/\Delta$) faz parte da zona inercial de um espectro de energia com a forma $E(k) = C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}$, em que ε é a taxa de dissipação dessa energia (Lilly, 1967):

$$C_S \approx \frac{1}{\pi} \left(\frac{3C_K}{2} \right)^{-3/4} .$$

Para uma constante de Kolmogorov $C_K \approx 1.4$, obtida a partir de medições na atmosfera (Champagne et al., 1977), obtém-se $C_S \approx 0.18$. Na prática, o que se verifica é que o valor de C_S depende de vários factores, como a geometria do escoamento e o número de Reynolds. Por exemplo: para simular o escoamento num canal, Piomelli et al. (1988) usam $C_S = 0.065$.

Uma das limitações do modelo de Smagorinsky é não prever a redução da viscosidade residual que deve ocorrer junto a uma parede sólida. Para a suprir, pode introduzir-se na definição do comprimento ℓ_s uma função de amortecimento de van Driest (van Driest, 1956):

$$\ell_s = C_S [1 - \exp(-n^+/A^+)]^{1/2} \Delta , \quad A^+ = 25 , \quad (2.20)$$

em que n^+ é a distância adimensional à parede sólida. Outra limitação é assumir que o campo residual e o campo resolvido estão sempre em equilíbrio. Segundo Reynolds (1989), tal não é correcto em escoamentos em transição para turbulência, relaminarização ou troca rápida de um estado para outro; Gerz and Palma (1994) demonstram-no no caso de um escoamento com estratificação.

A análise dos resultados de simulações numéricas directas mostra que a correlação entre o tensor das taxas de deformação das grandes escalas e as tensões residuais reais é reduzida, normalmente entre 0.1 e 0.3 (Clark et al., 1979). Além disso, a utilização de uma expressão difusiva para o cálculo das tensões residuais torna estes modelos adequados apenas para a previsão da transferência de energia das escalas maiores para as mais pequenas. De acordo com Piomelli et al. (1991) e com Kerr et al. (1996), a transferência de energia das escalas residuais para as resolvidas (*backscatter*), embora menor, também pode ser significativa e não é prevista por estes modelos. A sua vantagem é a previsão correcta da dissipação nas escalas residuais. São assim capazes de proporcionar boas previsões de quantidades importantes como a velocidade média e as flutuações r.m.s., o que justifica serem os de utilização mais frequente.

2.2.2.2 Modelos de Similaridade

A transferência de energia do campo residual para o resolvido está naturalmente presente nos modelos de similaridade (Bardina et al., 1983; Goutorbe et al., 1994; Liu et al., 1994). Estes modelos consideram que as interações mais importantes entre os campos resolvido e residual envolvem as escalas resolvidas menores e as escalas residuais maiores. O tensor das tensões residuais é então aproximado por um tensor calculado a partir do campo resolvido, utilizando um filtro com um comprimento igual ou maior que o usado para obter o campo resolvido. Em particular, o modelo de Bardina (Bardina et al., 1983) é dado pela expressão

$$\tau_{ij}^r \approx -\rho(\overline{\overline{u_i u_j}} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}}) . \quad (2.21)$$

Os modelos de Goutorbe et al. (1994) e de Liu et al. (1994) assumem que o tensor das tensões residuais é proporcional ao tensor L_{ij} , definido por

$$L_{ij} = -(\widehat{\overline{u_i u_j}} - \widehat{\overline{u_i}} \widehat{\overline{u_j}}) . \quad (2.22)$$

No modelo de Goutorbe et al. (1994), a segunda operação de filtragem é uma média espacial, enquanto no modelo de Liu et al. (1994) é, como no de Bardina et al. (1983), uma filtragem com um comprimento característico maior que o usado para obter o campo resolvido.

Uma análise *a priori* mostra uma boa correlação entre as tensões calculadas usando estes modelos e as tensões reais. No entanto, por causa da filtragem adicional, o tensor das tensões residuais modelado influencia escalas maiores do que as afectadas pela interacção exacta entre o campo resolvido e o residual (Liu et al., 1994).

O modelo de Bardina et al. (1983) subestima a dissipação nas escalas residuais; consequentemente as previsões das quantidades médias e r.m.s. são menos satisfatórias que as dos modelos de viscosidade turbilhonar (Domaradzki and Saiki, 1997). Em particular, prevê tensões residuais nulas quando se utiliza o filtro espectral de corte abrupto (*sharp cutoff*).

A mesma análise *a priori* do modelo de similaridade de Liu et al. (1994) permite observar, além de uma boa correlação entre as tensões exactas e as modeladas, uma representação correcta da dissipação nas escalas residuais. No entanto, de acordo com Domaradzki and Saiki (1997), na prática revela os mesmos problemas do modelo de Bardina.

2.2.2.3 Modelos Mistos

Para tentar combinar as capacidades de previsão dos modelos de similaridade (melhores correlações entre as quantidades reais e as modeladas) com as características de dissipação dos modelos de viscosidade turbilhonar, surgiram os modelos mistos (Bardina et al., 1983; Zhang et al., 1993). São obtidos adicionando uma expressão de viscosidade turbilhonar

aos modelos de similaridade. Prevêem a transferência de energia do campo residual para o resolvido e proporcionam resultados idênticos ou melhores que os obtidos com o modelo de Smagorinsky (Domaradzki and Saiki, 1997). Todavia, encontram ainda pouca aceitação, por dependerem do filtro utilizado e os resultados que proporcionam não serem significativamente melhores.

2.2.2.4 Modelos Dinâmicos

Existem também os modelos dinâmicos, que usam como base um dos modelos anteriormente referidos. A primeira utilização de um modelo deste tipo deve-se a Germano et al. (1991), tendo como base o modelo de Smagorinsky. À semelhança dos modelos de similaridade, usa uma segunda operação de filtragem, com um filtro de comprimento característico maior, para obter um novo campo de velocidade e as respectivas tensões residuais (que é possível calcular explicitamente). Posteriormente, obtém uma aproximação para essas tensões utilizando o modelo de Smagorinsky; comparando as tensões exactas com a aproximação, é possível ajustar o parâmetro do modelo base (no caso, a constante de Smagorinsky), que vai ser depois aplicado na modelação das tensões residuais do campo de velocidade original. Este modelo apresenta algumas inconsistências matemáticas, que originam uma variação excessiva do parâmetro do modelo base com a posição e o tempo. Por via de tal, foram propostas algumas variantes, como, por exemplo, a de Lilly (1992), a de Wong and Lilly (1994) e a de Ghosal et al. (1995). A variante de Lilly (1992) é, aliás, a mais divulgada. Este tipo de abordagem, para a aproximação das tensões residuais, não está limitado ao modelo de Smagorinsky; existem outras possíveis, como a utilizada por Zhang et al. (1993), com um modelo misto.

Poder-se-ia supor que o modelo de Germano et al. (1991) era capaz de prever a transferência de energia das escalas menores para as maiores. No entanto, a utilização de uma expressão difusiva para a modelação da transferência inversa de energia, pode conduzir à amplificação exponencial das perturbações locais, em vez do amortecimento exponencial tradicional, pois a forma física do fenómeno é diferente (Domaradzki and Saiki, 1997). Tal pode suscitar o aparecimento de instabilidades nas simulações, sem correspondência com a realidade (Carati et al., 1995). Nesse caso, é necessário utilizar um procedimento para limitar a transferência de energia excessiva (Carati et al., 1995; Ghosal et al., 1995). Para modelar essa transferência de energia mais eficientemente, a prática comum é introduzir um termo adicional nas equações, que tanto pode ser aleatório como determinístico (Leith, 1990; Chasnov, 1991; Schumann, 1995).

Finalmente, também é possível efectuar uma simulação das grandes escalas da turbulência sem um modelo das tensões residuais. Usa-se então a difusão numérica dos esquemas de discretização para dissipar a energia adicional. De acordo com Lesieur and Métais (1996), tal abordagem deve ser efectuada com bastante cuidado, para que exista a certeza de que a difusão numérica cumpre exactamente os requisitos do campo residual.

2.3 Discretização Temporal

Após o estabelecimento das equações diferenciais que constituem o modelo matemático do problema e a escolha do método de discretização, o passo seguinte da construção de um método numérico é a escolha dos esquemas de discretização. Dado as equações fundamentais incluïrem como variáveis independentes o tempo (t) e as coordenadas espaciais (x_i), é necessário eleger esquemas de discretização adequados para estas variáveis.

Para a apresentação dos esquemas de discretização temporal, é suficiente considerar a equação diferencial ordinária, de primeira ordem, com uma condição inicial:

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = f[t, \phi(t)] ; \quad \phi(t_0) = \phi^0 .$$

Para a escolha do esquema de discretização temporal, consideraram-se três factores: precisão, estabilidade e exigência de recursos computacionais (memória e tempo de computação). Uma escolha pode ser efectuada à partida: as escalas de tempo que é necessário resolver quando se usa a abordagem das médias de Reynolds permitem a utilização de passos de tempo grandes, para os quais só os esquemas implícitos são estáveis ou em que a precisão adicional conseguida compensa o esforço computacional exigido. Quando se usa a abordagem da simulação numérica directa ou das grandes escalas da turbulência, a gama de escalas de tempo que é necessário resolver é maior e obriga à utilização de passos de tempo mais reduzidos, para os quais os esquemas explícitos são geralmente estáveis. A excepção são os casos em que a utilização de malhas muito finas pode obrigar a tratar alguns termos, ou mesmo todos, de forma implícita. Tal não sucedeu neste trabalho.

Entre os esquemas implícitos existentes, usámos o *método de Euler implícito* ou *regressivo*,

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t f(t_{n+1}, \phi^{n+1}) , \quad (2.23)$$

e o *método implícito de três níveis*,

$$\phi^{n+1} = \frac{4}{3}\phi^n - \frac{1}{3}\phi^{n-1} + \frac{2}{3}\Delta t f(t_{n+1}, \phi^{n+1}) . \quad (2.24)$$

O método de Euler implícito é de primeira ordem e, por isso, quando o passo temporal é suficientemente pequeno tem um erro maior que o método implícito de três níveis, que é de segunda ordem. A desvantagem deste último reside na necessidade de guardar o valor de ϕ^{n-1} . O método implícito de três níveis foi preferido relativamente ao método de Crank-Nicolson, da mesma ordem, mas mais preciso, porque o esforço computacional exigido é menor e é mais fácil a escrita de um código capaz de resolver, além de escoamentos em regime transiente, escoamentos em regime permanente.

Os métodos explícitos são mais numerosos que os métodos implícitos, mas a nossa escolha limitou-se àqueles que utilizam $2N$ posições de memória, em que N é a dimensão

do sistema de equações diferenciais ordinárias a resolver. Considerámos duas famílias de métodos: a dos métodos de Adams-Bashfort e a dos métodos de Runge-Kutta. Destes, cumprem o requisito da quantidade de memória utilizada o método de Adams-Bashfort de segunda ordem e os métodos de Runge-Kutta de três subpassos e terceira ordem, designado Runge-Kutta (3,3) (Williamson, 1980) e os métodos de quatro subpassos e terceira ordem e de cinco subpassos e quarta ordem, designados, respectivamente, Runge-Kutta (4,3) e Runge-Kutta (5,4) (Carpenter and Kennedy, 1994).

O método de Adams-Bashfort necessita só de uma avaliação da função f por cada passo, enquanto os métodos de Runge-Kutta carecem de tantas avaliações quanto o número de subpassos. Por isso, apenas serão competitivos quando a sua precisão e a sua estabilidade permitirem a utilização de passos maiores.

2.3.1 Comparação dos Métodos de Discretização Temporal

Para comparar a precisão destes métodos, considerámos a equação

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\Gamma_\phi}{\rho} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad (2.25)$$

frequentemente usada na literatura como um modelo das equações de Navier-Stokes (e.g., Fletcher, 1991; Ferziger and Perić, 1996). Considerámos $\rho = 1$, $u = 1$, $\Gamma_\phi = 0.1$ e, como condição inicial, $\phi^0 = 0$; para os instantes de tempo seguintes, as condições de fronteira usadas foram $\phi(0) = 0$ e $\phi(1) = 1$. Usámos uma malha com 41 nós ($\Delta x = 0.025$) e as derivadas espaciais foram discretizadas por diferenças finitas centrais.

Dado não existir, disponível, uma solução analítica para a equação (2.25), obtivemos uma solução numérica de referência para $t = 0.01$, usando o método de Runge-Kutta (5,4) — o mais preciso — e 500 passos ($\Delta t = 2 \times 10^{-5}$). Chegámos a uma estimativa do erro de todos os métodos considerados e do método de Euler explícito comparando as soluções obtidas, usando 10, 20, 40 e 80 passos ($\Delta t = 1 \times 10^{-3}$, 5×10^{-4} , 2.5×10^{-4} e 1.25×10^{-4}), com a solução de referência (figura 2.1).

Exceptuando o método de Runge-Kutta (4,3), todos os outros apresentaram a taxa de redução do erro esperada: primeira ordem, para o método de Euler explícito; segunda, para o método de Adams-Bashfort; terceira, para o método de Runge-Kutta (3,3); quarta, para o método de Runge-Kutta (5,4). O método de Runge-Kutta (4,3) apresentou uma taxa de redução do erro de aproximadamente quarta ordem, apesar de ser considerado um método de terceira ordem. Tal deve-se ao reduzido coeficiente de difusão da equação (2.25) ($\Gamma_\phi/\rho = 0.1$), comparado com a velocidade ($u = 1$). Esta situação não deixa de ser representativa do que pode encontrar-se na prática, quando o número de Reynolds é elevado. Mesmo quando se usa a abordagem da simulação das grandes escalas da turbulência, em que existe a viscosidade do campo residual, é frequente a maior importância do transporte convectivo.

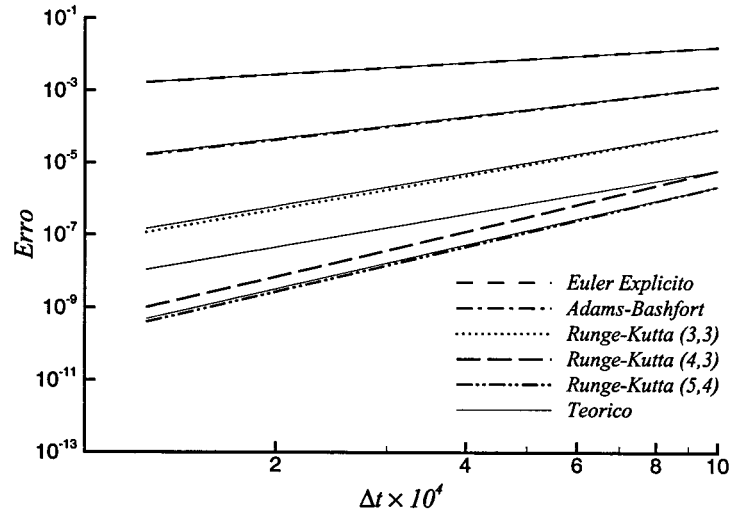


Figura 2.1: Erro de vários métodos explícitos de discretização temporal, em função do intervalo de tempo, e sua evolução teórica (considerando a ordem de precisão).

Comparando os três métodos de Runge-Kutta, o método de Runge-Kutta (4,3) pareceu representar um bom compromisso. A sua precisão e estabilidade são próximas das do método de Runge-Kutta (5,4) e o esforço computacional exigido é intermédio entre o deste e o do método de Runge-Kutta (3,3). Já a escolha entre este e o método de Adams-Bashfort é mais difícil, pois o esforço computacional exigido para a solução da equação (2.25) não é representativo do esforço necessário para resolver um intervalo de tempo quando é necessário solucionar também a equação da continuidade. Por isso, a opção por um destes esquemas deve ser feita caso a caso. Pode, no entanto, assentar-se que o método de Runge-Kutta (4,3) é mais estável que o de Adams-Bashfort e que quanto menor for o intervalo de tempo usado mais vantajoso será o seu uso.

Resta apenas referir as definições dos esquemas que optámos por usar. A do esquema de Adams-Bashfort é:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\Delta t}{2} [3f(t_n, \phi^n) - f(t_{n-1}, \phi^{n-1})] . \quad (2.26)$$

E a do esquema de Runge-Kutta (4,3) é:

$$\begin{aligned} \phi_{n+\frac{19}{36}}^* &= \phi^n + \frac{19}{36} \Delta t f(t_n, \phi^n) ; & f^* &= f(t_{n+\frac{19}{36}}, \phi_{n+\frac{19}{36}}^*) - \frac{205}{243} f(t_n, \phi^n) ; \\ \phi_{n+\frac{3}{4}}^* &= \phi_{n+\frac{19}{36}}^* + \frac{27}{19} \Delta t f^* ; & f^{**} &= f(t_{n+\frac{3}{4}}, \phi_{n+\frac{3}{4}}^*) - \frac{243}{38} f^* ; \\ \phi_{n+\frac{3}{4}}^{**} &= \phi_{n+\frac{3}{4}}^* + \frac{2}{9} \Delta t f^{**} ; & f^{***} &= f(t_{n+\frac{3}{4}}, \phi_{n+\frac{3}{4}}^{**}) - \frac{2}{9} f^{**} ; \\ \phi^{n+1} &= \phi_{n+\frac{3}{4}}^{**} + \frac{1}{4} \Delta t f^{***} . \end{aligned} \quad (2.27)$$

2.4 Discretização Espacial

Neste trabalho, usamos o método dos volumes finitos em malhas não-desfasadas, Cartesianas ou não-ortogonais. Segundo este método, o domínio é dividido num número finito de volumes de controlo contíguos e a formulação integral das equações de conservação é aplicada a cada um. São possíveis duas abordagens: definir, primeiro, os limites dos volumes de controlo e colocar, depois, os pontos de cálculo no centro deles ou construir os volumes de controlo em torno de pontos de cálculo previamente estabelecidos, de modo a que as suas faces se situem a meia distância entre eles. Enquanto a primeira abordagem proporciona maior precisão no cálculo de integrais volúmcos, a segunda facilita a interpolação de valores para as faces e pode proporcionar maior precisão no cálculo das derivadas (Ferziger and Perić, 1996). Neste trabalho, preferimos a primeira abordagem, mais comum.

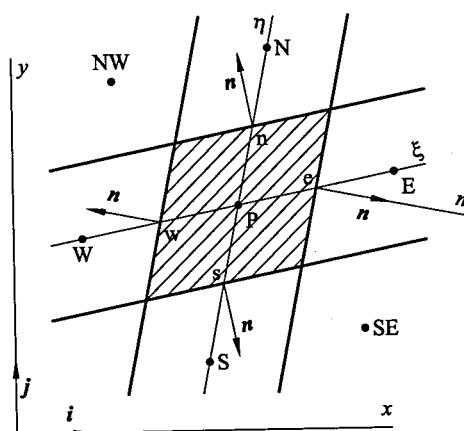


Figura 2.2: Volume de controlo bidimensional típico e notação usada para designar as suas faces e os volumes de controlo vizinhos.

2.4.1 Equação de Transporte Genérica

Para mostrar como se efectuou a discretização das equações diferenciais, consideraremos, em primeiro lugar, uma equação de transporte genérica e, a seguir, as equações (2.1) e (2.2). Tomemos em conta, então, uma equação de transporte genérica, na sua formulação integral:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n} dS + \int_V q_\phi dV .$$

Para discretizar todos os integrais, usamos a regra do ponto médio, que permite substituir um integral pelo produto entre um valor médio e uma área ou um volume, caso se trate de um integral de superfície ou de um volúmcico, respectivamente. Na sequência, é possível

aproximar o valor médio pelo valor no centro da superfície ou do volume. Admitindo que estes são conhecidos, o integral é aproximado com uma precisão de segunda ordem.

A discretização do termo transiente já foi abordada antes e o primeiro termo a requerer a nossa atenção é o que representa o transporte convectivo:

$$\int_S \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l F_l^c, \quad l = e, w, n, s, \dots$$

F_l^c representa o fluxo convectivo de ϕ em cada uma das faces do volume de controlo. A título de exemplo, explicitaremos o fluxo na face 'e', sendo os das outras faces obtidos de modo idêntico:

$$F_e^c = \int_{S_e} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \approx \dot{m}_e \phi_e, \quad (2.28)$$

em que

$$\dot{m}_e = \int_{S_e} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.29)$$

Consideremos, agora, o termo difusivo:

$$\int_S \Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l F_l^d, \quad l = e, w, n, s, \dots$$

F_l^d representa o fluxo difusivo de ϕ nas faces do volume de controlo. Novamente, explicitando apenas o fluxo na face 'e',

$$F_e^d = \int_{S_e} \Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n} dS \approx (\Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n})_e S_e. \quad (2.30)$$

Finalmente, considerámos o termo de produção/destruição, que é um integral volúmico. Usando as aproximações já referidas,

$$Q_{\phi,P} = \int_V q_\phi dV \approx q_{\phi,P} \Delta V. \quad (2.31)$$

2.4.1.1 Aproximações Usadas em Malhas Cartesianas

A utilização do método dos volumes finitos conduz a um balanço entre os fluxos convectivos e difusivos através das faces do volume de controlo e a produção/destruição no seu

interior. Aqui introduziremos as aproximações usadas para obter os valores de ϕ e das suas derivadas nas faces do volume de controlo. O cálculo dos fluxos mássicos exige uma abordagem particular, dependente do algoritmo usado, sendo, por isso, referida adiante, nas secções 2.5.1 e 2.5.2. Consideremos, primeiramente, o fluxo convectivo

$$F_e^c \approx \dot{m}_e \phi_e ,$$

que requer o conhecimento de ϕ na face 'e' do volume de controlo. Existem vários esquemas possíveis, dos quais apresentaremos apenas os que utilizámos. A aproximação mais simples é a *interpolação de montante*, também denominada *diferenças finitas de montante* ou, na terminologia anglo-saxónica, *upwind differencing scheme* (UDS), por ser equivalente a essa aproximação quando se usa uma metodologia de diferenças finitas. O sentido do escoamento é considerado e o valor de montante é escolhido:

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e > 0 ; \\ \phi_E & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e < 0 . \end{cases} \quad (2.32)$$

Esta aproximação tem uma precisão de primeira ordem, porquanto é a única que não introduz dispersão, mas sim uma difusão numérica significativa. Outra hipótese é a *interpolação linear* entre os nós mais próximos, também denominada *diferenças finitas centrais* ou, de novo recorrendo à terminologia anglo-saxónica, *central differencing scheme* (CDS). Considerando um coeficiente de interpolação linear definido como

$$\lambda_e = \frac{x_E - x_e}{x_E - x_P} , \quad (2.33)$$

a aproximação para ϕ_e é

$$\phi_e = \lambda_e \phi_P + (1 - \lambda_e) \phi_E . \quad (2.34)$$

Esta é uma aproximação com precisão de segunda ordem para ϕ_e . Como todas as de ordem superior à primeira, tem a desvantagem de introduzir dispersão. É com o objectivo de reduzir as oscilações que podem aparecer quando se usa esta aproximação que Leonard (1979) sugere um esquema em que é introduzido um ponto adicional a montante, atendendo à natureza da convecção, e que denominou *quadratic upwind interpolation for convective kinematics* (QUICK):

$$\phi_e = \begin{cases} g_1 \phi_W + (1 - g_1 - g_2) \phi_P + g_2 \phi_E & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e > 0 , \\ g_3 \phi_P + (1 - g_3 - g_4) \phi_E + g_4 \phi_{EE} & \text{se } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e < 0 . \end{cases} \quad (2.35)$$

Os coeficientes g_i podem ser definidos a partir dos coeficientes de interpolação (2.33):

$$g_1 = -\frac{\lambda_{e,W}^2 \lambda_{e,P}}{1 + \lambda_{e,W} - \lambda_{e,P}} ; \quad g_2 = \frac{(1 + \lambda_{e,W})(1 - \lambda_{e,P})^2}{1 + \lambda_{e,W} - \lambda_{e,P}} ;$$

$$g_3 = \frac{(2 - \lambda_{e,W}) \lambda_{e,P}^2}{1 + \lambda_{e,P} - \lambda_{e,E}} ; \quad g_4 = -\frac{(1 - \lambda_{e,P})(1 - \lambda_{e,E})^2}{1 + \lambda_{e,P} - \lambda_{e,E}} .$$

Com o objectivo de evitar o aparecimento de oscilações sem correspondência física, que podem ocorrer quando são usados esquemas de ordem superior à primeira, alguns autores sugerem a combinação de diferentes esquemas de aproximação. Um deles é o *esquema híbrido* de Spalding (1972), usado neste trabalho, que utiliza as aproximações de montante e linear, dependendo do valor do número de Peclet local. Esta aproximação despreza ainda a difusão molecular quando é utilizada a aproximação de montante, para tentar compensar a difusão numérica introduzida.

Consideremos, agora, o fluxo difusivo

$$F_e^d \approx (\Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n})_e S_e = \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \Delta y \Delta z ,$$

que exige o conhecimento do coeficiente de difusão Γ_ϕ e da derivada $\partial\phi/\partial x$ na face 'e' do volume de controlo. Para o coeficiente de difusão, usámos a aproximação linear definida em (2.34); para a derivada $\partial\phi/\partial x$, empregámos a fórmula das diferenças finitas centrais:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} .$$

Esta é uma aproximação de segunda ordem de precisão numa malha uniforme, mas apenas de primeira ordem quando a malha não é uniforme; no entanto a taxa de redução do erro é sempre de segunda ordem quando a malha é refinada.

2.4.1.2 Aproximações Usadas em Malhas Não-Ortogonais

A aproximação do fluxo convectivo numa malha não-ortogonal é idêntica à de uma malha Cartesiana, podendo usar-se qualquer uma das expressões definidas em (2.32), (2.34) ou (2.35). É apenas necessária uma nova definição do coeficiente de interpolação linear (2.33), para se considerar o facto de a malha ser curvilínea:

$$\lambda_e = \frac{\| \mathbf{x}_E - \mathbf{x}_e \|}{\| \mathbf{x}_E - \mathbf{x}_e \| + \| \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_P \|} . \quad (2.36)$$

Já a aproximação do fluxo difusivo faz intervir termos adicionais, dado que o vector normal à superfície de controlo pode ter componentes segundo várias direcções Cartesianas:

$$F_e^d \approx (\Gamma_\phi \text{grad } \phi \cdot \mathbf{n})_e S_e = \Gamma_{\phi,e} \sum_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)_e S_e^i . \quad (2.37)$$

S_e^i são as componentes do vector superfície da face, definido por

$$\mathbf{S}_e = S_e \mathbf{n} = S_e^x \mathbf{i} + S_e^y \mathbf{j} + S_e^z \mathbf{k} .$$

Para o cálculo das derivadas $\partial\phi/\partial x_i$, é necessário usar uma transformação de coordenadas, definida por $x_i = x_i(\xi_j)$, $j = 1, 2, 3$ e caracterizada pelo Jacobiano J :

$$J = \det \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix}. \quad (2.38)$$

Usando esta transformação, as derivadas com respeito às coordenadas Cartesianas calculam-se por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \frac{\beta^{ij}}{J}, \quad (2.39)$$

em que β^{ij} representa o cofactor de $\partial x_i / \partial \xi_j$ no Jacobiano J . As componentes do vector superfície das faces podem também ser definidas em função dos cofactores β^{ij} por

$$S_e^i = \beta_e^{i1} \Delta \eta \Delta \zeta, \quad S_n^i = \beta_n^{i2} \Delta \xi \Delta \zeta, \quad S_t^i = \beta_t^{i3} \Delta \xi \Delta \eta.$$

Definindo os coeficientes B^{ij} como

$$B^{ij} = \beta^{lj} \beta^{li} = \beta^{1j} \beta^{1i} + \beta^{2j} \beta^{2i} + \beta^{3j} \beta^{3i},$$

obtemos a aproximação para o fluxo difusivo na face 'e' do volume de controlo por

$$F_e^d \approx \left(\frac{\Gamma_\phi}{J} \right)_e \sum_j \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} B^{1j} \right)_e \Delta \eta \Delta \zeta. \quad (2.40)$$

A diferença entre esta expressão e a do fluxo difusivo em coordenadas Cartesianas é que, enquanto nela é necessário aproximar as derivadas na face em todas as direcções e escolher aproximações adequadas para todas elas, na do fluxo difusivo em coordenadas Cartesianas tal apenas é necessário na direcção normal à face. A derivada na direcção ξ pode ser aproximada pela fórmula das diferenças finitas centrais entre os nós P e E, de modo idêntico ao que foi feito em malhas Cartesianas:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi}.$$

Para as derivadas nas direcções η e ζ , uma das hipóteses possíveis é calcular os seus valores nos nós P e E e usar depois o coeficiente de interpolação (2.36), para obter um valor na face, supondo uma variação linear das derivadas entre os nós P e E:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_e &\approx \lambda_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_P + (1 - \lambda_e) \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_E, \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)_e &\approx \lambda_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)_P + (1 - \lambda_e) \left(\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)_E. \end{aligned}$$

A aproximação das derivadas nos nós em relação às direcções da malha não-ortogonal não apresenta dificuldades de maior e pode ser usada novamente a fórmula das diferenças finitas centrais. A título de exemplo, apresentamos a aproximação da derivada $\partial\phi/\partial\eta$:

$$\frac{\delta\phi}{\delta\eta} = \frac{\phi_n - \phi_s}{\Delta\eta},$$

em que ϕ_n é obtido supondo uma variação linear de ϕ entre os nós P e N e ϕ_s , uma variação linear de ϕ entre os nós S e P.

2.4.2 Discretização das Equações de Continuidade e de Navier-Stokes

A velocidade é uma grandeza vectorial, por via do que as suas equações de transporte apresentam algumas diferenças em relação à equação de transporte genérica. Começemos por considerar a formulação integral da equação da continuidade (2.1):

$$\int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = 0. \quad (2.41)$$

A sua discretização traduz-se num balanço dos fluxos mássicos que entram e saem do volume de controlo:

$$\int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{S_l} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l \dot{m}_l, \quad l = e, w, n, s, \dots$$

Consideremos agora a formulação integral da equação (2.2):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho u_i dV + \int_S \rho u_i \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \tau_{ij} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} dS - \int_S p \mathbf{i}_i \cdot \mathbf{n} dS + \int_V \rho' g_i dV. \quad (2.42)$$

A discretização que apresentamos a seguir, para esta equação, foi também usada nas equações (2.5) e (2.16), adicionando à viscosidade molecular a viscosidade turbilhonar ou a viscosidade residual. O termo que representa o transporte convectivo é idêntico ao da equação de transporte genérica

$$F_{i,e}^c = \int_{S_e} \rho u_i \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \approx \dot{m}_e u_{i,e}.$$

Para obter uma aproximação para $u_{i,e}$, utilizámos as aproximações já descritas para a equação de transporte genérica, quer em coordenadas Cartesianas, quer em coordenadas não-ortogonais.

O tratamento dos termos que representam o transporte difusivo,

$$F_{i,e}^d = \int_{S_e} \tau_{ij} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} dS ,$$

e o gradiente de pressão,

$$Q_i^p = - \int_S p \mathbf{i}_i \cdot \mathbf{n} dS ,$$

é diferente consoante a malha seja Cartesiana ou não-ortogonal; apresentamo-lo a seguir. Já o termo de impulsão tem um tratamento idêntico nos dois tipos de malha:

$$Q_i^g = \int_V \rho' g_i dV \approx \rho'_P g_i \Delta V . \quad (2.43)$$

2.4.2.1 Aproximações Usadas em Malhas Cartesianas

Numa malha Cartesiana, a normal à face do volume de controlo coincide com uma das direcções Cartesianas, o que simplifica o termo difusivo e o termo do gradiente de pressão. Assim, o termo difusivo na face 'e' do volume de controlo é

$$F_{i,e}^d = \int_{S_e} \tau_{ix} dS \approx (\tau_{ix})_e S_e . \quad (2.44)$$

As tensões nas faces do volume de controlo são obtidas, usando diferenças finitas centrais, por

$$\begin{aligned} (\tau_{xx})_e &= 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_e \approx 2\mu \frac{u_E - u_P}{x_E - x_P} , \\ (\tau_{yx})_e &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)_e \approx \mu \frac{v_E - v_P}{x_E - x_P} + \mu \left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_e , \\ (\tau_{zx})_e &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)_e \approx \mu \frac{w_E - w_P}{x_E - x_P} + \mu \left(\frac{\delta u}{\delta z} \right)_e . \end{aligned}$$

As derivadas na face do volume de controlo em ordem a direcções tangentes à face são obtidas interpolando-as a partir dos valores nodais, de modo semelhante ao que foi feito no termo difusivo da equação de transporte genérica em malhas não-ortogonais. A título de exemplo:

$$\left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_e = \lambda_e \left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_P + (1 - \lambda_e) \left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_E .$$

Os termos que representam a contribuição do gradiente de pressão são discretizados por

$$Q_u^p = - \int_S p \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} dS \approx -(p_e - p_w) \Delta y \Delta z, \quad (2.45)$$

$$Q_v^p = - \int_S p \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS \approx -(p_n - p_s) \Delta x \Delta z, \quad (2.46)$$

$$Q_w^p = - \int_S p \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} dS \approx -(p_t - p_b) \Delta x \Delta y, \quad (2.47)$$

obtendo-se a pressão nas faces dos volumes de controlo por meio da interpolação linear definida em (2.33).

2.4.2.2 Aproximações Usadas em Malhas Não-Ortogonais

O fluxo difusivo de quantidade de movimento na face 'e' do volume de controlo numa malha não-ortogonal é

$$F_{i,e}^d = \int_{S_e} \tau_{ij} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} dS \approx (\tau_{ij})_e S_e^j. \quad (2.48)$$

Esta expressão inclui três tensões por cada componente Cartesiana da velocidade. Como exemplo, consideremos a equação de transporte na direcção x :

$$F_{u,e}^d = \int_{S_e} \tau_{xj} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} dS \approx (\tau_{xj})_e S_e^j. \quad (2.49)$$

As tensões podem ser expressas em função das derivadas no referencial não-ortogonal:

$$\begin{aligned} (\tau_{xx})_e &= 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_e = 2 \frac{\mu}{J_e} \left(\frac{\partial u}{\partial \xi_i} \beta^{1i} \right)_e, \\ (\tau_{xy})_e &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)_e = \frac{\mu}{J_e} \left(\frac{\partial v}{\partial \xi_i} \beta^{1i} + \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \beta^{2i} \right)_e, \\ (\tau_{xz})_e &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)_e = \frac{\mu}{J_e} \left(\frac{\partial w}{\partial \xi_i} \beta^{1i} + \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \beta^{3i} \right)_e. \end{aligned}$$

Recorrendo a aproximações idênticas às usadas na discretização do termo difusivo da equação de transporte genérica, obtemos

$$\begin{aligned}
 (\tau_{xx})_e &\approx 2 \frac{\mu}{J_e} \left[\frac{u_E - u_P}{\Delta \xi} \beta_e^{11} + \left(\frac{\delta u}{\delta \eta} \beta_e^{12} \right)_e + \left(\frac{\delta u}{\delta \zeta} \beta_e^{13} \right)_e \right], \\
 (\tau_{xy})_e &\approx \frac{\mu}{J_e} \left[\frac{v_E - v_P}{\Delta \xi} \beta_e^{11} + \left(\frac{\delta v}{\delta \eta} \beta_e^{12} \right)_e + \left(\frac{\delta v}{\delta \zeta} \beta_e^{13} \right)_e + \frac{u_E - u_P}{\Delta \xi} \beta_e^{21} + \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{\delta u}{\delta \eta} \beta_e^{22} \right)_e + \left(\frac{\delta u}{\delta \zeta} \beta_e^{23} \right)_e \right], \\
 (\tau_{xz})_e &\approx \frac{\mu}{J_e} \left[\frac{w_E - w_P}{\Delta \xi} \beta_e^{11} + \left(\frac{\delta w}{\delta \eta} \beta_e^{12} \right)_e + \left(\frac{\delta w}{\delta \zeta} \beta_e^{13} \right)_e + \frac{u_E - u_P}{\Delta \xi} \beta_e^{31} + \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{\delta u}{\delta \eta} \beta_e^{32} \right)_e + \left(\frac{\delta u}{\delta \zeta} \beta_e^{33} \right)_e \right].
 \end{aligned}$$

O termo do gradiente de pressão é discretizado por:

$$Q_u^p = - \int_S p \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_l p_l S_l^x, \quad (2.50)$$

$$Q_v^p = - \int_S p \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_l p_l S_l^y, \quad (2.51)$$

$$Q_w^p = - \int_S p \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_l p_l S_l^z, \quad l = e, w, n, s, \dots \quad (2.52)$$

2.5 Solução Numérica das Equações de Navier-Stokes

A resolução das equações de continuidade e de transporte de quantidade de movimento, para um escoamento incompressível, não é simples, pois não existe uma equação independente para a pressão, cujo gradiente contribui para cada uma das equações de transporte de quantidade de movimento. De facto, se cada uma destas equações determina uma das componentes do vector velocidade, resta a equação da continuidade, que não inclui a pressão, para obter esta. Este aparente contra-senso compreende-se se tivermos presente que o papel da pressão nos escoamentos incompressíveis é o de fazer com que a continuidade seja satisfeita, conforme é demonstrado em Ferziger and Perić (1996). A forma como é tratada a equação da continuidade é uma característica dos algoritmos usados. Neste trabalho, usámos dois: o algoritmo SIMPLE, de Patankar and Spalding (1972), e um algoritmo semi-implícito.

2.5.1 Algoritmo SIMPLE

Este algoritmo baseia-se num processo iterativo aplicável à resolução de escoamentos em regime estacionário ou em regime transiente, desde que se use um esquema de integração temporal implícito.

Cada uma das equações diferenciais que compõem o modelo matemático, depois de discretizadas, dá origem a um sistema de equações algébricas com a forma

$$A_P^\phi \phi_P^{n+1} + \sum_l A_l^\phi \phi_l^{n+1} = Q_\phi^{n+1}, \quad l = E, W, N, S, \dots, \quad (2.53)$$

em que o expoente $n + 1$ se refere ao instante de tempo. Os coeficientes que compõem a matriz $\mathcal{A}^\phi$ podem incluir contribuições dos termos transiente, convectivo, difusivo e de produção/destruição. Quaisquer contribuições que não sejam contabilizadas por eles são incluídas no termo fonte Q_ϕ . Da equação da continuidade deriva uma equação para a correcção de pressão, também com a forma (2.53). Cada um dos sistemas de equações algébricas, associado a uma equação diferencial do modelo matemático, é resolvido em separado dos demais. Como as equações que constituem o modelo matemático não são, por via de regra, lineares e segregadas, a matriz $\mathcal{A}^\phi$ e o termo fonte Q_ϕ necessitam de ser calculados em cada iteração. Uma descrição mais detalhada deste algoritmo pode ser encontrada em Patankar (1980).

Os sistemas de equações obtidos, quando se usa este algoritmo, são resolvidos por métodos iterativos. É condição suficiente, para que alguns desses métodos convirjam, que a matriz $\mathcal{A}^\phi$ seja diagonal dominante ($A_P^\phi \geq \sum_l |A_l^\phi|$). Tal só pode ser garantido se na discretização dos termos convectivos usarmos a interpolação de montante ou o esquema híbrido, o que poderia limitar a ordem de precisão conseguida. Uma das formas de resolver este problema, sugerida por Khosla and Rubin (1974), é a *correção diferida*: a matriz de coeficientes $\mathcal{A}^\phi$ é calculada usando a interpolação de montante e inclui-se no termo fonte a diferença, na iteração anterior, entre os fluxos convectivos calculados com o esquema de interpolação que pretendemos usar e os mesmos fluxos calculados com a interpolação de montante.

No cálculo dos fluxos mássicos nas faces dos volumes de controlo, usámos o esquema de interpolação sugerido por Rhie and Chow (1983). Este esquema permite evitar as dificuldades de acoplamento pressão/velocidade e as oscilações da pressão que podem ocorrer quando se usam malhas não-desfasadas (Patankar, 1980; Miller and Schmidt, 1988). Consideremos, primeiro, o caso da malha Cartesiana e, a título de exemplo, a face 'e' do volume de controlo:

$$\dot{m}_e = \int_{S_e} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx (\rho u S)_e.$$

Assim, apenas é necessário aproximar a componente u da velocidade. Os valores nos nós

são obtidos da resolução de um sistema de equações com a forma

$$u_p^{m*} = \frac{Q_u^{m-1} - \sum_l A_l^u u_l^{m*}}{A_p^u},$$

em que o índice m se refere à iteração global. A sugestão de Rhie and Chow (1983) é que a velocidade u_e^{m*} , por exemplo, seja aproximada por

$$u_e^{m*} = \overline{(u^{m*})_e} - \Delta V_e \overline{\left(\frac{1}{A_p^u}\right)_e} \left[\left(\frac{\delta p}{\delta x}\right)_e - \overline{\left(\frac{\delta p}{\delta x}\right)_e} \right]^{m-1},$$

em que a barra superior significa interpolação entre os nós P e E. De modo semelhante ao algoritmo SIMPLE original, a pressão, após a resolução da equação de correcção de pressão, é corrigida por

$$p^m = p^{m-1} + \alpha_p p', \quad (2.54)$$

em que a correcção é sub-relaxada (sendo α_p o coeficiente de sub-relaxação), para melhorar a taxa de convergência. A velocidade nos nós é corrigida por

$$u_i^m = u_i^{m*} + u_i'$$

e a velocidade nas faces, por

$$u_e^m = u_e^{m*} + u_e'.$$

A correcção da velocidade nos nós relaciona-se com a correcção de pressão por

$$u_i' = -\Delta V \frac{1}{A_p^{u_i}} \frac{\delta p'}{\delta x_i} \quad (2.55)$$

e a correcção da velocidade na face 'e', por

$$u_e' = -\Delta V_e \overline{\left(\frac{1}{A_p^u}\right)_e} \left(\frac{\delta p'}{\delta x}\right)_e. \quad (2.56)$$

Miller and Schmidt (1988) usam a fórmula de correcção da velocidade na face (2.56) e obtêm resultados, em regime permanente, que dependem dos factores de sub-relaxação. Su-gerem, por via disso, fórmulas de correcção alternativas, que permitem obter resultados sem essa dependência. No entanto, a diferença entre soluções obtidas usando a fórmula (2.56) e factores de sub-relaxação diferentes é sempre muito inferior ao erro de discretização (Fer-ziger and Perić, 1996); por seu turno, o uso das fórmulas de correcção propostas por Miller and Schmidt (1988) em escoamentos em regime transiente obrigaria a guardar também os valores dos caudais mássicos nas faces em instantes de tempo anteriores. Por isso, preferimos esta abordagem.

Caso a malha seja não-ortogonal, o caudal na face 'e' é dado por

$$\dot{m}_e = \int_{S_e} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \approx \rho_e \sum_i (u_i S_i)_e.$$

Neste caso, é necessário aproximar todas as componentes do vector velocidade. Seguindo a proposta de Rhie and Chow (1983), o caudal na face 'e', por exemplo, é calculado por

$$\dot{m}_e^* = \rho_e \sum_i [(\overline{u_i^{m*}})_e S_e^i] - \rho_e \Delta V_e \sum_i \left[\left(\frac{1}{A_P^{u_i}} \right)_e S_e^i \right] \cdot \left[\left(\frac{\delta p}{\delta \xi} \right)_e - \left(\frac{\delta p}{\delta \xi} \right)_e \right]^{m-1}.$$

As correcções do campo de pressão e de velocidade são idênticas às definidas em (2.54) e (2.55). Em vez da correcção da velocidade na face, existe uma correcção do caudal, em tudo idêntica:

$$\dot{m}_e = \dot{m}_e^* + \dot{m}_e'$$

A relação entre a correcção da velocidade e a da pressão também é semelhante à definida em (2.55), para malhas Cartesianas. A correcção do caudal na face 'e' é

$$\dot{m}_e' = -\rho_e \Delta V_e \sum_i \left[\left(\frac{1}{A_P^{u_i}} \right)_e S_e^i \right] \cdot \left(\frac{\delta p'}{\delta \xi} \right)_e. \quad (2.57)$$

Esta definição, da correcção do caudal nas faces, diminui a taxa de convergência do algoritmo se o ângulo entre as direcções ξ e n (normal à face do volume de controlo) for superior a 45° (Ferziger and Perić, 1996); no entanto isso não se verificou neste trabalho.

2.5.2 Algoritmo Semi-Implicito

Já referimos que, quando usámos as abordagens da simulação numérica directa e da simulação das grandes escalas da turbulência, optámos por esquemas de integração temporal explícitos. Usámos um método semi-implícito, que pode ser visto como um caso particular do método do passo fraccionado (*fractional step*) de Kim and Moin (1985). Consideremos a equação (2.2), escrita na forma semi-discreta, para salientar a independência deste método dos esquemas de discretização espaciais:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} = -\frac{\delta(\rho u_i u_j)}{\delta x_j} + \frac{\delta \tau_{ij}}{\delta x_j} - \frac{\delta p}{\delta x_i} = H_i - \frac{\delta p}{\delta x_i}.$$

Fazendo a integração temporal, obtemos

$$(\rho u_i)^{n+1} - (\rho u_i)^n = \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} H_i dt}_A - \underbrace{\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\delta p}{\delta x_i} dt}_B. \quad (2.58)$$

O cálculo de u_i^{n+1} por (2.58) divide-se em dois passos: no primeiro passo, calcula-se o integral A e pode fazer-se também uma estimativa do integral B. No nosso caso, o integral A foi calculado usando o método de Adams-Bashfort ou o método de Runge-Kutta (4,3); para estimar o integral B, socorremo-nos do método de Euler explícito:

$$(\rho u_i^*)^{n+1} = (\rho u_i)^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} H_i dt - \Delta t \frac{\delta p^n}{\delta x_i}. \quad (2.59)$$

Tal como no algoritmo SIMPLE, também aqui é necessário um procedimento especial para calcular os fluxos mássicos nas faces dos volumes de controlo. No caso da face 'e', por exemplo, caso a malha seja Cartesiana, após o cálculo de u_i^{*n+1} por (2.59), é calculada uma velocidade u_e^{*n+1} por

$$u_e^{*n+1} = \overline{(u_i^{*n+1})}_e - \Delta t \left[\left(\frac{\delta p^n}{\delta x} \right)_e - \overline{\left(\frac{\delta p^n}{\delta x} \right)}_e \right].$$

Caso a malha seja não-ortogonal, é calculado um caudal $\dot{m}_e^{*n+1}$ por

$$\dot{m}_e^{*n+1} = \rho_e \sum_i \left\{ \overline{(u_i^{*n+1})}_e S_e^i - \Delta t S_e^i \left[\left(\frac{\delta p^n}{\delta x_i} \right)_e - \overline{\left(\frac{\delta p^n}{\delta x_i} \right)}_e \right] \right\}.$$

O campo de velocidade u_i^{*n+1} não satisfaz a equação da continuidade; o segundo passo deste algoritmo é a determinação de um campo de pressão tal que o campo de velocidade u_i^{n+1} , obtido de

$$(\rho u_i)^{n+1} = (\rho u_i^*)^{n+1} - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\delta(p - p^n)}{\delta x_i} dt,$$

satisfaça a equação da continuidade. Usando o método de Euler implícito nesta integração e definindo uma correcção de pressão p' tal que

$$p^{n+1} = p^n + p',$$

o campo de velocidade u_i^{n+1} é obtido por

$$(\rho u_i)^{n+1} = (\rho u_i^*)^{n+1} - \Delta t \frac{\delta p'}{\delta x_i}. \quad (2.60)$$

No caso da malha Cartesiana, a velocidade u_e^{n+1} é calculada de

$$u_e^{n+1} = u_e^{*n+1} - \Delta t \left(\frac{\delta p'}{\delta x} \right)_e. \quad (2.61)$$

Caso a malha seja não-ortogonal, o caudal $\dot{m}_e^{n+1}$ determina-se por

$$\dot{m}_e^{n+1} = \dot{m}_e^{*n+1} - \rho_e \Delta t \sum_i \left[S_e^i \left(\frac{\delta p'}{\delta x_i} \right)_e \right]. \quad (2.62)$$

O sistema de equações que permite determinar a correcção de pressão p' obtém-se obrigando os fluxos mássicos calculados a partir de (2.61) ou de (2.62), conforme a malha seja Cartesiana ou não-ortogonal, a satisfazer a equação da continuidade discretizada (2.41). A única vantagem de incluir a estimativa do integral do gradiente de pressão (fórmula 2.58, integral B) no cálculo de u_i^{*n+1} é melhorar a eficiência do método de resolução deste sistema de equações. Caso seja usado um método que não tire benefício disso, pode optar-se por não incluir essa estimativa e determinar na resolução do sistema de equações a pressão p^{n+1} .

2.6 Resolução de Sistemas de Equações Lineares

Em qualquer dos algoritmos utilizados, é necessário resolver sistemas de equações lineares. No caso do algoritmo SIMPLE, os sistemas de equações resultam da utilização de esquemas de discretização temporal implícitos e da equação de correcção de pressão; no caso do algoritmo semi-implícito, resultam apenas da equação de correcção de pressão.

Os métodos para obter a solução de sistemas de equações dividem-se em duas categorias: directos e iterativos. Os métodos directos têm pouca utilização em mecânica de fluidos computacional, devido ao seu elevado custo (tempo e memória). Por outro lado, o erro dos esquemas de discretização é maior que a precisão do computador, de modo que não se justifica a procura de uma solução com essa precisão, sendo preferíveis os métodos iterativos. Estes podem subdividir-se em duas categorias: estacionários e não-estacionários. Alguns dos métodos estacionários aproveitam as características particulares das matrizes resultantes da discretização de equações diferenciais (esparsidade). Os métodos estacionários têm um número de operações por iteração menor, mas a taxa de redução do resíduo também é mais baixa. Os métodos não-estacionários apenas são eficazes com a utilização de um pré-condicionador, de modo a transformar a matriz dos coeficientes em uma outra com propriedades espectrais mais favoráveis (Barrett et al., 1994).

2.6.1 Comparação de Algoritmos de Resolução de Sistemas de Equações Lineares

No caso do algoritmo SIMPLE, em que os sistemas de equações a resolver resultam da linearização e segregação das equações diferenciais do modelo matemático, não faz sentido utilizar um método que proporcione uma taxa de redução do resíduo elevada, à custa de um esforço computacional significativo. Como posteriormente é necessário voltar a resolver o sistema com coeficientes actualizados, reveste mais interesse um método que proporcione uma boa taxa de convergência, mas sem grande esforço computacional. Este facto levou a que optássemos pelo método TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*), sugerido por Patankar (1980).

No caso do algoritmo semi-implícito, o único sistema de equações que é necessário resolver é linear e a matriz de coeficientes não varia com o tempo, o que favorece a utilização de um método não-estacionário. No entanto, como a variação da pressão entre intervalos de tempo não é muito grande, os métodos estacionários também podem ser competitivos, se forem capazes de resolver o sistema efectuando poucas iterações. Para determinar qual o mais adequado, comparámos o desempenho dos métodos TDMA, SOR (*Successive Over-Relaxation*), SIP (*Strongly Implicit Procedure*) — estacionários — e Bi-CGSTAB (*BiConjugate Gradient Stabilized*), QMR (*Quasi-Minimal Residual*) e GMRES (*Generalized Minimal Residual*) — não-estacionários. Na comparação, servimo-nos de um programa de simulação das grandes escalas da turbulência, descrito no capítulo 3 (simulação LES3, tabela 3.1, na página 43). Para a comparação, foi considerada a simulação do escoamento entre $t = 0$ e 1 (valores adimensionalizados), sendo o campo inicial um escoamento potencial. Deste modo, o intervalo considerado incluía o período de desenvolvimento do escoamento, em que são maiores as alterações do campo de pressão e necessárias mais iterações.

Conforme já referimos, os métodos não-estacionários são acompanhados do uso de um pré-condicionador. A escolha deste é tão ou mais vasta que a escolha do próprio método de resolução do sistema de equações. O compromisso tem de obter-se considerando o tempo despendido na construção e na aplicação do pré-condicionador, a memória utilizada por ele e a redução do número de iterações. No caso das matrizes de coeficientes resultantes da discretização de equações diferenciais (esparsas), interessa utilizar métodos de factorização incompleta, que tentam aproximar a matriz inversa, mantendo a esparsidade. É também possível usar um método estacionário como pré-condicionador, caso em que se torna mais óbvio que a utilização do método não-estacionário só é vantajosa quando houver uma redução significativa do número de iterações. Preferimos a decomposição incompleta de Choleski, na sequência da comparação com as decomposições ILU(0) (*Incomplete LU factorization with Zero fill in*) e ILUT (*Incomplete LU factorization Threshold*), pois foi a que proporcionou maior ganho de tempo e a que necessitou de menos memória.

Após a realização das simulações, o método SIP foi o escolhido, por se ter revelado o mais rápido, embora haja sido o que necessitou de mais memória (tabela 2.1). Tanto este método como os não-estacionários, após o período de desenvolvimento do escoamento, necessitavam de apenas uma ou duas iterações para proporcionar uma solução que satisfizesse o resíduo pretendido. O método GMRES foi utilizado com uma dimensão do subespaço de Krylov de 11, suficiente para resolver os primeiros instantes da simulação, sem que tivesse de ser reiniciado. Esta solução revelou-se mais favorável (em termos de desempenho) do que o emprego de uma dimensão menor, efectuando reinícios. De qualquer modo, o método não convergia quando se usava um subespaço de dimensão inferior a oito. Usando um pré-condicionador como a decomposição incompleta de Choleski, que é o produto de duas matrizes, uma triangular inferior e outra triangular superior, o método QMR pode ser pré-condicionado à esquerda, à direita ou de ambos os lados. A diferença, em termos de desempenho e da memória utilizada, não foi significativa, mas o

Algoritmo	Tempo	Memória
TDMA	72 min	13.4 Mb
SOR	64 min	14.0 Mb
SIP	58 min	17.5 Mb
Bi-CGSTAB	60 min	14.0 Mb
QMR	63 min	14.1 Mb
GMRES(11)	61 min	14.1 Mb

Tabela 2.1: Tempo de execução e memória utilizada pelos programas de teste dos algoritmos de resolução de sistemas de equações.

pré-condicionamento de ambos os lados apresentou uma taxa de convergência mais constante que o pré-condicionamento à esquerda, por sua vez superior ao pré-condicionamento à direita (menor variação do número de iterações em cada intervalo de tempo, após o período de desenvolvimento do escoamento).

Por último, cabe referir que os métodos multi-malha (*multi-grid*), de grande utilização nos dias de hoje, não apresentam vantagens na resolução de escoamentos em regime transiente, porque as diferenças entre as soluções de dois instantes de tempo consecutivos são mais significativas nas frequências mais elevadas.

O processo de selecção do algoritmo de resolução dos sistemas de equações lineares acabado de descrever destinou-se a um programa versátil, capaz de simular escoamentos usando malhas com espaçamento não-uniforme e com quaisquer condições fronteira. No caso descrito no capítulo 5, tirou-se partido das características particulares do problema (malha uniformemente espaçada e condições periódicas em todas as direcções) e utilizou-se um algoritmo mais especializado e mais eficiente (mais rápido e carecido de menos memória). Esse algoritmo será referido nesse capítulo 5.

Capítulo 3

Simulação do Escoamento em Torno de um Prisma de Secção Quadrada: Comparação dos Métodos RaNS e LES

Conteúdo do Capítulo

Neste capítulo, apresentamos simulações do escoamento turbulento em torno de um prisma de secção quadrada, com $Re = 21400$, usando os métodos das médias de Reynolds (RaNS) e das grandes escalas da turbulência (LES). As simulações realizadas com o método das médias de Reynolds compararam o desempenho do modelo $k-\varepsilon$ na sua formulação original, com uma alteração no termo de produção de dissipação e com duas aproximações distintas para o termo de produção de energia cinética da turbulência. Os resultados das simulações que usaram este método não previram correctamente a zona de recirculação e subestimaram as tensões de Reynolds. As simulações realizadas com o método das grandes escalas da turbulência usaram o modelo de Smagorinsky, dois esquemas de discretização temporal e duas malhas, distintas na resolução junto das faces do prisma. Os resultados das simulações com este método revelaram-se superiores aos das simulações com o método das médias de Reynolds, particularmente na zona de recirculação. Algumas deficiências que observámos na comparação com resultados experimentais deveram-se, cremos, a uma resolução insuficiente da malha de cálculo junto das faces do prisma.

3.1 Introdução

O escoamento em torno de corpos não-fuselados inclui, por via de regra, fenómenos como separação, recolamento e desprendimento de vórtices. O seu estudo é interessante, não só devido a esta variedade de fenómenos, mas também porque são comuns escoamentos com características semelhantes, como, por exemplo, o escoamento do vento em redor de edifícios e o escoamento em torno de perfis alares.

O escoamento em torno de um prisma de secção quadrada não tem merecido tanta atenção quanta o escoamento em torno de um cilindro. De entre os estudos experimentais do escoamento em torno do prisma, destacamos o de Durão et al. (1988), que tentou separar o escoamento quase periódico das grandes escalas do escoamento turbulento utilizando um filtro passa-alto, e os de Lyn and Rodi (1994) e de Lyn et al. (1995), nos quais essa separação foi conseguida usando um sinal da pressão filtrado. Com a utilização crescente dos métodos numéricos, este escoamento tem recebido mais atenção. Destacamos o trabalho de Rodi (1993), que inclui resultados numéricos de vários autores usando principalmente modelos de turbulência estatísticos, o de Rodi et al. (1997), no qual são discutidos os resultados de uma conferência que utiliza este escoamento como referência para simulações com o método das grandes escalas da turbulência (LES), e o de Sohankar et al. (1999), em que é estudado o escoamento com números de Reynolds moderados. Além disso, o escoamento em torno do prisma é reconhecido por Jiménez (1998) como sendo adequado para a validação de códigos que usem o método da simulação das grandes escalas da turbulência.

A disponibilidade de dados experimentais é essencial para que seja possível avaliar correctamente os resultados das simulações. No caso do escoamento turbulento em torno do prisma de secção quadrada, as únicas medições pormenorizadas da velocidade são as de Durão et al. (1988) e as de Lyn and Rodi (1994) e Lyn et al. (1995). Estas últimas são mais adequadas para a comparação com resultados numéricos, porque incluem informação sobre médias de fase, enquanto as de Durão et al. (1988) contêm apenas médias temporais.

Apesar de um maior estudo recente, a aplicação de modelos de turbulência estatísticos a este escoamento — nomeadamente o modelo $k-\epsilon$ — ainda não pode ser considerada como totalmente bem sucedida. Tal acontece porque o modelo foi calibrado em escoamentos com características diferentes do escoamento em torno de um prisma de secção quadrada; como os turbilhões maiores dependem fortemente da geometria, verifica-se que alguns fenómenos não são correctamente modelados (e.g., a produção de turbulência na zona frontal do prisma). Consegue-se, eventualmente, ultrapassar esta situação introduzindo algumas alterações para que o modelo possa reproduzir melhor esses fenómenos. Neste trabalho, comparámos o desempenho do modelo original com a variante sugerida e aplicada a este escoamento por Kato and Launder (1993) e com as variantes sugeridas por Jin and Braza (1994) e por Leschziner and Rodi (1981), que não tinham ainda sido testadas nele. No entanto, nenhuma destas variantes proporcionou previsões significativamente melhores das tensões de Reynolds, embora tenham beneficiado outros aspectos do escoamento.

O método das grandes escalas da turbulência apresenta a vantagem de apenas as escalas menores, que não dependem da geometria, necessitarem de um modelo. Este método permitiu obter resultados superiores aos do modelo $k-\varepsilon$, nomeadamente na zona de recirculação e na sua vizinhança. No entanto, a existência de um escoamento laminar na frente do prisma, de uma zona de transição na camada descolada e de um escoamento turbulento na esteira, obriga o modelo de tensões residuais a tratar adequadamente todos esses fenómenos, o que nem sempre é possível. Esta será uma das razões porque os resultados obtidos na esteira patentearam algum desacordo com as medições experimentais. Por outro lado, este método é mais exigente na resolução da malha e os resultados obtidos junto das faces do prisma mostraram que aquela que utilizámos foi insuficiente.

3.2 Métodos

Como é uso no estudo do escoamento em torno do prisma de secção quadrada, todos os dados apresentados foram adimensionalizados usando o comprimento da aresta do quadrado (D), a velocidade do escoamento incidente (U) e a massa específica (ρ). Deste modo, as quantidades adimensionalizadas são dadas por:

$$t = \frac{\tilde{t} U}{D}, \quad x = \frac{\tilde{x}}{D}, \quad y = \frac{\tilde{y}}{D}, \quad z = \frac{\tilde{z}}{D},$$

$$u = \frac{\tilde{u}}{U}, \quad v = \frac{\tilde{v}}{U}, \quad w = \frac{\tilde{w}}{U}, \quad p = \frac{\tilde{p}}{\frac{1}{2}\rho U^2}.$$

Como os modelos matemáticos e os métodos numéricos já foram descritos em pormenor no capítulo 2, referiremos aqui apenas os que usámos para a realização das simulações descritas neste capítulo.

3.2.1 Modelos Matemáticos e Algoritmos

As equações diferenciais do modelo matemático do método das médias de Reynolds (RaNS) são a equação da continuidade (2.4) e as equações de transporte de quantidade de movimento (2.5). O modelo de turbulência $k-\varepsilon$ é definido pelas equações (2.6) a (2.9); utilizámos também as variantes propostas por Kato and Launder (1993), Jin and Braza (1994) e Leschziner and Rodi (1981), referidas no capítulo 2, secções 2.2.1.2, 2.2.1.3 e 2.2.1.4, respectivamente. Para a integração destas equações, servimo-nos do algoritmo SIMPLE para malhas não-desfasadas e escoamentos em regime transiente, com um coeficiente de sub-relaxação da correcção de pressão $\alpha_p = 0.7$.

O método das grandes escalas da turbulência é constituído pelas equações diferenciais da continuidade e de transporte de quantidade de movimento, respectivamente (2.15) e

(2.16). O modelo de tensões residuais utilizado foi o modelo de Smagorinsky, definido pelas expressões (2.17) a (2.19), e considerámos $C_s = 0.1$, conforme a sugestão de Breuer and Pourquié (1996). Junto das faces do prisma, utilizámos a função de van Driest, definida por (2.20). Para a integração das equações, valemo-nos do algoritmo semi-implícito descrito na secção 2.5.2.

3.2.2 Métodos Numéricos

Para o cálculo dos fluxos convectivos, empregámos em todas as simulações do método das médias de Reynolds, excepto na que usou a variante do modelo $k-\varepsilon$ sugerida por Leschziner and Rodi (1981), o esquema QUICK (2.35) (via correcção diferida) nas equações de transporte de quantidade de movimento e o esquema híbrido nas equações de transporte de k e de ε . Na simulação com a variante do modelo $k-\varepsilon$ sugerida por Leschziner and Rodi (1981), recorremos exclusivamente ao esquema híbrido, por razões que explicitaremos adiante. Os fluxos difusivos foram sempre calculados usando diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão.

Na discretização temporal, empregámos o método implícito de três níveis (2.24) e o método de Euler implícito (2.23), este último na simulação com a variante sugerida por Leschziner and Rodi (1981), porque considerámos não ser consistente usar um esquema de discretização temporal de ordem superior ao utilizado na discretização espacial. Os sistemas de equações lineares foram resolvidos usando o algoritmo TDMA, com quatro varrimentos para a correcção de pressão e dois para as restantes variáveis.

No método das grandes escalas da turbulência, empregámos as diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão no cálculo dos fluxos convectivos e difusivos. A discretização temporal foi realizada com os métodos de Adams-Bashfort de segunda ordem (2.26) e de Runge-Kutta (4,3) (2.27). Na resolução do sistema de equações, servimo-nos do algoritmo SIP.

3.2.3 Domínio de Cálculo

O domínio de cálculo considerado em ambos os métodos foi semelhante, salvo o facto de ser bidimensional no método das médias de Reynolds e tridimensional no método das grandes escalas da turbulência. As suas dimensões eram $4.5D$ em frente do prisma, $14.5D$ atrás e $14D$ na direcção vertical (em que D é o comprimento da aresta do quadrado, conforme referimos). No caso do método das grandes escalas da turbulência, a dimensão na direcção do eixo do prisma foi $4D$.

As malhas utilizadas foram geradas de modo idêntico: impondo a dimensão na direcção normal às faces do prisma dos volumes de controlo adjacentes (Δn) e um factor de expansão máximo de 1.1. Para os cálculos com o método das médias de Reynolds impôs-se

$\Delta n = D/50$. No caso do método das grandes escalas da turbulência, foram utilizadas duas malhas: a malha 1, com $\Delta n = D/100$, e a malha 2, com $\Delta n = D/200$. Daqui resultaram malhas com 83×78 nós, para o método das médias de Reynolds (16 nós junto de cada face do prisma), e com $109 \times 105 \times 16$ e $132 \times 126 \times 16$ nós, para o método das grandes escalas da turbulência (29 e 36 nós junto das faces do prisma, respectivamente). Para o método das médias de Reynolds, o passo de integração temporal foi $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$. Para o método das grandes escalas da turbulência, com o esquema de Adams-Bashfort, usámos $\Delta t_{\text{malha 1}} = 1 \times 10^{-3}$ e $\Delta t_{\text{malha 2}} = 4 \times 10^{-4}$; com o esquema de Runge-Kutta (4,3), os passos cifraram-se no dobro destes ($\Delta t_{\text{malha 1}} = 2 \times 10^{-3}$ e $\Delta t_{\text{malha 2}} = 8 \times 10^{-4}$).

3.2.4 Condições de Fronteira

Na fronteira de entrada do domínio, foi adoptado um perfil de velocidade uniforme ($u = 1$, $v = 0$ e $w = 0$); nos cálculos com o modelo $k-\varepsilon$, considerou-se uma intensidade de turbulência de 2% e uma dissipação da energia cinética da turbulência tal que $\nu_t = 10\nu$ (a que corresponde um tamanho característico dos turbilhões $\ell \approx D/4$); nos cálculos com o método das grandes escalas da turbulência, não foi imposta qualquer turbulência. Na secção de saída, foi usada a condição convectiva $\partial\phi/\partial t + c\partial\phi/\partial x = 0$, em que c é a velocidade média e ϕ representa qualquer das variáveis, excepto a pressão (u , v , w , k ou ε). Nas fronteiras superior e inferior, optámos por uma condição de escorregamento livre. Na direcção do eixo do prisma, apenas simulada no caso do método das grandes escalas da turbulência, utilizámos condições periódicas. Junto das faces do prisma, foram usadas leis de parede: no método das médias de Reynolds, as propostas por Launder and Spalding (1974), e no método das grandes escalas da turbulência, as de Werner and Wengle (1991).

Em relação à pressão, nas secções de entrada e de saída e nas superfícies superior e inferior do domínio, pressupôs-se que era nula a sua variação na direcção normal ($\partial p/\partial n = 0$). No caso das simulações com o método das grandes escalas da turbulência, usaram-se condições periódicas na direcção do eixo do prisma. Junto das faces do prisma, utilizou-se uma condição obtida das equações de Navier-Stokes, supondo nulos os termos transiente e de transporte convectivo.

3.2.5 Cálculo das Médias de Fase

Como o escoamento em torno do prisma de secção quadrada é quase periódico, foi necessário definir uma referência para o decompor em fases. Para isso, utilizámos a pressão a meio da face superior, tal como em Lyn and Rodi (1994) e em Lyn et al. (1995). No método das médias de Reynolds, utilizámos directamente a pressão calculada; no método das grandes escalas da turbulência, recorreremos a um procedimento que tentou reproduzir a operação de filtragem descrita em Lyn and Rodi (1994): calculámos a transformada de Fourier da pressão e rejeitámos as componentes com uma frequência superior à frequência de corte do

filtro passa-baixo usado naquele trabalho. A transformada inversa dessa pressão filtrada foi calculada e considerou-se estar associada ao desprendimento de vórtices das grandes escalas.

Uma dificuldade acrescida no cálculo das médias de fase é o facto de o escoamento não ser completamente periódico, mas apenas quase periódico. De facto, o tempo entre dois desprendimentos varia. Para ultrapassar este problema, as fases foram definidas a partir dos máximos do sinal de referência e o tempo entre eles foi dividido em 20 intervalos de tempo iguais, tal como em Lyn and Rodi (1994) e em Lyn et al. (1995). Em cada um desses intervalos, foram calculadas médias. Adicionalmente, foi calculada uma média das médias de fase, que resultou numa média temporal.

3.3 Resultados e Discussão

Todas as simulações descritas neste capítulo foram iniciadas a partir da solução de escoamento potencial obtida na mesma malha. O tempo simulado necessário para o fenómeno de desprendimento de vórtices se desenvolver completamente dependeu do método e da malha usada. Considerámos o desprendimento de vórtices completamente estabelecido quando os coeficientes de arrasto (C_d) e de sustentação (C_l) mostraram uma evolução periódica com amplitude quase constante. Após esse desenvolvimento, as simulações foram continuadas pelo tempo suficiente para se efectuarem médias significativas: no caso das simulações com o modelo $k-\varepsilon$, um ciclo completo de desprendimento de vórtices; no das simulações com o método das grandes escalas da turbulência, 13 ciclos.

Foi a evolução dos coeficientes C_d e C_l , também, que nos levou a rejeitar os resultados de uma simulação, realizada usando o modelo $k-\varepsilon$ com a definição de P_ε proposta por Leschziner and Rodi (1981) e o esquema QUICK para a interpolação da velocidade nas faces. Comparando a evolução desses coeficientes com a obtida em uma simulação idêntica, mas com o esquema híbrido para a interpolação da velocidade nas faces, verificámos que a simulação realizada com o esquema QUICK apresentou oscilações com um período e uma amplitude irregulares (figura 3.1). Além disso, na simulação realizada com o esquema QUICK, o coeficiente de arrasto médio e as amplitudes de oscilação de ambos os coeficientes não estavam em consonância com os valores conhecidos de trabalhos experimentais. Por estas razões, rejeitámos os resultados da simulação realizada com o esquema QUICK; incluímos aqui os resultados obtidos com o esquema híbrido, mas não deixámos de considerar este comportamento como anómalo: um modelo de turbulência não deve depender da dissipação introduzida artificialmente por um esquema de discretização para produzir resultados fisicamente realistas.

Para facilitar referências doravante feitas às diferentes simulações realizadas, incluímos a tabela 3.1, na qual definimos abreviaturas para cada uma delas, em função das características que as diferenciaram.

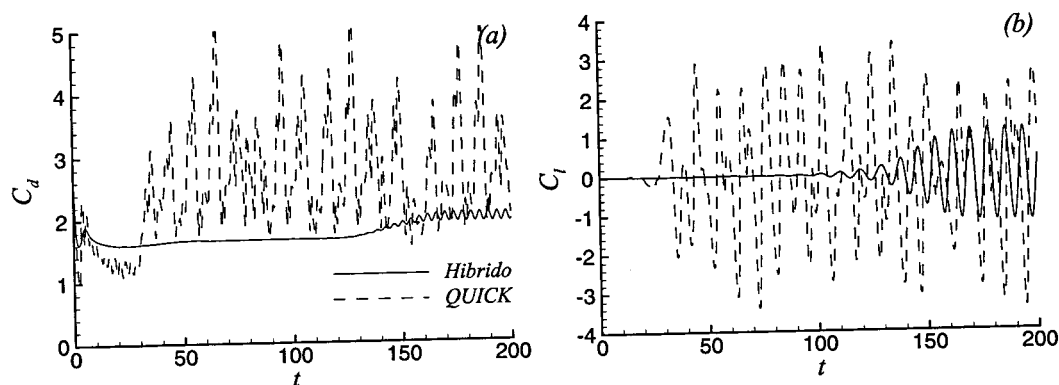


Figura 3.1: Evolução temporal dos coeficientes de arrasto (a) e de sustentação (b) de duas simulações realizadas com o modelo $k-\varepsilon$, a definição de P_ε proposta por Leschziner and Rodi (1981) e esquemas distintos de interpolação da velocidade nas faces.

Simulação	Características
RaNS1	Modelo $k-\varepsilon$ original
RaNS2	P_ε conforme proposta de Leschziner and Rodi (1981)
RaNS3	P_k conforme proposta de Kato and Launder (1993)
RaNS4	P_k conforme proposta de Jin and Braza (1994)
LES1	Adams-Bashfort e malha 1
LES2	Adams-Bashfort e malha 2
LES3	Runge-Kutta (4,3) e malha 1
LES4	Runge-Kutta (4,3) e malha 2

Tabela 3.1: Características das simulações realizadas. Malha 1: $109 \times 105 \times 16$ nós; malha 2: $132 \times 126 \times 16$ nós.

A comparação de alguns parâmetros integrais (tabela 3.2) mostrou que as simulações realizadas com o modelo $k-\varepsilon$ não foram capazes de prever devidamente as oscilações do coeficiente de arrasto (a melhor estimativa de $C_{d_{rms}}$ foi pelo menos duas vezes menor que os valores experimentais) e que sobestimaram o comprimento da zona de recirculação (entre 1.2 a 2 vezes). Tal ficou a dever-se à previsão incorrecta do fenómeno de desprendimento dos vórtices: é ele que causa a flutuação dos coeficientes de arrasto e de sustentação e que, por ser o maior responsável pela troca de quantidade de movimento na esteira do prisma, determina o comprimento da zona de recirculação. A simulação RaNS1, que usou o modelo $k-\varepsilon$ original, foi a que proporcionou as piores previsões para todos os parâmetros, excepto o número de Strouhal. Deste modo, confirmou-se que o modelo $k-\varepsilon$ original não é adequado para a resolução deste escoamento.

As simulações realizadas com o método das grandes escalas da turbulência proporcionaram melhores previsões para as flutuações dos coeficientes de arrasto e de sustentação ($C_{d_{rms}}$ e $C_{l_{rms}}$ estão de acordo com, pelo menos, dois trabalhos experimentais) e, principal-

	St	$\bar{C}_d$	$C_{d_{rms}}$	$C_{l_{rms}}$	$\bar{\ell}_r$
RaNS1	0.132	1.79	< 0.01	0.34	2.81
RaNS2	0.126	1.99	0.05	0.83	1.64
RaNS3	0.144	2.03	0.02	0.78	2.47
RaNS4	0.136	1.88	< 0.01	0.53	1.89
LES1	0.129	2.16	0.13	1.07	1.32
LES2	0.131	2.28	0.18	1.19	1.22
LES3	0.129	2.18	0.13	1.09	1.30
LES4	0.128	2.29	0.15	1.20	1.33
Lyn et al. (1995)	0.132	2.1			1.38
Durão et al. (1988)	0.138				1.33
Lee (1975)		2.05	0.16 – 0.23		
Vickery (1966)		2.05		0.68 – 1.32	
Cheng et al. (1992)		1.9 – 2.1	0.1 – 0.2	0.1 – 0.6	
McLean and Gartshore (1992)		1.9 – 2.1	0.1 – 0.2	0.7 – 1.4	

Tabela 3.2: Parâmetros integrais obtidos nas simulações e em alguns trabalhos experimentais: número de Strouhal (St), coeficiente de arrasto médio e r.m.s. ($\bar{C}_d$ e $C_{d_{rms}}$), coeficiente de sustentação r.m.s. ($C_{l_{rms}}$) e comprimento médio da zona de recirculação ($\bar{\ell}_r$). Dos resultados experimentais apresentados, apenas os de Lyn et al. (1995) foram obtidos nas mesmas condições. Os outros foram obtidos usando números de Reynolds e intensidades de turbulência do escoamento incidente diferentes e servem apenas para indicar a ordem de grandeza.

mente, para o comprimento da zona de recirculação (as diferenças em relação aos valores experimentais variam entre 4 e 11%). Destaca-se apenas, pela negativa, o arrasto médio haver sido sobrestimado entre 3 e 10% e o erro maior ter sido apresentado pelas simulações LES2 e LES4, em que usámos a malha com maior resolução junto das faces do prisma.

As simulações realizadas com o método das grandes escalas da turbulência mostraram zonas, junto das faces horizontais do prisma, próximo das arestas, com velocidade $\bar{u} > 0$ (figura 3.2). Tal não é confirmado, em qualquer das fases do escoamento, pelos trabalhos experimentais que usámos como referência, sendo de admitir que se trata de uma inconsistência dos nossos resultados. Provavelmente, terá sido devido à utilização de uma malha com resolução insuficiente nessa zona, conforme parecem confirmar as deficientes previsões do campo de velocidade média, das tensões de Reynolds e das tensões periódicas nessa zona do escoamento, adiante referidas.

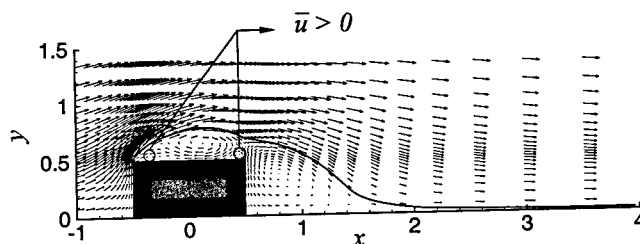


Figura 3.2: Campo de velocidade média e linha de separação média previstos pela simulação LES4; as zonas assinaladas apresentam velocidade $u > 0$.

3.3.1 Perfis da Velocidade Média, Tensões de Reynolds e Periódicas

Comparámos também perfis de velocidade média e de tensões de Reynolds, em várias secções do escoamento. Voke (1996) conclui que a comparação dos resultados em cada uma das 20 fases do ciclo de desprendimento de vórtices nada acrescenta de relevante ao observado aquando da comparação das médias temporais. Por isso, mostraremos apenas estas últimas. Para verificar se a componente periódica do escoamento tinha sido correctamente resolvida, comparámos ainda as tensões periódicas.

3.3.1.1 Secção $y = 0$

A primeira secção utilizada foi a secção $y = 0$, tendo sido comparadas a componente longitudinal da velocidade $\bar{u}$, as tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$ e as tensões periódicas $\tilde{u}\tilde{u}$ e $\tilde{v}\tilde{v}$ (figura 3.3). Antes de passar à discussão dos resultados, pudemos verificar a sua consistência: o escoamento médio temporal devia ser simétrico e, nessa situação, a velocidade $\bar{v}$ e as tensões $\overline{u'v'}$ e $\tilde{u}\tilde{v}$ deviam ser nulas ao longo de toda a secção. Só no caso da tensão periódica $\tilde{u}\tilde{v}$ os valores previstos por ambos os métodos (das médias de Reynolds e das grandes escalas da turbulência) podem considerar-se significativos, pois foram da mesma ordem de grandeza da tensão $\tilde{u}\tilde{u}$ e semelhantes aos medidos experimentalmente (Lyn and Rodi, 1994). No entanto, é de notar que a tensão $\tilde{u}\tilde{u}$ tem valores reduzidos nesta secção do escoamento. No caso da velocidade $\bar{v}$ e da tensão $\overline{u'v'}$, os valores não se afiguraram relevantes, pois foram sempre inferiores aos medidos experimentalmente e bastante menores que a velocidade $\bar{u}$ e que as tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$, respectivamente.

O perfil de velocidade $\bar{u}$ das simulações realizadas com o modelo $k-\varepsilon$ (figura 3.3a.1) mostra a já referida sobreavaliação do comprimento da zona de recirculação. Neste aspecto, as piores simulações foram RaNS1 e RaNS3. A melhor previsão foi a da simulação RaNS2, embora a máxima velocidade negativa tenha sido subestimada (tabela 3.3) e o andamento entre $1.5 < x < 4$ tenha mostrado uma recuperação mais lenta que as medições. À excepção desta, todas as simulações apresentam uma recuperação excessiva da velocidade na esteira

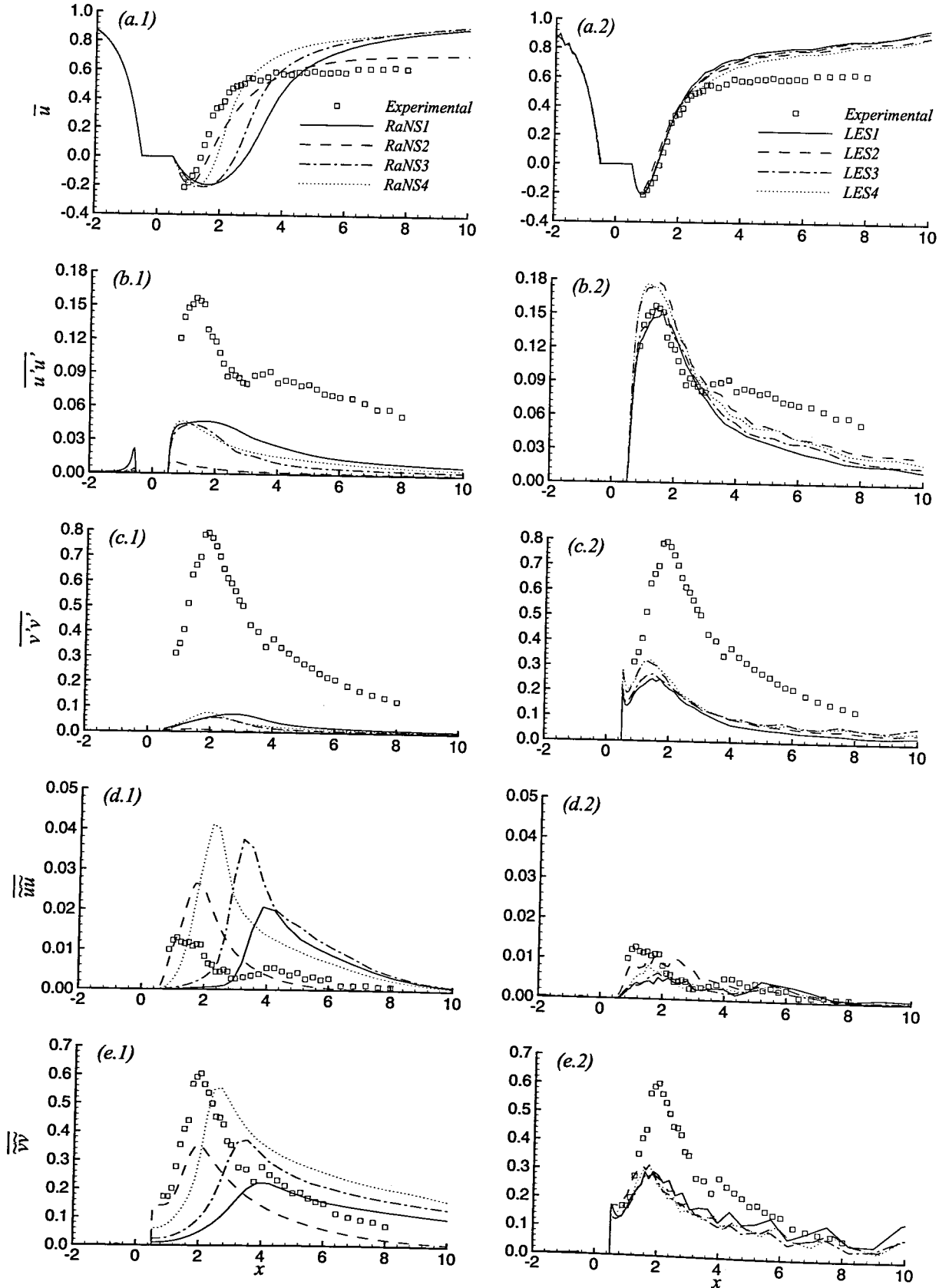


Figura 3.3: Perfis da velocidade média, das tensões de Reynolds e das tensões periódicas, na secção $y = 0$.

	Máximos				
	$-\bar{u}$	$\overline{u'u'}$	$\overline{v'v'}$	$\overline{\tilde{u}\tilde{u}}$	$\overline{\tilde{v}\tilde{v}}$
RaNS1	0.19	0.05	0.07	0.02	0.22
RaNS2	0.19	0.01	0.01	0.03	0.35
RaNS3	0.21	0.04	0.06	0.04	0.37
RaNS4	0.21	0.05	0.08	0.04	0.55
LES1	0.21	0.15	0.25	0.01	0.30
LES2	0.20	0.18	0.32	0.01	0.32
LES3	0.21	0.15	0.27	0.01	0.28
LES4	0.21	0.18	0.32	0.01	0.31
Lyn et al. (1995)	0.21	0.16	0.80	0.01	0.60

Tabela 3.3: Valores máximos da velocidade negativa, das tensões de Reynolds e das tensões periódicas, na secção $y = 0$, previstos pelas simulações e medidos por Lyn et al. (1995).

do prisma.

As tensões turbulentas $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$ a jusante do prisma foram claramente subestimadas pelo modelo $k-\varepsilon$. Relativamente à tensão $\overline{u'u'}$ (figura 3.3b.1), os resultados experimentais atingem o máximo no final da zona de recirculação, pormenor que nenhuma simulação captou, antecipando sempre esse ponto. A simulação RaNS2 previu um valor máximo 25 vezes menor que o medido; os resultados das outras simulações são idênticos entre si, antecipando valores máximos cerca de três vezes menores que o medido. Junto da face frontal, foi visível a deficiência do modelo $k-\varepsilon$ original na resolução de regiões de estagnação: a simulação RaNS1 foi a única a prever valores significativos da tensão $\overline{u'u'}$ nessa zona. Menos satisfatórias foram as previsões da tensão $\overline{v'v'}$ (figura 3.3c.1): as previsões de RaNS2 foram cerca de 100 vezes menores que as medições, enquanto as outras simulações previram valores cerca de 25 vezes menores.

A tensão periódica $\overline{\tilde{u}\tilde{u}}$ medida não mostrou valores significativos: foi da mesma ordem de grandeza de $\overline{\tilde{v}\tilde{v}}$. No entanto, todas as variantes do modelo $k-\varepsilon$ sobrestimaram-na, tendo previsto valores máximos entre duas a quatro vezes maiores que os medidos (figura 3.3d.1). Se considerássemos a soma de $\overline{u'u'}$ e de $\overline{\tilde{u}\tilde{u}}$, teríamos uma tensão mais bem prevista que qualquer uma das duas componentes individualmente consideradas, visto que os erros tinham sinais contrários.

As previsões da tensão $\overline{\tilde{v}\tilde{v}}$ do modelo $k-\varepsilon$ (figura 3.3e.1) foram qualitativamente semelhantes às de $\overline{\tilde{u}\tilde{u}}$, mas escaladas por um factor da ordem de dez. Os máximos foram previstos nos mesmos locais (diferentes entre si) e a ordenação das magnitudes manteve-se. A simulação RaNS4 foi a que previu o máximo mais próximo do medido, embora um pouco deslocado para jusante (1.5D). RaNS2 subestimou sempre esta tensão, enquanto as outras simulações a subestimaram até atingirem o máximo (aproximadamente), sobrestimando-a depois.

As simulações realizadas com o modelo das grandes escalas da turbulência previram correctamente a evolução da velocidade $\bar{u}$ até $x \approx 3$ (figura 3.3a.2). Depois, mostraram uma recuperação excessiva, pois enquanto as medições estabilizam em $\bar{u} \approx 0.6$, as simulações chegaram a atingir $\bar{u} \approx 0.9$. Embora não seja visível na figura, as melhores estimativas para a máxima velocidade negativa na zona de recirculação (tabela 3.3) foram as das simulações que previram o seu comprimento mais correctamente (tabela 3.2). Este comportamento foi consistente, pois indicou uma melhor modelação dessa zona e revelou-se superior ao das variantes do modelo $k-\varepsilon$, em que os dois aspectos nem sempre estavam associados. No entanto, a influência do refinamento da malha neste aspecto foi contraditória: no caso das simulações com o esquema de Adams-Bashfort, o refinamento piorou os resultados; no caso das simulações com o esquema de Runge-Kutta (4,3), melhorou.

Com o método das grandes escalas da turbulência, a previsão da tensão $\overline{u'u'}$ revelou-se acertada até $x \approx 3$ (figura 3.3b.2). O máximo foi correctamente previsto por todas as simulações, mas as que usaram a malha 2 (LES2 e LES4) sobrestimaram-no um pouco. Todas foram incapazes de prever o máximo local em $x \approx 4$, mostrando, à semelhança das diversas variantes do modelo $k-\varepsilon$, uma diminuição constante desde o máximo absoluto, situado em $x \approx 1.5$. No entanto, os resultados parecem ter beneficiado da resolução acrescida da malha 2. Considerando as previsões da velocidade $\bar{u}$, concluímos que a subavaliação da tensão $\overline{u'u'}$ originou uma difusão de quantidade de movimento mais reduzida e, assim, uma recuperação da velocidade na zona da esteira mais distante do prisma maior que a apreensível nas medições.

A tensão $\overline{v'v'}$ foi subavaliada ao longo de toda a esteira (figura 3.3c.2). O valor máximo previsto foi cerca de três vezes menor que o medido e localizado mais próximo da face posterior do prisma. Afigura-se que os resultados terão beneficiado do incremento de resolução da malha 2, porque o valor máximo aumentou, embora não o suficiente.

As previsões da tensão periódica $\overline{u\bar{u}}$, usando o método das grandes escalas da turbulência (figura 3.3d.2), foram melhores que as do modelo $k-\varepsilon$, pois mostraram sempre um acordo razoável com os valores experimentais. De salientar que as estimativas se revelaram melhores na zona do escoamento em que a velocidade $\bar{u}$ e a tensão de Reynolds $\overline{u'u'}$ apresentaram uma pior concordância ($x > 3$), o que não permite concluir que a modelação do escoamento nessa zona foi correcta.

A tensão $\overline{v\bar{v}}$ foi subavaliada (figura 3.3e.2), à semelhança de $\overline{v'v'}$. O máximo foi previsto com uma intensidade duas vezes menor que a medida e demasiado próximo do prisma. No entanto, ao contrário do observado na tensão $\overline{v'v'}$, parece não ter existido qualquer benefício da resolução acrescida da malha 2.

3.3.1.2 Secções $x = 0$, $x = 1$ e $x = 5$

Também foram comparados perfis da velocidade média, das tensões de Reynolds e das tensões periódicas nas secções verticais $x = 0$, $x = 1$ e $x = 5$. Optámos por estas três secções, pois correspondem a zonas distintas do escoamento: a secção $x = 0$ inclui o eixo do prisma e corresponde à zona da camada limite descolada, $x = 1$ abrange a zona de recirculação e $x = 5$ está localizada na esteira.

As simulações realizadas com o modelo $k-\epsilon$ previram correctamente a velocidade $\bar{u}$ em todas as secções consideradas (figuras 3.4a.1-3). Já a velocidade $\bar{v}$ apresentou discrepâncias maiores, particularmente na secção $x = 1$ (figura 3.4b.2). De relevar o facto de, nessa secção, a melhor das previsões ter sido a de RaNS2 e as piores as de RaNS1 e RaNS3, tal qual sucedeu na previsão do comprimento médio da zona de recirculação — duas situações que estarão relacionadas, pois esta secção inclui essa zona.

Todas estas simulações foram incapazes de prever, na secção $x = 0$, o máximo de $\overline{u'u'}$ junto da face do prisma (figura 3.4c.1). Também não foram capazes de prever o andamento das medições na secção $x = 1$, para $y < 1$ (figura 3.4c.2). Na secção $x = 5$, os valores previstos foram muito reduzidos (figura 3.4c.3), de acordo com o que se tinha observado na secção $y = 0$ (figura 3.3b.2). A tensão $\overline{v'v'}$ pareceu correctamente prevista na secção $x = 0$ (figura 3.4d.1), embora não existam medições suficientemente próximo da parede e as simulações com o método das grandes escalas da turbulência tenham mostrado um máximo mais elevado, conforme se verá adiante. Nas secções $x = 1$ e $x = 5$, esta tensão foi, à semelhança de $\overline{u'u'}$, subavaliada, mostrando valores que podiam ser 15 vezes menores que os medidos (figuras 3.4d.2 e 3); neste caso, a falta de concordância com as medições na secção $x = 5$ foi maior, conforme também tinha ficado aparente no perfil na secção $y = 0$.

As previsões de $\overline{u'v'}$ na secção $x = 0$, pelas simulações RaNS1, RaNS3 e RaNS4 afiguraram-se correctas (tendo em conta o ponto até onde existem medições); já as de RaNS2 apresentaram os valores mais elevados apenas numa zona mais próxima do prisma (figura 3.4e.1). Na secção $x = 1$, foi observada uma previsão deficiente na zona $y < 1$ (figura 3.4e.2), tal como nas tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$. Embora na secção $x = 5$ os valores medidos tenham sido muito reduzidos, propendemos a considerar que esta tensão foi subavaliada por todas as simulações.

Na secção $x = 0$, apenas a componente $\overline{\tilde{u}\tilde{u}}$ da tensão periódica apresenta valores significativos (figuras 3.5a.1, b.1 e c.1). Não obstante as simulações terem previsto um andamento qualitativamente idêntico ao das medições, elas subestimaram esta tensão e a melhor previsão do máximo, obtida de RaNS4, foi cerca de duas vezes menor que as medições (figura 3.5a.1). Na secção $x = 1$ (figuras 3.5a.2, b.2 e c.2), salientaram-se as previsões de RaNS2, as mais próximas dos valores experimentais, especialmente no caso da tensão $\overline{\tilde{u}\tilde{u}}$. Pelo contrário, as previsões de RaNS1 apresentaram valores muito baixos. A secção $x = 5$ foi a única considerada em que as previsões excederam as medições. Os resultados de RaNS1 contrastaram com os das outras secções, em que mostraram sempre

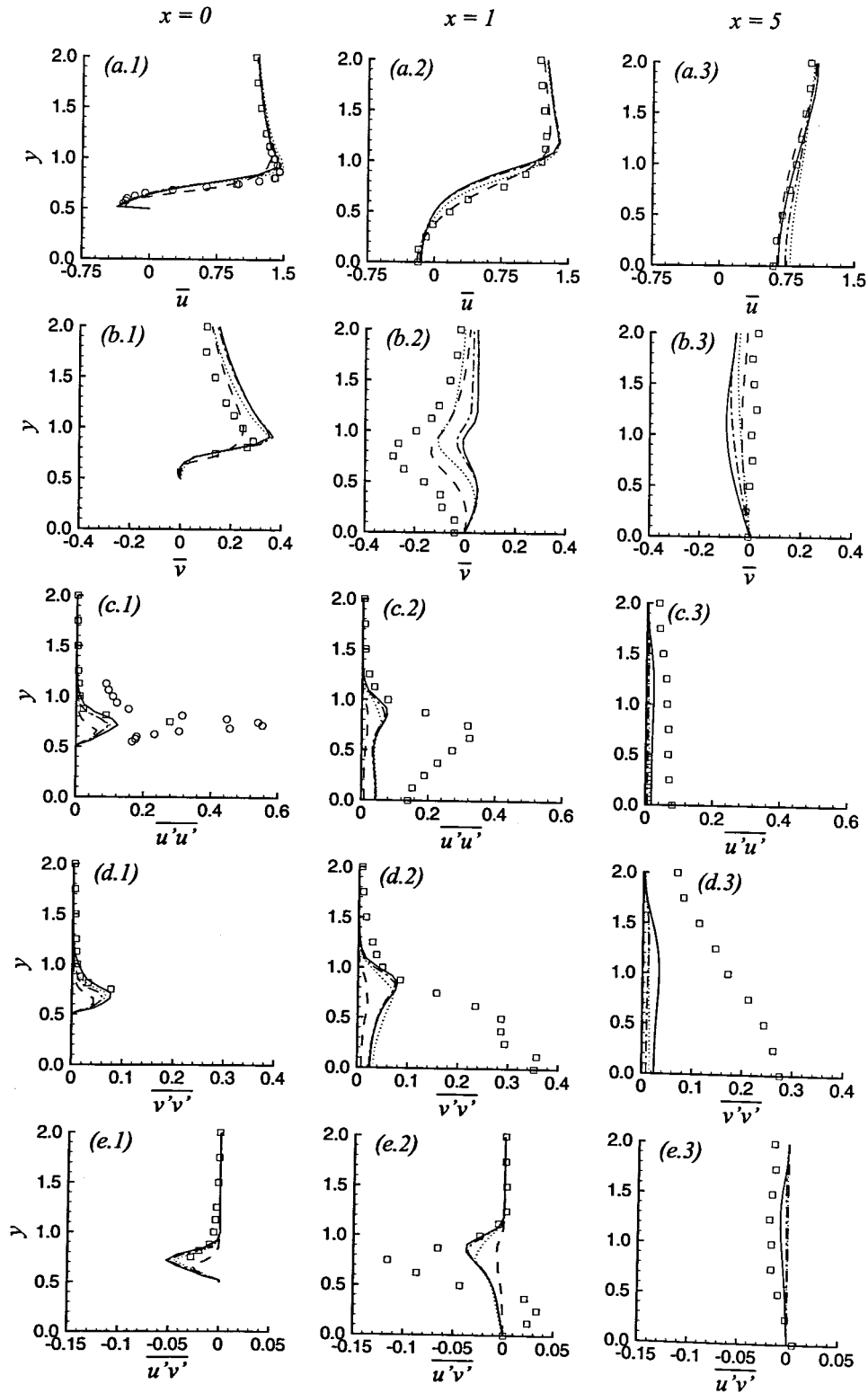


Figura 3.4: Perfis da velocidade média e das tensões de Reynolds, obtidos das simulações com o método das médias de Reynolds, em três secções verticais (legenda como a figura 3.5).

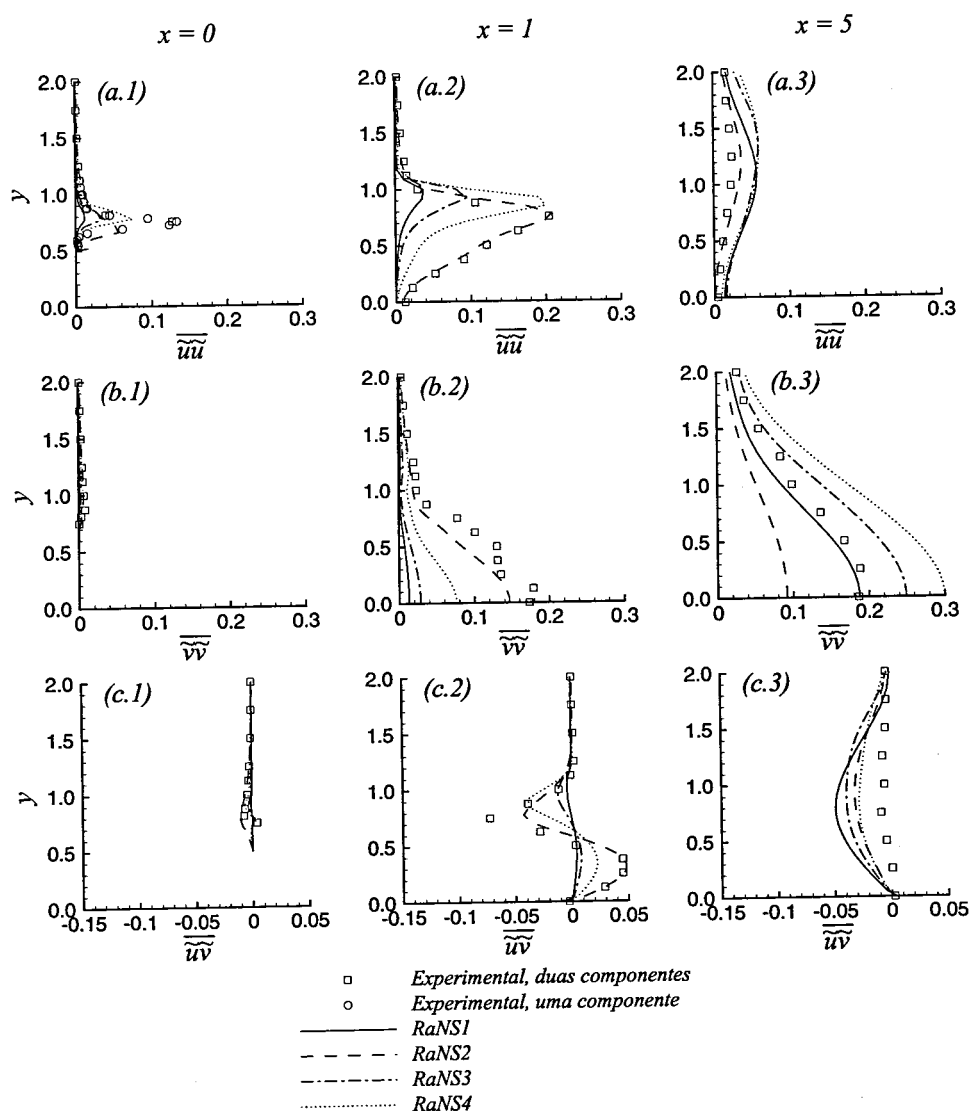


Figura 3.5: Perfis das tensões periódicas, obtidos das simulações com o método das médias de Reynolds, em três secções verticais.

os valores mais baixos, revelando uma boa concordância na tensão $\overline{v'v'}$ (figura 3.5b.3), mas prevendo valores muito elevados das outras componentes (figuras 3.5a.3 e c.3).

As simulações que utilizaram o método das grandes escalas da turbulência previram correctamente o campo de velocidade média (figuras 3.6a.1-3 e b.1-3), à excepção da zona mais próxima da face superior do prisma (secção $x = 0$, na figura 3.6a.1), em que as previsões da velocidade $\bar{u}$ mostraram valores negativos superiores aos experimentais. Segundo Rodi et al. (1997), tal parece estar associado à falta de resolução nessa zona do escoamento e ao uso das condições de parede propostas por Werner and Wengle (1991) e relacionado com o aparecimento de zonas, junto das arestas, em que $\bar{u} > 0$. Nos nós adjacentes a esta face, o valor médio de n^+ era aproximadamente 13, para a malha 1, e 7, para a malha 2; os valores máximos encontrados foram 36 e 30, nas malhas 1 e 2, respectivamente. Portanto, em qualquer dos casos existiam nós na zona em que o perfil de velocidade é descrito por uma exponencial, sendo que no caso da malha 1 a maior parte dos nós estaria nessas condições. Alguma da dificuldade na resolução desta zona do escoamento pode também estar associada à utilização do modelo de Smagorinsky numa zona próxima de uma parede sólida, onde não será capaz de prever correctamente a dissipação causada pelo campo residual.

Todas as simulações subestimaram o valor máximo da tensão $\overline{u'u'}$ (cerca de 2.3 vezes menor) e previram-na demasiado elevada junto da face do prisma, provavelmente também devido ao efeito da falta de resolução e do uso das condições de parede (figura 3.6c.1). Na secção $x = 1$, também foram incapazes de prever o máximo medido (figura 3.6c.2), mas as previsões foram superiores às das simulações com o modelo $k-\varepsilon$. Na secção $x = 5$, esta tensão pareceu bem prevista (figura 3.6c.3).

Na secção $x = 0$, a tensão $\overline{v'v'}$ foi bem prevista por todas as simulações que usaram o método das grandes escalas da turbulência (figura 3.6d.1). Já na secção $x = 1$, os melhores resultados foram obtidos pelas simulações LES2 e LES4, que usaram a malha 2 (figura 3.6d.2). Na secção $x = 5$, nenhuma simulação foi capaz de estimar o andamento correcto desta tensão, pois todas previram valores inferiores a 0.1 em toda a secção considerada, enquanto as medições mostram $\overline{v'v'} \approx 0.3$ em $y = 0$ e, depois, um decréscimo até aproximadamente 0.08 em $y = 2$.

As simulações que usaram a malha 2 (LES2 e LES4) proporcionaram estimativas ligeiramente melhores da tensão $\overline{u'v'}$ na secção $x = 0$ (figura 3.6e.1), embora a distância do primeiro ponto de medida à face do prisma não permita afirmar com certeza quais as que melhor previram o máximo. Na secção $x = 1$, nenhuma das simulações previu uma zona de valores positivos que as medições mostram quando $y < 0.5$ (figura 3.6e.2). Os valores desta tensão na secção $x = 5$ são muito reduzidos, afigurando-se, porém, terem sido bem previstos por todas as simulações.

Exceptuando os valores junto da face horizontal do prisma na secção $x = 0$, onde foram previstos valores mais elevados, provavelmente devido ao já referido efeito da falta de resolução e do uso das funções de parede, a tensão $\overline{u'u}$ foi sempre bem prevista nas secções

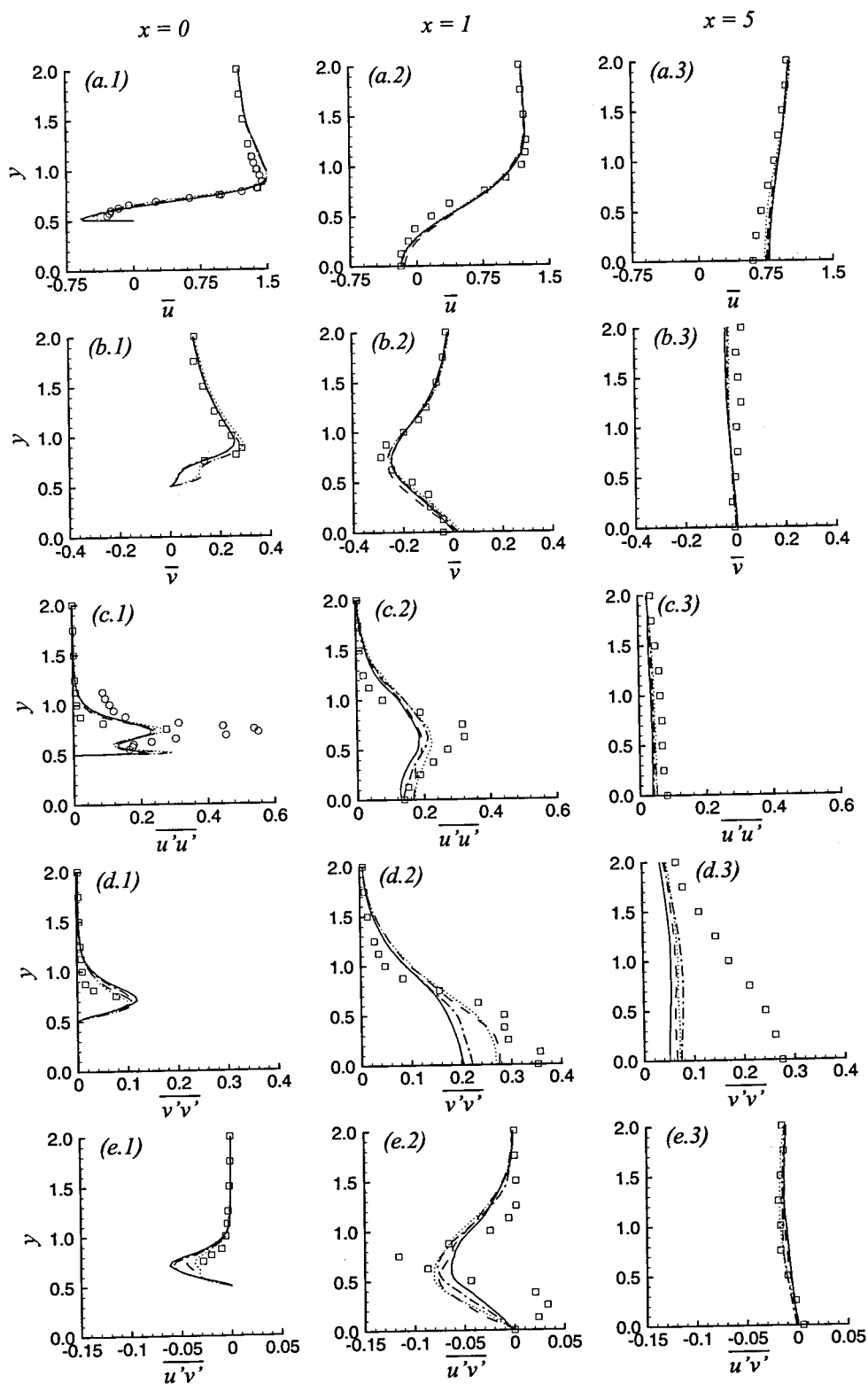


Figura 3.6: Perfis da velocidade média e das tensões de Reynolds, obtidos das simulações com o método das grandes escalas da turbulência, em três secções verticais (legenda como a figura 3.7).

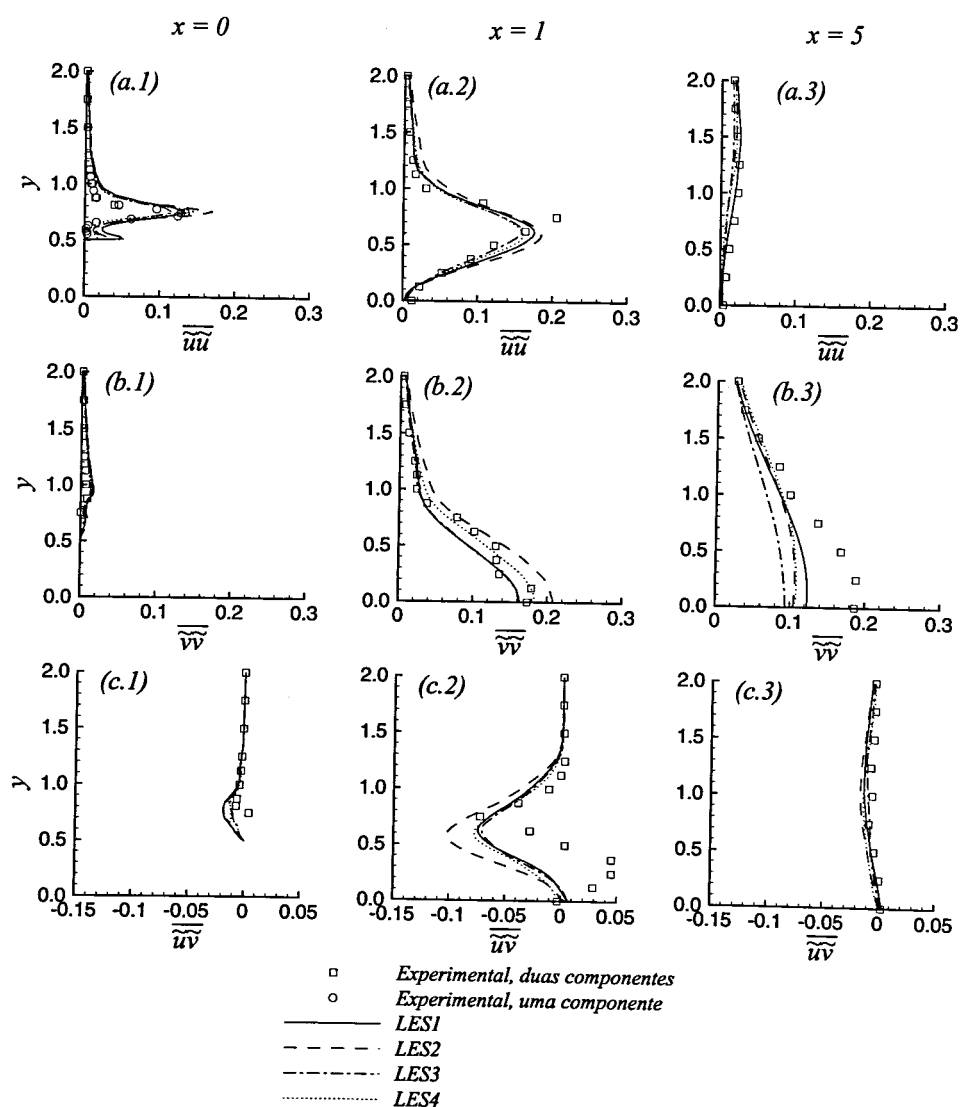


Figura 3.7: Perfis das tensões periódicas, obtidos das simulações com o método das grandes escalas da turbulência, em três secções verticais.

consideradas (figuras 3.7a.1-3). A tensão $\overline{v'v'}$ também foi bem prevista, exceptuando a zona $y < 1$ da secção $x = 5$, em que foi subavaliada (figuras 3.7b.1-3). Os valores da tensão $\overline{u'v'}$ nas secções $x = 0$ e $x = 5$ são muito reduzidos, tanto os medidos como os que foram previstos pelas simulações, sendo difícil apontar os resultados que mostram a melhor concordância (figuras 3.7c.1 e 3). Na secção $x = 1$, à semelhança do que já tinha acontecido com a tensão $\overline{u'v'}$, não foi captada a zona de valores positivos, quando $y < 0.5$ (figura 3.7c.2). A situação denunciou uma insuficiência destas simulações, que não previram o sentido correcto da troca de quantidade de movimento no interior da zona de recirculação, fosse pela tensão de Reynolds $\overline{u'v'}$, fosse pela tensão periódica $\overline{u\tilde{v}}$, mas não impediu que as componentes $\bar{u}$ e $\bar{v}$ apresentassem uma boa concordância nessa zona (figuras 3.6a.2 e b.2).

3.3.2 Desprendimento de Vórtices

Uma simulação correcta deste escoamento terá que prever adequadamente o desprendimento de vórtices e o seu transporte na esteira do prisma. A forma de saber se tal havia sido conseguido foi comparar a posição dos extremos de vorticidade nas diversas fases do escoamento. Além dos extremos, as medições Lyn et al. (1995) incluem dados sobre a posição dos centróides. Isto porque, embora a localização dos extremos seja mais relevante que a dos centróides, a incerteza associada à sua determinação é maior, dado o número finito de pontos de medição. No nosso caso, uma vez que o número de pontos disponíveis é maior e o cálculo dos centróides mais complexo, comparámos apenas a posição dos extremos. Além disso, os resultados experimentais mostram que as coordenadas longitudinais (x) dos extremos e dos centróides são praticamente coincidentes, o que permite usar qualquer uma delas no cálculo da velocidade de transporte dos vórtices, sem que existam diferenças significativas. O mesmo não acontece com a coordenada transversal (y), pois os extremos tendem a permanecer em $y \approx 0.25$ (embora também seja visível um extremo em $y \approx 0.75$), enquanto os centróides se afastam gradualmente do plano central ($y = 0$). Os mesmos resultados também mostram que os vórtices se deslocam na esteira do prisma com duas velocidades: inicialmente, na zona $x < 3$, com uma velocidade $U_{p1} = 0.43$; posteriormente, quando $x > 4$, com uma velocidade $U_{p2} = 0.78$. Em todas as simulações que realizámos foi também possível identificar duas zonas com velocidades transversais distintas (tabela 3.4).

A simulação RaNS1 previu correctamente as duas velocidades, mas a transição entre elas ocorreu para $x \approx 4.5$, um pouco mais tarde que o verificado experimentalmente (figura 3.8a.1). Essa simulação também previu um posicionamento dos vórtices demasiado afastado do plano central (figura 3.8a.2). A simulação RaNS2 subestimou a primeira velocidade em cerca de 50% e sobrestimou um pouco a segunda (menos de 5%, figura 3.8b.1). A mudança entre elas foi prevista demasiado próximo do prisma ($x \approx 2.4$) e os vórtices também se afastaram demais do plano central (figura 3.8b.2). A simulação RaNS3 subestimou a primeira velocidade em 20%, mas previu correctamente a segunda e a zona de transição (figura 3.8c.1). Das simulações realizadas com o modelo $k-\varepsilon$, foi a que previu

	U_{p1}	U_{p2}
RaNS1	0.44	0.79
RaNS2	0.23	0.81
RaNS3	0.35	0.78
RaNS4	0.43	0.77
LES1	0.34	0.74
LES2	0.25	0.95
LES3	0.36	0.68
LES4	0.31	0.91
Lyn et al. (1995)	0.43	0.78

Tabela 3.4: Velocidades dos vórtices previstas pelas simulações e medidas por Lyn et al. (1995).

um menor afastamento do plano central, mais próximo do observado experimentalmente; no entanto foi a única a prever uma passagem pela zona $y < 0$, que não é confirmada experimentalmente (figura 3.8c.2). A simulação RaNS4 parece ser a que melhor previu o movimento dos vórtices no sentido longitudinal do escoamento, pois estimou correctamente as duas velocidades e a zona de transição (figura 3.8d.1). No entanto, previu um afastamento excessivo dos extremos, à medida que se deslocavam para jusante (figura 3.8d.2). É de salientar que as simulações que previram os valores mais elevados para a primeira velocidade foram as que previram a mudança de velocidade mais tardia.

As simulações realizadas com o método das grandes escalas da turbulência subestimaram sempre a primeira velocidade e previram uma mudança demasiado próxima do prisma. Os piores resultados foram proporcionados pelas simulações LES2 e LES4, realizadas com a malha 2. Elas subestimaram U_{p1} em 40 e 30%, respectivamente, e sobrestimaram U_{p2} em cerca de 20% (figuras 3.9b.1 e d.1). Destas duas simulações, LES2 foi a que proporcionou as piores estimativas das velocidades, enquanto LES4 previu uma trajectória dos vórtices demasiado afastada do plano central (figuras 3.9b.2 e d.2). LES1 e LES3 subestimaram as duas velocidades (com um erro entre 5 e 20%, figuras 3.9a.1 e b.1), mas, principalmente no caso de LES1, previram trajectórias mais próximas do plano central, de acordo com os resultados experimentais (figuras 3.9a.2 e b.2).

3.3.3 Viscosidade Turbilhonar nas Variantes do Modelo $k-\varepsilon$

Nas simulações realizadas com o modelo $k-\varepsilon$, a única forma de o campo turbulento interagir com o campo médio era através da viscosidade turbilhonar (ν_t). Uma vez que um dos objectivos deste trabalho era comparar o desempenho das variantes do modelo $k-\varepsilon$ testadas, impunha-se uma comparação dessa variável.

A simulação RaNS1, que utilizou o modelo original, mostrou a viscosidade mais eleva-

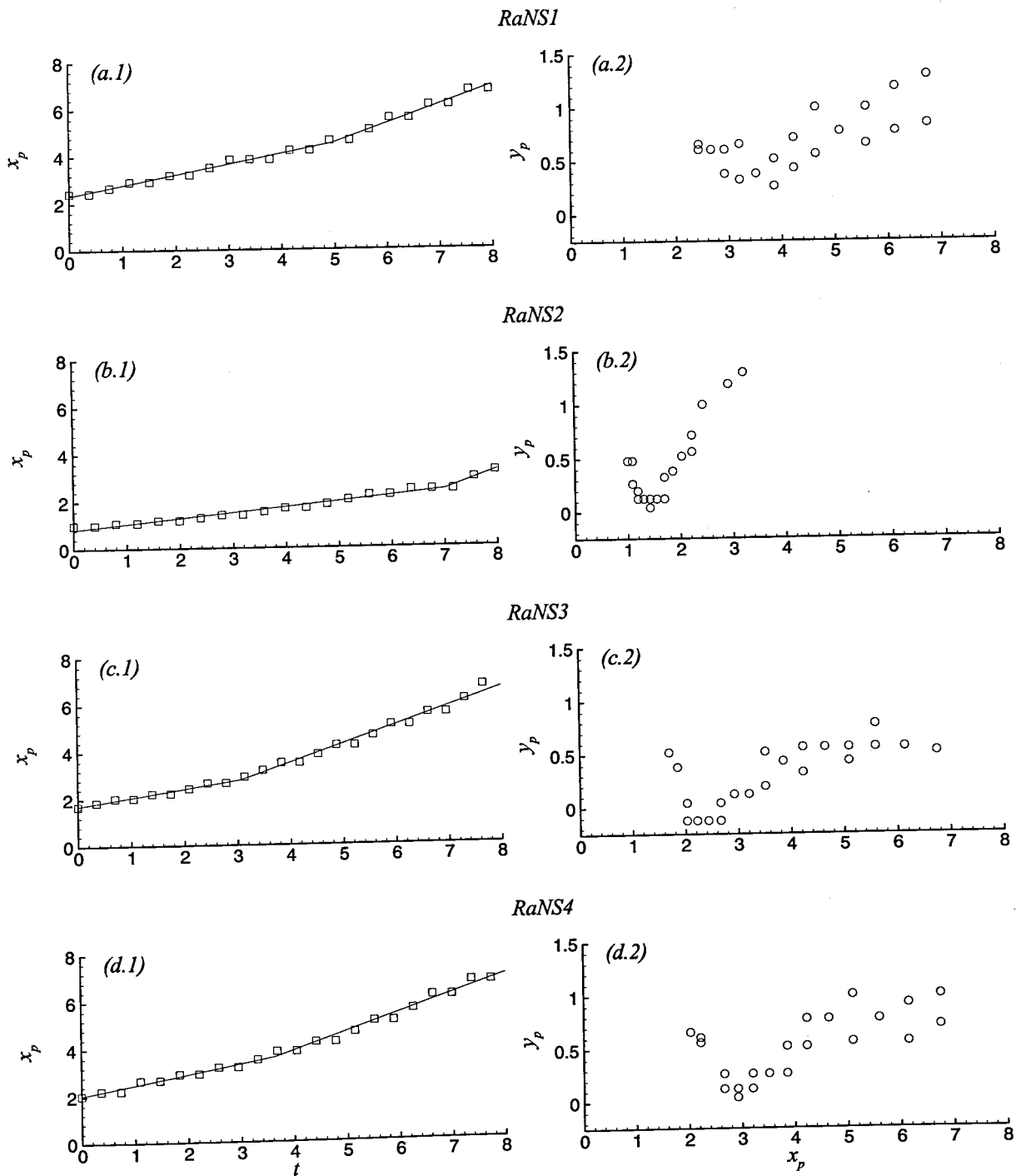


Figura 3.8: Variação da coordenada longitudinal dos extremos de vorticidade (x_p) com o tempo e trajectória ($y_p = f(x_p)$) nas simulações realizadas com o método das médias de Reynolds.

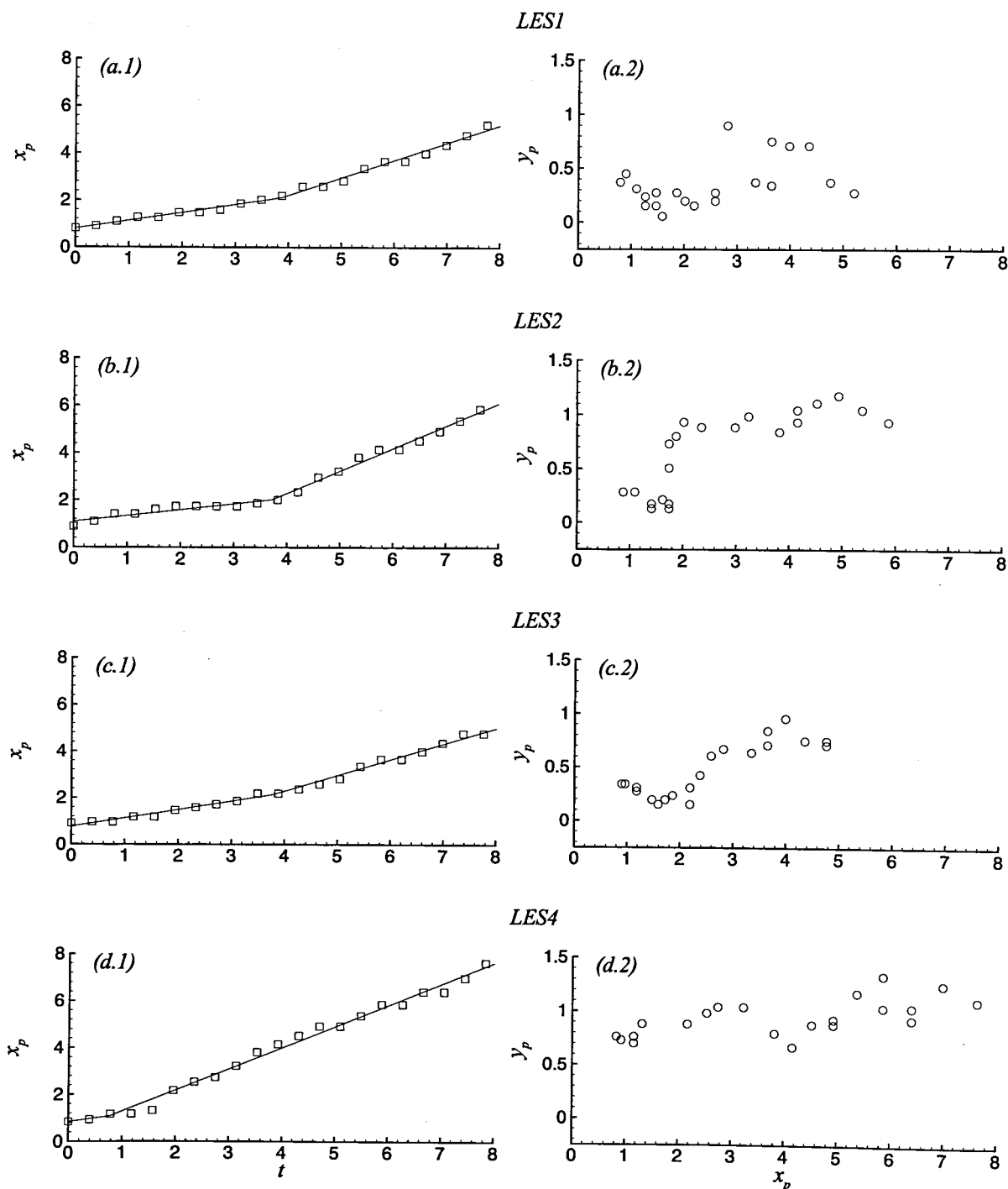


Figura 3.9: Variação da coordenada longitudinal dos extremos de vorticidade (x_p) com o tempo e trajectória ($y_p = f(x_p)$) nas simulações realizadas com o método das grandes escalas da turbulência.

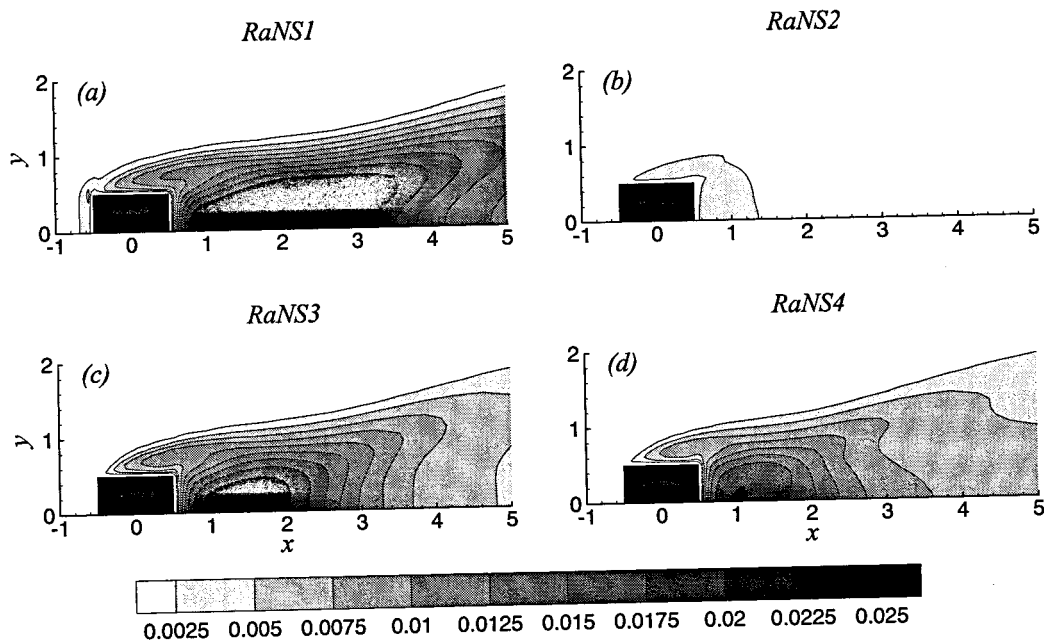


Figura 3.10: Comparação dos campos de viscosidade turbilhonar média ($\bar{\nu}_t$) obtidos com as diversas variantes do modelo $k-\varepsilon$.

da junto da face frontal do prisma (figura 3.10a), evidenciando a modelação deficiente do termo de produção de energia cinética da turbulência referida no capítulo 2. Nenhuma das outras variantes testadas mostrou esta incorrecção. Observou-se, ainda, que as simulações que previram zonas de recirculação maiores (tabela 3.2) previram também uma viscosidade mais elevada na esteira. No entanto, uma modelação mais correcta não implicará exclusivamente a redução da viscosidade, pois a simulação $RaNS2$, que foi a que previu a viscosidade menor (figura 3.10b) e o comprimento da zona de recirculação mais próximo do medido, foi, em contraponto, a que mais subestimou as tensões de Reynolds. Além disso, necessitou da dissipação numérica introduzida pelo esquema híbrido para produzir resultados fisicamente consistentes. Franke et al. (1989) analisam as medições de Cantwell and Coles (1983), do escoamento em torno de um cilindro, e concluem que existem zonas extensas com viscosidade turbilhonar negativa. Nessas zonas, os efeitos dominantes são a história e o transporte de quantidades da turbulência; esses efeitos não são devidamente considerados por um modelo baseado no conceito de viscosidade turbilhonar de Boussinesq, de modo que o modelo $k-\varepsilon$ não será capaz de descrever correctamente todos os fenómenos presentes num escoamento deste tipo (Rodi, 1993).

3.4 Conclusões

Foram realizadas simulações do escoamento em torno de um prisma de secção quadrada, com $Re = 21400$, usando os métodos das médias de Reynolds e das grandes escalas da turbulência.

Nas simulações que usaram o método das médias de Reynolds, socorremo-nos do modelo $k-\varepsilon$ com funções de parede, na sua formulação original e com alterações nos termos de produção de energia cinética da turbulência e de produção de dissipação dessa mesma energia.

Todas as simulações realizadas com este método previram o fenómeno do desprendimento de vórtices, embora tenham subestimado a amplitude das flutuações que ele produz no coeficiente de arrasto e, no caso do modelo original, também no de sustentação. Além disso, previram uma trajectória dos vórtices demasiado afastada do plano central do escoamento. O coeficiente de arrasto foi sempre subestimado (entre 3 e 15 %) e o comprimento da zona de recirculação foi sempre sobreavaliado: por exemplo, o modelo original previu-o cerca de duas vezes maior.

A variante sugerida por Leschziner and Rodi (1981) distinguiu-se por ter mostrado as melhores estimativas dos coeficientes de arrasto e de sustentação, do comprimento da zona de recirculação, do campo médio e das tensões periódicas e por ter sido a que mais subestimou as tensões de Reynolds. No entanto, só produziu resultados satisfatórios quando foi utilizada conjuntamente com o esquema híbrido, o que denota uma dependência indesejável da dissipação numérica adicional.

Das outras alternativas testadas, o modelo original, apesar de revelar diferenças significativas em muitos aspectos considerados (e.g., coeficientes de arrasto e de sustentação, comprimento da zona de recirculação, perfis de velocidade média), previu correctamente o número de Strouhal e as velocidades de transporte dos vórtices na esteira. Foi o pior na solução do campo médio, mas proporcionou resultados idênticos, ou até melhores, na avaliação das tensões de Reynolds. Contudo, nenhuma das simulações efectuadas com o modelo $k-\varepsilon$ foi capaz de as prever convenientemente, pois foram, por via de regra, subestimadas. As maiores discrepâncias ocorreram na zona de recirculação e na sua vizinhança.

As simulações com o método das grandes escalas da turbulência foram realizadas com duas malhas distintas, cuja diferença se situava na resolução junto das faces do prisma, e com dois esquemas de discretização temporal. Só na previsão do transporte dos extremos de vorticidade na esteira do prisma estas simulações não foram superiores às realizadas com o modelo $k-\varepsilon$. Mostraram-se menos eficientes na resolução da componente transversal da velocidade do que na longitudinal, pois $\bar{u}$, $\overline{u'u'}$ e $\overline{u\tilde{u}}$ apresentaram uma concordância melhor com as medições que $\bar{v}$, $\overline{v'v'}$ e $\overline{v\tilde{v}}$.

Foram visíveis deficiências na modelação do escoamento junto das faces horizontais do prisma e na sua esteira, devidos possivelmente a uma resolução ainda insuficiente. O uso

de um modelo de tensões residuais dinâmico poderia proporcionar resultados melhores, tendo em conta as limitações do modelo de Smagorinsky. Os dois métodos de discretização temporal utilizados (Adams-Bashfort de segunda ordem e Runge-Kutta (4,3)) conduziram a resultados idênticos.

Os resultados do método das grandes escalas da turbulência foram superiores aos do modelo $k-\varepsilon$. No entanto, as simulações realizadas com este método, usando três processadores de uma Silicon Graphics Power Challenge, levaram 200 vezes mais tempo que as realizadas com o método das médias de Reynolds, que usaram apenas um processador, e ocuparam 30 vezes mais memória (valores médios). De facto, uma simulação com o método das grandes escalas da turbulência e a malha mais fina demorou, tipicamente, 330 horas e ocupou 30 megabytes de memória, enquanto as simulações com o método das médias de Reynolds demoraram cerca de 100 minutos e ocuparam apenas 1 megabyte de memória. Exactamente por causa desta disparidade de recursos é que o método das médias de Reynolds tem sido preferido em aplicações de engenharia, que não podem despender recursos utilizando métodos como o das grandes escalas da turbulência. Todavia, com o crescimento do poder de cálculo dos computadores, o método das grandes escalas da turbulência começa a tornar-se atractivo, dada a sua maior precisão.

Capítulo 4

Simulação do Escoamento Estavelmente Estratificado em Torno de um Cilindro

Conteúdo do Capítulo

Realizámos simulações do escoamento em torno de um cilindro de secção circular, com número de Reynolds (Re) de 20, 50, 100, 200 e 500 e número de Froude interno (F_i) de ∞ , 100, 10, 5 e 4. Verificámos que as alterações desencadeadas pela estratificação eram reduzidas nos escoamentos com $F_i = 100$, mas podiam dar origem a que o escoamento com $Re = 50$ deixasse de verificar-se em regime periódico e passasse a ocorrer em regime estacionário quando $F_i = 5$. Parâmetros como o número de Strouhal, o coeficiente de arrasto médio e r.m.s. e o coeficiente de sustentação r.m.s. diminuíram quando a estratificação aumentou; outros, como o ângulo de estagnação r.m.s. e os ângulos de descolamento médio e r.m.s., foram pouco afectados nos casos estudados. Também observámos que a estratificação podia reduzir em 36% a máxima velocidade negativa no interior da zona de recirculação, sem afectar muito o comprimento. Nos escoamentos em que existia desprendimento de vórtices, observámos que eles eram destruídos pela estratificação, por via de tenderem a criar perfis de massa específica instáveis.

4.1 Introdução

A compreensão dos fenómenos que ocorrem no escoamento estavelmente estratificado em torno de um cilindro é passível de revelar-se útil no estudo de escoamentos atmosféricos

e oceânicos, pois, por exemplo, apresenta algumas semelhanças com os escoamentos sobre topografia ou em torno de veículos que circulam no fundo dos mares.

Tal como o prisma de secção quadrada, o cilindro é um corpo não-fuselado, de modo que os escoamentos em torno de ambos apresentam algumas semelhanças como, por exemplo, separação e desprendimento de vórtices. No entanto, no escoamento em torno do prisma, a separação, quando existe, verifica-se sempre junto das arestas da face frontal. Já no escoamento em torno do cilindro, o local de separação não é determinado apenas pela geometria, mas resulta também da interacção entre os campos de velocidade e de pressão.

O escoamento em torno do cilindro, sem estratificação, tem sido uma configuração muito estudada. Tritton (1988) e Zdravkovich (1996), por exemplo, incluem descrições pormenorizadas em que focam aspectos como o desprendimento de vórtices, o aparecimento da turbulência e a tridimensionalidade. Entre os trabalhos experimentais, destacamos o de Cantwell and Coles (1983), que inclui uma revisão dos trabalhos anteriores. Estuda o processo de formação dos vórtices e, para isso, divide o escoamento em fases, utilizando como referência um sinal de pressão na superfície do cilindro. Mais recentemente, as instabilidades que causam a passagem do escoamento de bidimensional a tridimensional foram objecto de alguns estudos, dos quais destacamos o de Williamson (1996).

Existem também simulações numéricas do escoamento não estratificado em torno do cilindro. Nesses trabalhos, utilizam-se duas formulações distintas: a formulação em variáveis primitivas (velocidade e pressão como variáveis) e a formulação de Helmholtz (vorticidade e função de corrente como variáveis).

Ultimamente, a formulação em variáveis primitivas tem sido a mais utilizada. Braza et al. (1986) estudam as características instacionárias próximo da parede e as interacções entre os campos de velocidade e pressão. Abarbanel et al. (1991) estudam as condições de fronteira para a resolução do escoamento compressível, com números de Reynolds entre 40 e 1000, de modo a não aparecerem na esteira fenómenos com uma frequência diferente do desprendimento de vórtices. Zhang et al. (1995), Henderson and Barkley (1996) e Persillon and Braza (1998) estudam as instabilidades que fazem o escoamento passar de bidimensional a tridimensional. Mittal and Balachandar (1996) realizam simulações numéricas directas do escoamento em torno de cilindros de secção elíptica (incluindo o caso particular da secção circular), concentrando-se principalmente no desenvolvimento de um algoritmo eficiente para a resolução dos sistemas de equações e das condições de fronteira nas secções de entrada e de saída; no entanto também abordam as diferenças existentes entre os escoamentos bidimensionais e tridimensionais.

Como exemplo de um trabalho com a formulação de Helmholtz, referiremos o de Anderson and Reider (1996), que, incluindo apenas soluções para o período de tempo em que o cilindro se desloca um ou dois diâmetros, centra a sua atenção na vorticidade, na condição de fronteira exterior e no esquema de quarta ordem de precisão usado.

Já o estudo do escoamento estratificado não se encontra tão desenvolvido. Existem

alguns trabalhos experimentais (e.g., Boyer et al., 1989; Davies et al., 1989; Xu et al., 1995), mas, que saibamos, não há trabalhos numéricos, embora existam acerca do escoamento sobre uma placa plana (Hanazaki, 1988a; Castro, 1989) e em torno de uma esfera (Hanazaki, 1988b).

A diferença principal entre os escoamentos com e sem estratificação deve-se ao facto de esta inibir o movimento vertical do fluido. Teoricamente, conclui-se que, quando aumenta a estratificação, ou seja, quando o número de Froude interno do escoamento,

$$F_i = \frac{U}{ND},$$

em que D é o diâmetro do cilindro, N , a frequência de Brunt-Väisälä e U , a velocidade do escoamento incidente, se aproxima de zero, um corpo bidimensional num escoamento horizontal uniforme irá arrastar consigo a porção de fluido, infinitamente longa, contida entre os dois planos horizontais que lhe são tangentes. Na prática, o que se observa é que um corpo em movimento lento, ou seja, num escoamento com um número de Froude interno reduzido, empurra à sua frente uma porção de fluido finita. Também se observa a formação de uma série de jactos alternados noutros níveis horizontais. Esses jactos são mais numerosos quanto menor for o número de Froude interno e propagam-se para montante, alterando o escoamento incidente (Turner, 1973).

Estes fenómenos, que se observam nos escoamentos estratificados, estão associados ao aparecimento de ondas gravíticas. No caso do cilindro de secção circular, o comprimento dessas ondas é, de acordo com a teoria linear, $\lambda/D = \pi F_i$. As ondas gravíticas propagam-se principalmente na direcção vertical, embora durante o período de desenvolvimento do escoamento também se propaguem horizontalmente. No caso de um canal de profundidade finita, a velocidade máxima de propagação é conhecida. O quociente entre ela e a velocidade do escoamento incidente,

$$K = \frac{NH}{\pi U},$$

em que H é a profundidade do canal, é um dos parâmetros de que depende o escoamento. Quando a velocidade de propagação das ondas é maior que a do escoamento incidente (no caso do canal de profundidade finita, quando $K > 1$), as ondas propagam-se também para montante e são responsáveis pela redução de velocidade do escoamento incidente. A sua amplitude é tanto maior quanto maior for o bloqueio do escoamento pelo obstáculo, atingindo o máximo num escoamento bidimensional (Castro et al., 1990). Nessa situação, o fluido não pode contornar o obstáculo e é obrigado a passar por cima, ou por baixo, dele. Em alguns casos, a amplitude pode ser suficientemente grande para que as ondas atinjam as paredes do tanque (durante uma experiência) ou a secção de entrada (em uma simulação), antes de serem dissipadas pela viscosidade. Nesse momento, são reflectidas e voltam a modificar o escoamento incidente.

Estes fenómenos contribuem para aumentar a complexidade dos escoamentos estratificados relativamente aos sem estratificação. O menor conhecimento dos efeitos que provocam

no escoamento em torno do cilindro motivou o estudo aqui apresentado. Comparámos resultados de simulações de escoamentos com e sem estratificação com o objectivo de determinar alguns dos efeitos da estratificação. Embora não se tenham efectuado simulações de escoamentos com um número de Froude interno muito reduzido (o mínimo que considerámos foi $F_i = 4$), observámos reduções do número de Strouhal, do coeficiente de arrasto médio e r.m.s., do coeficiente de sustentação r.m.s. e da máxima velocidade negativa no interior da zona de recirculação com o aumento da estratificação. Já os ângulos de estagnação e de separação foram pouco afectados. Também pudemos verificar que, quando existiu desprendimento de vórtices, a estratificação fez com que eles diminuíssem de tamanho à medida que avançavam para jusante até eventualmente desaparecerem.

4.2 Métodos

O escoamento que pretendemos simular foi o de um fluido linearmente estratificado em torno de um cilindro infinitamente longo, cujo eixo estava orientado na direcção perpendicular ao escoamento (figura 4.1). A massa específica do fluido era dada pela expressão

$$\rho(x, y) = \rho_0 \left(1 - \frac{N^2}{g} y \right) + \rho'(x, y),$$

em que g é o módulo da aceleração da gravidade e ρ' , a perturbação da massa específica causada pelo escoamento. O nível de referência ($y = 0$) era o do eixo do cilindro, em que a massa específica do fluido era ρ_0 .

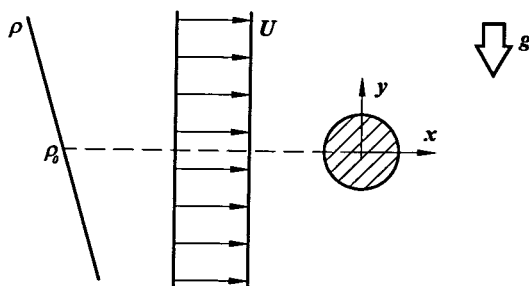


Figura 4.1: Sistema físico do escoamento estavelmente estratificado em torno de um cilindro.

Efectuando uma análise dimensional, conclui-se que o escoamento sem estratificação depende apenas do número de Reynolds ($Re = \rho_0 U D / \mu$). No caso do escoamento estratificado, existem dois parâmetros adicionais: o número de Froude interno (F_i) e o número de Schmidt ($Sc = \mu / \alpha$, em que α é o coeficiente de difusão da massa específica). Neste trabalho, efectuámos simulações dos escoamentos com $Re = 20, 50, 100, 200$ e 500 e com $F_i = \infty, 100, 10, 5$ e 4 . Considerámos sempre $Sc = 700$, valor apropriado para o fluido de trabalho usado por Boyer et al. (1989), que é uma solução estratificada de sal em água.

No escoamento sem estratificação, é costume adimensionalizar as quantidades usando o diâmetro do cilindro (D), a velocidade do escoamento incidente (U) e a massa específica (ρ_0). No caso do escoamento estratificado, existem duas grandezas adicionais: a frequência de Brunt-Väisälä (N) e o módulo da aceleração da gravidade (g). Deste modo, as quantidades adimensionalizadas são dadas por

$$t = \frac{\tilde{t} U}{D}, \quad x = \frac{\tilde{x}}{D}, \quad y = \frac{\tilde{y}}{D}, \quad z = \frac{\tilde{z}}{D},$$

$$u = \frac{\tilde{u}}{U}, \quad v = \frac{\tilde{v}}{U}, \quad w = \frac{\tilde{w}}{U}, \quad p = \frac{\tilde{p}}{\frac{1}{2}\rho_0 U^2}, \quad \rho' = \frac{\tilde{\rho}' g}{\rho_0 N^2 D}.$$

4.2.1 Modelo Matemático e Algoritmo

As equações que constituem o modelo matemático são a equação da continuidade (2.1), as equações de transporte de quantidade de movimento (2.2) e a equação de transporte da perturbação da massa específica (2.3). Para a sua resolução, usámos o algoritmo SIMPLE para malhas não-desfasadas e regime transiente, descrito na secção 2.5.1. O intervalo de tempo (Δt) e o coeficiente de sub-relaxação da pressão (α_p) usados dependiam do número de Reynolds do escoamento e são referidos na tabela 4.1. No cálculo dos fluxos convectivos e difusivos, usámos, respectivamente, o esquema QUICK (2.35) (via correcção diferida) e diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão. A discretização temporal efectuou-se com o esquema implícito de três níveis (2.24). O algoritmo TDMA foi usado para a resolução dos sistemas de equações lineares.

Re	20	50	100	200	500
$\Delta t \times 10^2$	1.0	2.5	2.5	2.5	2.5
α_p	0.5	0.5	0.7	0.8	0.9

Tabela 4.1: Intervalos de tempo e coeficientes de sub-relaxação da pressão usados, em função do número de Reynolds do escoamento.

4.2.2 Domínio de Cálculo

Na escolha das dimensões do domínio de cálculo, para a simulação de escoamentos estratificados, é necessário ponderar mais factores que no caso de escoamentos sem estratificação. Em princípio, quanto maior for o domínio, maior é a semelhança com um escoamento livre e maior é a possibilidade de as ondas gravíticas serem amortecidas pela viscosidade do fluido, antes de atingirem a fronteira. No entanto, como a velocidade máxima de propagação das ondas é proporcional à dimensão vertical, pode acontecer que, num domínio com uma dimensão vertical maior, as ondas se propaguem suficientemente depressa para atingirem uma das fronteiras antes de serem amortecidas.

No nosso caso, o domínio de cálculo considerado tinha as dimensões de $15D$, à frente do eixo do cilindro, e de $20D$, atrás; na direcção vertical, tinha a extensão de $30D$, com o cilindro localizado a meio. Foi discretizado usando uma malha em O (*O grid*), com 122×77 nós, gerada usando o método de Winslow (Knupp and Steinberg, 1994). Esse método permite obter uma malha que satisfaz o sistema de equações diferenciais

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = 0 ,$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = 0 ,$$

tendo-se imposto uma distribuição uniforme dos nós na direcção angular do cilindro (ξ). A malha resultante mostra-se ilustrada na figura 4.2.

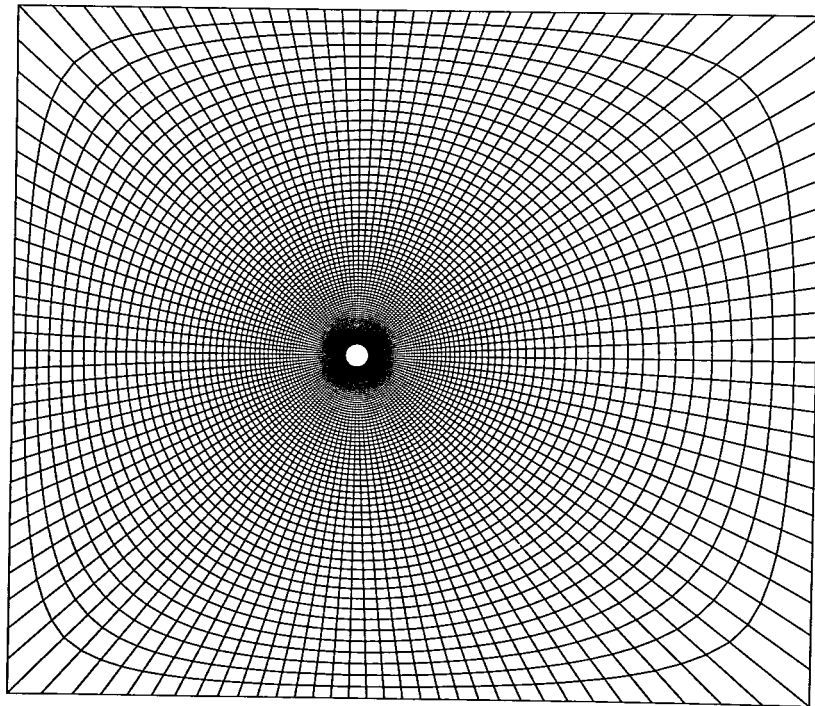


Figura 4.2: Volumes de controlo da malha utilizada.

4.2.3 Condições de Fronteira e Condição Inicial

Na fronteira de entrada do domínio, impõe-se um perfil de velocidade uniforme ($u = 1$ e $v = 0$) e uma perturbação da massa específica nula ($\rho' = 0$). Na secção de saída, usamos a condição convectiva $\partial\phi/\partial t + c\partial\phi/\partial x = 0$, em que c é a velocidade média e ϕ , qualquer

das variáveis, excepto a pressão (u , v ou ρ'). Nas fronteiras superior e inferior, impôs-se a velocidade e a perturbação da massa específica do escoamento não perturbado ($u = 1$, $v = 0$ e $\rho' = 0$). Junto do cilindro, usámos a condição de não-eskorregamento ($u = 0$ e $v = 0$) e considerámos o fluxo de massa específica nulo ($\partial\rho/\partial n = 0$).

Em todas as fronteiras exteriores, considerámos a variação da pressão na direcção normal nula ($\partial p/\partial n = 0$); na superfície do cilindro, usámos a extrapolação linear na direcção normal ($\partial^2 p/\partial n^2 = 0$).

O campo de velocidade inicial era a solução do escoamento potencial na mesma malha. Tal permitiu evitar as perturbações causadas por um campo de velocidade que não satisfizesse a equação da continuidade e diminuir o tempo de computação, uma vez que reduziu o número de iterações necessário para resolver os primeiros instantes de tempo.

Para prevenir a possibilidade de as ondas gravíticas serem reflectidas pelas fronteiras do domínio e afectarem a solução, usámos zonas de amortecimento junto das fronteiras de entrada, superior e inferior. Junto da fronteira de saída, não se mostrou necessário, visto a condição usada permitir a radiação das ondas incidentes. As zonas de amortecimento foram construídas usando o amortecimento de Rayleigh (Klemp and Durran, 1983), aplicado a todas as variáveis, excepto à pressão. A forma matemática de o impor foi adicionar ao segundo membro das equações de transporte de quantidade de movimento (2.2) e da perturbação de massa específica (2.3) um termo extra, R_ϕ , definido por

$$R_\phi = \tau(n)(\phi - \phi_0),$$

em que ϕ representa a quantidade a amortecer e ϕ_0 , o seu valor não perturbado; n é a distância ao início da zona de absorção e a quantidade $\tau(n)$ é definida por

$$\tau(n) = \begin{cases} -\frac{\alpha}{2} \left(1 - \cos \frac{n\pi}{\ell}\right) & \text{se } 0 \leq n \leq \ell/2; \\ -\frac{\alpha}{2} \left[1 + \left(\frac{n}{\ell} - \frac{1}{2}\right) \pi\right] & \text{se } \ell/2 < n \leq \ell. \end{cases}$$

O parâmetro α controla a intensidade da zona de amortecimento e ℓ é o seu comprimento (figura 4.3). Neste trabalho, usámos $\alpha D/(\rho U) = 2$ e $\ell/D = 2\pi$.

Klemp and Durran (1983) sugerem que o comprimento da zona de amortecimento deve ser igual ao das ondas a amortecer. Nos escoamentos com $F_i = 4$, o comprimento das ondas era $\lambda/D = 4\pi$, sendo maior nos outros escoamentos estratificados. No entanto, a utilização de zonas de amortecimento com esse comprimento conduziria a um domínio de cálculo muito grande. Devido às características do método de geração de malha que utilizámos, teríamos volumes de controlo muito grandes próximo dos cantos do domínio, com uma resolução insuficiente. Seria possível efectuar um refinamento da malha nessa zona, mas poderia ocorrer uma degradação da precisão do método, associada à variação muito rápida de uma das direcções computacionais. Por isso, optámos por usar o comprimento $\ell/D = 2\pi$. O parâmetro $\alpha D/(\rho U) = 2$ foi o que se mostrou mais adequado para a resolução dos escoamentos considerados, após termos efectuado previamente algumas experiências.

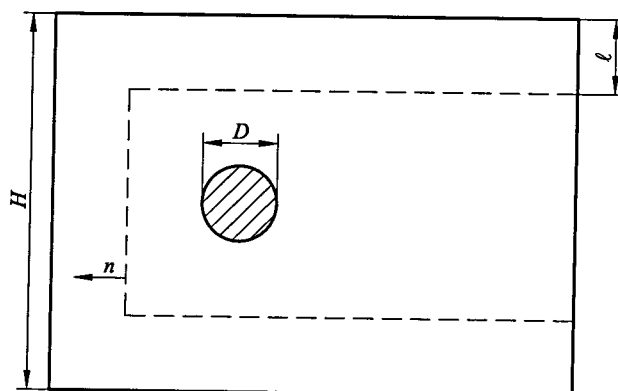


Figura 4.3: Localização das zonas de amortecimento e suas dimensões.

Tanto a intensidade do amortecimento como o comprimento poderiam ter sido afinados caso a caso. Contudo, não adoptámos esse procedimento, porque introduziria uma diferença adicional entre as simulações e poderia dificultar a comparação dos diversos escoamentos.

Sem utilizar as zonas de amortecimento, não foi possível obter uma solução, em regime permanente, dos escoamentos com $F_i = 4$, mesmo usando um domínio com $H/D = 20$, em que a velocidade de propagação das ondas era menor. Nessas situações, o coeficiente de arrasto diminuía exageradamente até o programa ser incapaz de convergir para uma solução do escoamento num dado intervalo de tempo. Mesmo com a sua utilização, não foi possível obter soluções para escoamentos com $F_i < 4$. É possível efectuar simulações de alguns desses escoamentos, afinando, caso a caso, as dimensões do domínio e as zonas de amortecimento. No entanto, às vezes, o que se consegue é apenas adiar o aparecimento dos problemas resultantes da reflexão das ondas gravíticas. O tempo de simulação conseguido pode não ser suficiente para o desenvolvimento do escoamento. Por exemplo: um dos regimes observados por Boyer et al. (1989) consistia na formação de dois turbilhões a jusante do cilindro, que se aproximavam e afastavam dele e nos quais a mistura do fluido era intensa. Todavia, este fenómeno desenvolvia-se completamente só depois de o cilindro se ter deslocado mais de cem diâmetros.

Por outro lado, é possível que estas dificuldades sugiram que não é adequado efectuar simulações do escoamento estratificado com números de Froude internos reduzidos com o modelo que utilizámos. A aproximação de Boussinesq pode não ser válida e a estratificação crescente faz aparecer uma esteira turbulenta, devido ao facto de os vórtices se partirem. Por exemplo, a esteira turbulenta já é observada por Boyer et al. (1989) em alguns dos escoamentos que simulámos: $(Re, F_i) = (200, 5)$, $(200, 4)$, $(500, 10)$, $(500, 5)$ e $(500, 4)$. Além disso, também é possível que existam alguns fenómenos que só possam captar-se numa simulação tridimensional.

4.2.4 Cálculo das Médias de Fase

Conforme referimos, no escoamento em torno do cilindro também pode ocorrer desprendimento de vórtices. Quando isso aconteceu nas nossas simulações, utilizámos um procedimento semelhante ao usado no estudo do escoamento em torno do prisma de secção quadrada (capítulo 3). O sinal de referência era a pressão no ponto $(x, y) = (0, 0.5)$ e dividia-se o tempo entre dois máximos em 20 intervalos de tempo iguais. Cada um desses intervalos era associado a uma fase do escoamento, em que se calculavam médias. Finalmente, calculava-se uma média das médias de fase, correspondente a uma média temporal.

4.3 Resultados e Discussão

Nesta secção, são apresentados os resultados do estudo do escoamento. Em primeiro lugar, comparamos os escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$), para ver de que modo dependiam do número de Reynolds e, a seguir, analisamos o efeito da estratificação.

4.3.1 Escoamento Sem Estratificação

Conforme referimos, as características do escoamento de um fluido homogêneo em torno de um cilindro já foram objecto de vários estudos teóricos, numéricos e experimentais. Por esse motivo, iremos referir apenas alguns dos resultados que obtivemos e que serviram de referência para estudar o efeito da estratificação.

Quando o número de Reynolds é reduzido — como o dos escoamentos considerados aqui — os parâmetros que caracterizam o escoamento dependem bastante dele. Por exemplo: no escoamento com $Re = 20$, existem, a jusante do cilindro, dois turbilhões. Esses turbilhões permanecem junto do cilindro, a velocidade do fluido no seu interior mantém-se constante ao longo do tempo e o seu tamanho aumenta com o número de Reynolds. Se considerarmos números de Reynolds maiores, as assimetrias presentes no escoamento — inevitáveis durante a realização de uma experiência — provocam a oscilação dos turbilhões, sem que eles se desprendam do cilindro. Foi essa a situação que verificámos nas simulações com $Re = 50$.

Para números de Reynolds ainda maiores, inicia-se um regime em que os vórtices crescem até se soltarem do cilindro, após o que principia a formação de outro. Esse regime designa-se por *desprendimento de vórtices* (*vortex shedding*) e foi visível nas nossas simulações dos escoamentos com $Re = 100, 200$ e 500 . Schlichting (1968) afirma que o desprendimento de vórtices aparece para $Re \approx 60$, em concordância com os nossos resultados.

Para números de Reynolds mais elevados, formam-se, após a separação, devido aos gra-

dientes de velocidade elevados, turbilhões secundários que depois se juntam aos principais (Braza et al., 1986). Este fenómeno foi observado experimentalmente para $Re \gtrapprox 300$ e foi visível na nossa simulação com $Re = 500$.

Outro fenómeno observado experimentalmente (Williamson, 1988) e em trabalhos numéricos (Persillon and Braza, 1998) é uma descontinuidade na relação entre o número de Strouhal e o número de Reynolds, quando $180 \lesssim Re \lesssim 260$. A sua causa tem sido atribuída a perturbações do escoamento na direcção do eixo do cilindro e, por isso, não foi observada nas nossas simulações do escoamento bidimensional. Comparando o número de Strouhal obtido de simulações do escoamento bidimensional e tridimensional, Persillon and Braza (1998) registam que o das simulações tridimensionais é cerca de 10% menor quando $180 \lesssim Re \lesssim 260$, enquanto que em simulações do escoamento com números de Reynolds entre 100 e 300, fora da gama referida, a diferença nunca excede os 1.5%.

Consoante se registou, o aparecimento do desprendimento de vórtices está ligado à ocorrência de assimetrias no escoamento. Numa experiência, essas assimetrias são, por exemplo, pequenas diferenças na velocidade do fluido ou causadas pela rugosidade desigual da superfície do cilindro. Quando o número de Reynolds do escoamento é reduzido, a viscosidade amortece o seu efeito e o escoamento ocorre num regime estacionário. Com o aumento do número de Reynolds, o efeito da viscosidade diminui e aparecem, primeiro, as oscilações na esteira e, depois, o desprendimento de vórtices.

Numa simulação numérica, uma distribuição assimétrica do erro de arredondamento origina um campo de velocidade também assimétrico. É possível, ainda, forçar o desprendimento de vórtices, introduzindo deliberadamente uma assimetria no escoamento. Por exemplo, Braza et al. (1986) e Persillon and Braza (1998) introduzem, durante o desenvolvimento do escoamento, uma velocidade de rotação no cilindro. O objectivo é diminuir o tempo de computação até ao aparecimento do desprendimento de vórtices. Neste trabalho, em que se estuda a influência da estratificação, tal não foi feito, já que poderia causar fenómenos transitórios susceptíveis de afectarem a solução final.

A tabela 4.2 mostra alguns parâmetros globais obtidos nas nossas simulações, enquanto a tabela 4.3 mostra os resultados obtidos por Persillon and Braza (1998), para simulações do escoamento bidimensional com $Re = 100$ e 200 . Verificou-se uma concordância perfeita do número de Strouhal, mas o coeficiente de arrasto determinado por nós apresentou valores que podiam ser 10% superiores.

Maiores ainda foram as diferenças entre os valores r.m.s. do coeficiente de sustentação, em que as nossas simulações apresentaram valores quase três vezes mais elevados. No entanto, é nossa opinião que os valores indicados por Persillon and Braza (1998) estão incorrectos. Dado que nesse trabalho as evoluções temporais do coeficiente de sustentação mostram valores máximos de aproximadamente 0.4 no escoamento com $Re = 100$ e 0.8 no escoamento com $Re = 200$ (figuras 9a e b, na página 43), enquanto as nossas simulações mostram apenas 0.32 e 0.61, seria de esperar que os valores obtidos por nós fossem inferiores aos indicados por Persillon and Braza (1998). Para reforçar esta ideia, os coe-

Re	St	$\bar{C}_d$	$C_{d_{rms}}$	$C_{l_{rms}}$	$\theta_{s_{rms}}$	$\bar{\theta}_d$	$\theta_{d_{rms}}$	$\bar{\ell}_r$
20	—	2.16	—	—	—	136.3	—	1.40
50	0.13	1.49	< 0.01	0.03	0.1	123.5	0.3	2.96
100	0.17	1.38	< 0.01	0.23	0.8	117.1	2.0	1.93
200	0.20	1.38	0.03	0.48	1.6	112.0	4.2	1.36
500	0.22	1.51	0.10	0.84	2.5	110.0	12.9	0.99

Tabela 4.2: Parâmetros globais dos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$): número de Strouhal (St), coeficiente de arrasto médio e r.m.s. ($\bar{C}_d$ e $C_{d_{rms}}$), coeficiente de sustentação r.m.s. ($C_{l_{rms}}$), ângulo de estagnação r.m.s. ($\theta_{s_{rms}}$), ângulo de separação médio e r.m.s. ($\bar{\theta}_d$ e $\theta_{d_{rms}}$) e comprimento da zona de recirculação ($\bar{\ell}_r$).

Re	St	$\bar{C}_d$	$C_{l_{rms}}$	$\bar{\theta}_d$
100	0.17	1.25	0.08	113.5
200	0.20	1.32	0.30	109.5

Tabela 4.3: Parâmetros globais obtidos nas simulações de Persillon and Braza (1998), do escoamento bidimensional sem estratificação.

ficientes de sustentação r.m.s. calculados admitindo uma evolução temporal com a forma sinusoidal ($C_l = 0.4 \cos(2\pi Stt + \beta)$ e $C_l = 0.8 \cos(2\pi Stt + \beta)$) são 0.28 e 0.57, valores mais próximos dos nossos, mas maiores, tal como esperávamos. Pensamos que no cálculo efectuado por Persillon and Braza (1998) não se efectuou a raiz quadrada. Se foi esse o caso, então os valores correctos seriam 0.28 e 0.55, o que indica que as nossas flutuações foram subestimadas, cerca de 20% no escoamento com $Re = 100$ e 15% no escoamento com $Re = 200$.

Verificámos também uma diferença de aproximadamente 3° no ângulo de descolamento, sendo que as nossas simulações o previram mais tarde.

A sobreavaliação do coeficiente de arrasto e o atraso do descolamento verificados nas nossas simulações podem indicar que as diferenças se deveram a um bloqueio maior, dada a presença das zonas de amortecimento. Nesse caso, no entanto, o número de Strouhal também deveria ser maior. As diferenças podem também radicar no facto de as malhas utilizadas serem diferentes. Persillon and Braza (1998) utilizam uma malha em H, com 213×102 nós. Nesse tipo de malha, é mais difícil aumentar a resolução junto do cilindro do que com uma malha em O, como a que nós utilizámos; no entanto consegue-se mais facilmente uma resolução melhor nas zonas mais afastadas do cilindro, particularmente nos cantos do domínio. Uma maneira de obter o melhor das duas soluções seria realizar uma simulação multidomínio, em que junto do cilindro se utilizasse uma malha em O e nas zonas mais afastadas, uma malha em H.

A comparação da evolução da componente longitudinal da velocidade média ($\bar{u}$), na

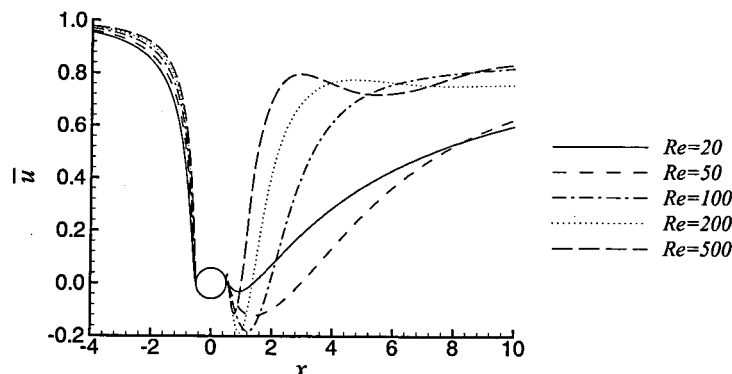


Figura 4.4: Componente longitudinal da velocidade média, na secção $y = 0$, nos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$).

secção $y = 0$, nos vários escoamentos sem estratificação mostrou o alongamento da zona de recirculação, quando o número de Reynolds passava de 20 para 50 (figura 4.4). Para números de Reynolds mais elevados, o desprendimento de vórtices aumentava a troca de quantidade de movimento na esteira do cilindro, reduzindo o comprimento médio da zona de recirculação.

Além disso, se, para $Re = 20, 50$ e 100 , a velocidade cresce sempre após a máxima velocidade negativa, para $Re = 200$ e 500 , observaram-se algumas oscilações. Por último, refira-se que, em alguns casos, se observou alguns pontos com velocidade positivas imediatamente após o cilindro. Essa velocidade não excedeu o valor de 0.03 e considerou-se que era resultado da interpolação utilizada para obter esta evolução (interpolação linear entre os nós mais próximos). Como a velocidade imediatamente após o cilindro é reduzida, um erro pequeno pode estar na origem deste fenómeno.

O coeficiente de fricção,

$$C_f = \frac{\tau_{\text{wall}}}{\frac{1}{2}\rho U^2},$$

é uma medida adimensional da tensão viscosa na superfície do cilindro.

O coeficiente de fricção médio ($\overline{C}_f$) mostrou a redução da fricção e a antecipação do descolamento (que acontece no local em que $C_f = 0$), quando aumenta o número de Reynolds (figura 4.5a). Como seria de esperar, os valores mais elevados de $C_{f_{\text{rms}}}$, correspondentes a uma maior amplitude de flutuação de C_f , observaram-se a jusante do cilindro, visto ser aí que ocorre o desprendimento de vórtices (figura 4.5b). Além disso, notou-se a existência de turbilhões secundários no escoamento com $Re = 500$, pois $\overline{C}_f$ trocava duas vezes de sinal: uma vez, quando $\theta = 110^\circ$, no ponto médio de descolamento, e outra, quando $\theta = 137^\circ$. Este facto foi confirmado pela evolução temporal do ângulo de descolamento: comparando a sua evolução temporal nos escoamentos com $Re = 200$ (figura 4.6a) e com $Re = 500$ (figura 4.6b), verificou-se a existência de uma descontinuidade no escoamento com $Re = 500$,

senal da existência de vórtices secundários.

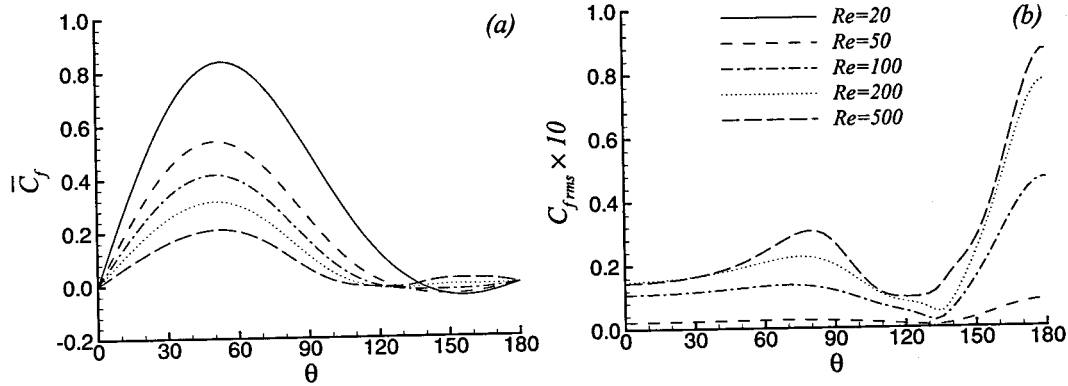


Figura 4.5: Coeficiente de fricção médio (a) e r.m.s. (b), na superfície do cilindro, nos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$).

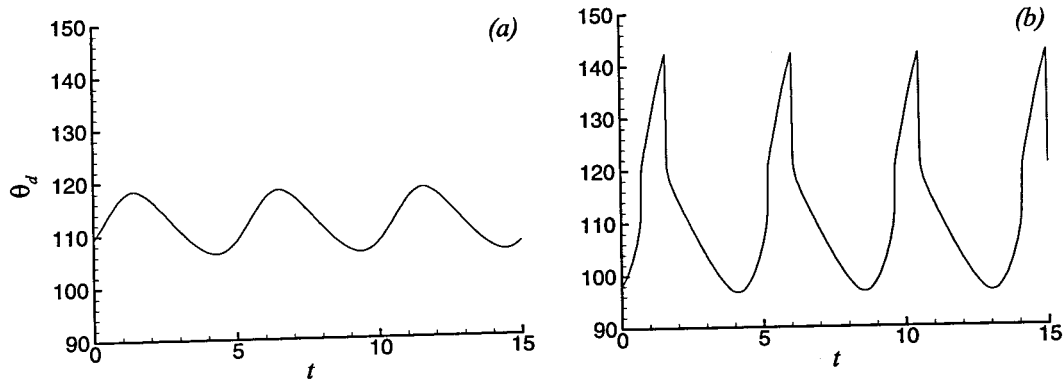


Figura 4.6: Evolução temporal do ângulo de descolamento nas simulações dos escoamentos sem estratificação ($F_i = \infty$) com $Re = 200$ (a) e 500 (b).

O coeficiente de pressão,

$$C_p = \frac{p - p_\infty}{\frac{1}{2}\rho U^2},$$

é uma medida adimensional da pressão na superfície do cilindro. Comparando a evolução do coeficiente de pressão médio ($\overline{C_p}$) nos escoamentos com diferentes números de Reynolds (figura 4.7a), notaram-se diferenças entre os escoamentos que ocorriam em regime estacionário e aqueles em que se verificava o desprendimento de vórtices: nos escoamentos em regime estacionário, quando o número de Reynolds passou de 20 para 50, a pressão aumentou nos pontos em que $\theta > 60^\circ$. Nos escoamentos em que se verificou desprendimento de vórtices, o aumento do número de Reynolds fez sempre diminuir a pressão. Destacou-se a redução que ocorreu no ponto base ($\theta = 180^\circ$) entre os escoamentos com $Re = 200$ e 500 ,

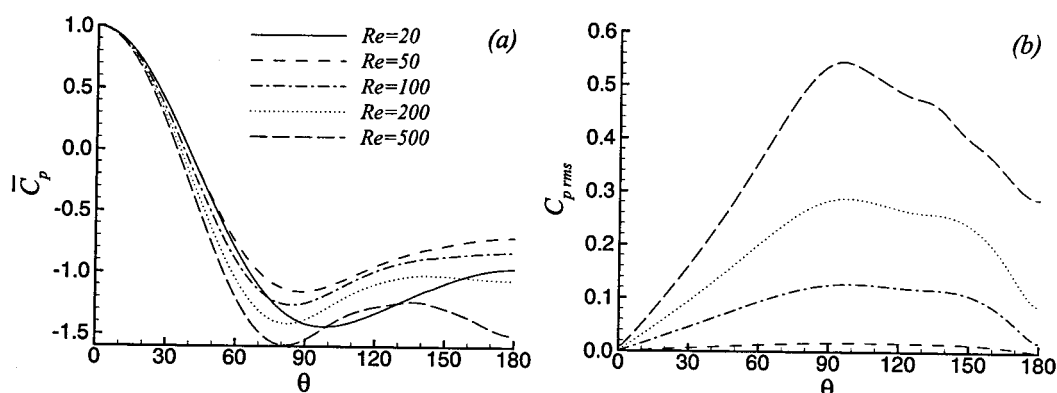


Figura 4.7: Coeficiente de pressão médio (a) e r.m.s. (b), na superfície do cilindro, nos escoamentos sem estratificação ($Fi = \infty$).

relacionada com o aparecimento dos turbilhões secundários no escoamento com $Re = 500$. Também foi visível o incremento de $C_{p,rms}$, em todos os pontos da superfície do cilindro, com o aumento do número de Reynolds (figura 4.7b). Comparando os valores de $C_{p,rms}$ e de $C_{f,rms}$ (figura 4.5b), pode concluir-se que as oscilações dos coeficientes de arrasto e de sustentação se deviam principalmente às flutuações da pressão.

4.3.2 Escoamento Estratificado

Após a descrição da influência do número de Reynolds, debruçámo-nos nesta secção sobre a influência da estratificação.

A tabela 4.4 mostra os parâmetros globais dos escoamentos estratificados estudados. Comparando estes resultados com os dos escoamentos sem estratificação (tabela 4.2), verificámos que não existiram diferenças entre os escoamentos com $Fi = 100$ e os escoamentos sem estratificação. Hanazaki (1988b) também refere que as suas simulações do escoamento em torno de uma esfera, com $Re = 200$ (baseado no diâmetro) e $Fi = 200$ (baseado no raio), apresentam resultados idênticos a experiências realizadas anteriormente de escoamentos sem estratificação, com o mesmo número de Reynolds.

Em todos os casos representados na tabela 4.4 verificou-se que, com o aumento da estratificação (diminuição de Fi), diminuía a frequência característica do escoamento (número de Strouhal, St), o coeficiente de arrasto médio ($\overline{C_d}$) e a amplitude das oscilações dos coeficientes de arrasto e de sustentação ($C_{d,rms}$ e $C_{l,rms}$). No caso do escoamento com $Re = 50$, as oscilações foram mesmo suprimidas nos escoamentos com $Fi = 5$ e 4.

As alterações observadas no ângulo de descolamento e na amplitude de oscilação dos ângulos de estagnação e descolamento foram muito reduzidas (a maior foi de 0.4°), o que demonstra a pouca influência da estratificação neles. Isto é confirmado por Hanazaki

Re	F_i	St	$\bar{C}_d$	$C_{d_{rms}}$	$C_{l_{rms}}$	$\theta_{s_{rms}}$	$\bar{\theta}_d$	$\theta_{d_{rms}}$	$\bar{\ell}_r$
20	100	—	2.16	—	—	—	136.3	—	1.40
20	10	—	2.11	—	—	—	136.3	—	1.41
20	5	—	1.94	—	—	—	136.3	—	1.43
20	4	—	1.79	—	—	—	136.5	—	1.43
50	100	0.13	1.49	< 0.01	0.03	0.1	123.5	0.3	2.96
50	10	0.12	1.45	< 0.01	0.02	0.1	123.4	0.2	3.09
50	5	—	1.31	—	—	—	123.1	—	3.31
50	4	—	1.18	—	—	—	123.1	—	3.36
100	100	0.17	1.38	< 0.01	0.23	0.9	117.1	2.0	1.93
100	10	0.16	1.35	< 0.01	0.23	0.9	117.1	2.0	1.93
100	5	0.15	1.24	< 0.01	0.22	0.9	117.0	2.1	1.95
100	4	0.14	1.14	< 0.01	0.21	1.0	116.9	2.1	1.99
200	100	0.20	1.38	0.03	0.48	1.6	112.0	4.2	1.36
200	10	0.19	1.35	0.03	0.48	1.6	112.0	4.2	1.36
200	5	0.18	1.25	0.03	0.46	1.7	111.9	4.4	1.36
200	4	0.17	1.16	0.03	0.44	1.8	111.9	4.5	1.36
500	100	0.22	1.51	0.10	0.84	2.5	110.0	12.9	0.99
500	10	0.22	1.48	0.10	0.83	2.5	110.0	13.0	0.99
500	5	0.21	1.37	0.09	0.80	2.6	109.9	12.9	0.97
500	4	0.20	1.27	0.09	0.75	2.6	109.9	13.0	0.95

Tabela 4.4: Parâmetros globais dos escoamentos estratificados: número de Strouhal (St), coeficiente de arrasto médio e r.m.s. ($\bar{C}_d$ e $C_{d_{rms}}$), coeficiente de sustentação r.m.s. ($C_{l_{rms}}$), ângulo de estagnação r.m.s. ($\theta_{s_{rms}}$), ângulo de separação médio e r.m.s. ($\bar{\theta}_d$ e $\theta_{d_{rms}}$) e comprimento da zona de recirculação ($\bar{\ell}_r$).

(1988b), que afirma que enquanto o comprimento das ondas gravíticas for maior que o do obstáculo (neste caso, o cilindro), a separação é sempre controlada pela camada limite, embora as ondas tendam a diminuir a zona de recirculação. Quando o comprimento das ondas for da mesma ordem do comprimento do obstáculo, a zona de recirculação pode ser mesmo totalmente suprimida. Só quando o comprimento das ondas for menor que o do obstáculo é que elas promovem e controlam a separação.

A figura 4.8 mostra o coeficiente de fricção médio e r.m.s. dos escoamentos estratificados com $Re = 100$ e com os vários números de Froude considerados. Embora só esteja representado o escoamento com $Re = 100$, os efeitos da estratificação no coeficiente de fricção médio foram semelhantes em todos os escoamentos, independentemente de terem, ou não, desprendimento de vórtices; as alterações observadas no coeficiente de fricção r.m.s. foram idênticas em todos aqueles em que houve desprendimento de vórtices.

Antes do ponto de descolamento, o coeficiente de fricção médio diminuía com o aumento da estratificação (figura 4.8a). No ponto de fricção máxima ($\theta \approx 50^\circ$), a redução foi

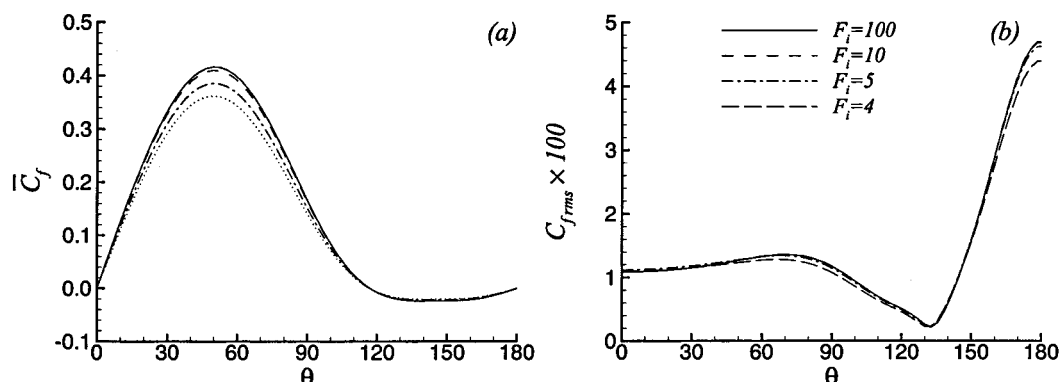


Figura 4.8: Coeficiente de fricção médio (a) e r.m.s. (b), na superfície do cilindro, nos escoamentos com $Re = 100$ e estratificação.

de aproximadamente 15% entre os escoamentos com $F_i = 100$ e com $F_i = 4$. Após o descolamento, não se verificavam alterações significativas.

Também pôde constatar-se que geralmente o aumento da estratificação fazia reduzir a amplitude de oscilação do coeficiente de fricção (figura 4.8b). Embora se haja verificado que os escoamentos mais estratificados tinham, em alguns pontos da superfície do cilindro, um $C_{f,rms}$ maior, quando assim acontecia as diferenças eram pequenas; nos pontos em que as oscilações eram maiores (por exemplo: $\theta = 180^\circ$), sempre o aumento da estratificação fez reduzir $C_{f,rms}$. Nesse ponto, o decréscimo de $C_{f,rms}$ era de aproximadamente 5% entre os escoamentos com $F_i = 100$ e com $F_i = 4$. O escoamento com $Re = 500$ apresentou uma redução maior que os outros (cerca de 10%), que atribuímos ao facto de ser o único em que existiam vórtices secundários.

A figura 4.9 mostra a evolução do coeficiente de pressão na superfície do cilindro nos escoamentos estratificados com $Re = 500$. Os efeitos da estratificação neste coeficiente também foram semelhantes em todos os números de Reynolds. Quando a estratificação aumentava, o coeficiente de pressão médio e a sua amplitude de oscilação diminuía em todos os pontos da superfície do cilindro, excepto no ponto de estagnação médio, em que, por definição, $\overline{C_p} = 1$ (figura 4.9a e b). A redução do coeficiente de pressão médio era maior quando $90^\circ < \theta < 180^\circ$, o que originou uma redução do arrasto de pressão com o aumento da estratificação. O coeficiente de pressão r.m.s. era máximo para $\theta \approx 90^\circ$ e era cerca de 10% menor no escoamento com $F_i = 4$ que no escoamento com $F_i = 100$.

A partir das alterações observadas nos coeficientes de fricção e de pressão (figuras 4.8 e 4.9), concluímos que a redução observada no coeficiente de arrasto médio, quando a estratificação aumentou, se deveu à redução simultânea do arrasto viscoso e do arrasto de pressão.

Geralmente a estratificação reduziu a componente longitudinal da velocidade média ($\overline{u}$) no plano $y = 0$ (figura 4.10). No entanto, nos escoamentos com $F_i = 4$, observámos

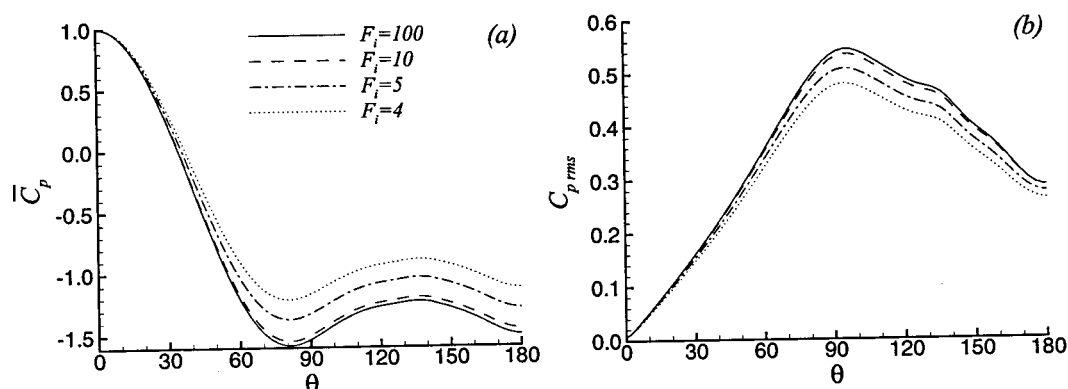


Figura 4.9: Coeficiente de pressão médio (a) e r.m.s. (b), na superfície do cilindro, nos escoamentos com $Re = 500$ e estratificação.

um aumento na zona da esteira mais distante do cilindro, o que fez com que em alguns casos a velocidade do escoamento com $F_i = 5$ fosse ultrapassada. A tendência de redução da velocidade foi atribuída ao efeito de bloqueio constituído pelo cilindro: à medida que a estratificação aumentava, a velocidade do fluido situado ao mesmo nível do cilindro reduzia-se.

As diferenças observadas no caso do escoamento com $Re = 20$ foram pequenas, o que nos leva a concluir que os efeitos dominantes eram essencialmente viscosos (figura 4.10a).

No escoamento com $Re = 50$, embora pouco visível na figura 4.10(b), ocorreu uma redução da maior velocidade negativa ($\max(-\bar{u})$) de 7% e um aumento do comprimento médio da zona de recirculação de 14% entre os escoamentos com $F_i = 100$ e com $F_i = 4$. Os efeitos da estratificação foram maiores do que para $Re = 20$, nomeadamente na redução da velocidade na zona mais distante da esteira.

Nos outros escoamentos, com números de Reynolds de 100, 200 e 500, verificou-se desprendimento de vórtices. Neles, notou-se uma redução crescente da máxima velocidade negativa: 12% para $Re = 100$, 17% para $Re = 200$ e 36% para $Re = 500$ (figuras 4.10c-e). O comprimento médio da zona de recirculação foi menos afectado, pois as diferenças nunca excederam os 5%. No entanto, o efeito não foi igual em todos eles: no escoamento com $Re = 100$, o aumento da estratificação fez crescer a zona de recirculação; para $Re = 200$, o comprimento da zona de recirculação não foi afectado pela estratificação; finalmente, no escoamento com $Re = 500$, o aumento da estratificação fez diminuir o comprimento médio da zona de recirculação. Também visível na figura 4.10 é o aumento da oscilação da velocidade $\bar{u}$ na zona mais distante da esteira, quando aumentou a estratificação.

Dada a tendência da estratificação para alongar o período de desprendimento dos vórtices (diminuir o número de Strouhal) e reduzir as oscilações dos coeficientes de arrasto e de sustentação, poder-se-ia esperar que as oscilações das componentes u e v da velocidade também diminuíssem (ou, o que é idêntico, as tensões periódicas normais $\bar{u}\bar{u}$

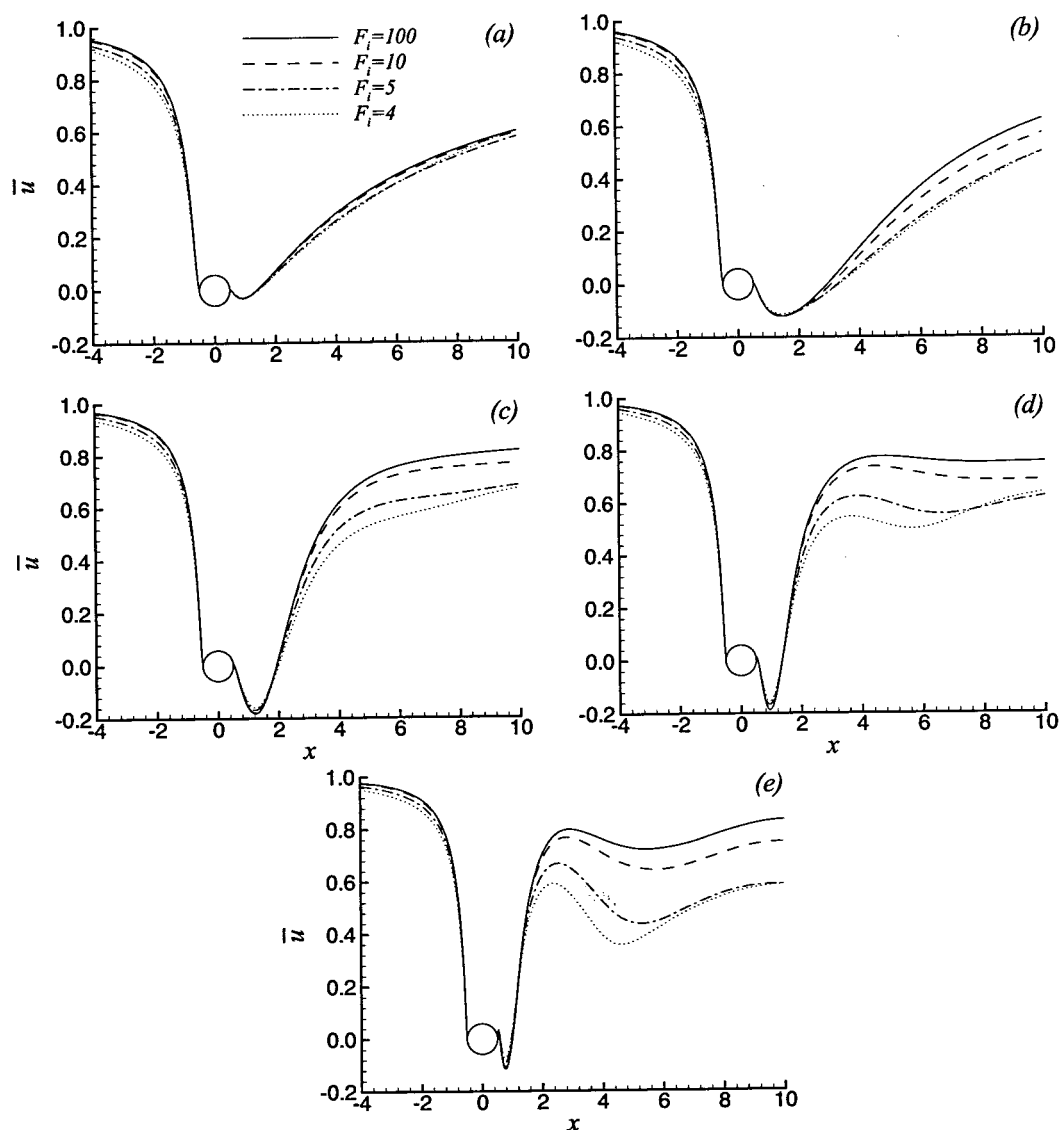


Figura 4.10: Perfis da componente longitudinal da velocidade média, na secção $y = 0$, nos escoamentos estratificados com $Re = 20$ (a), 50 (b), 100 (c), 200 (d) e 500 (e).

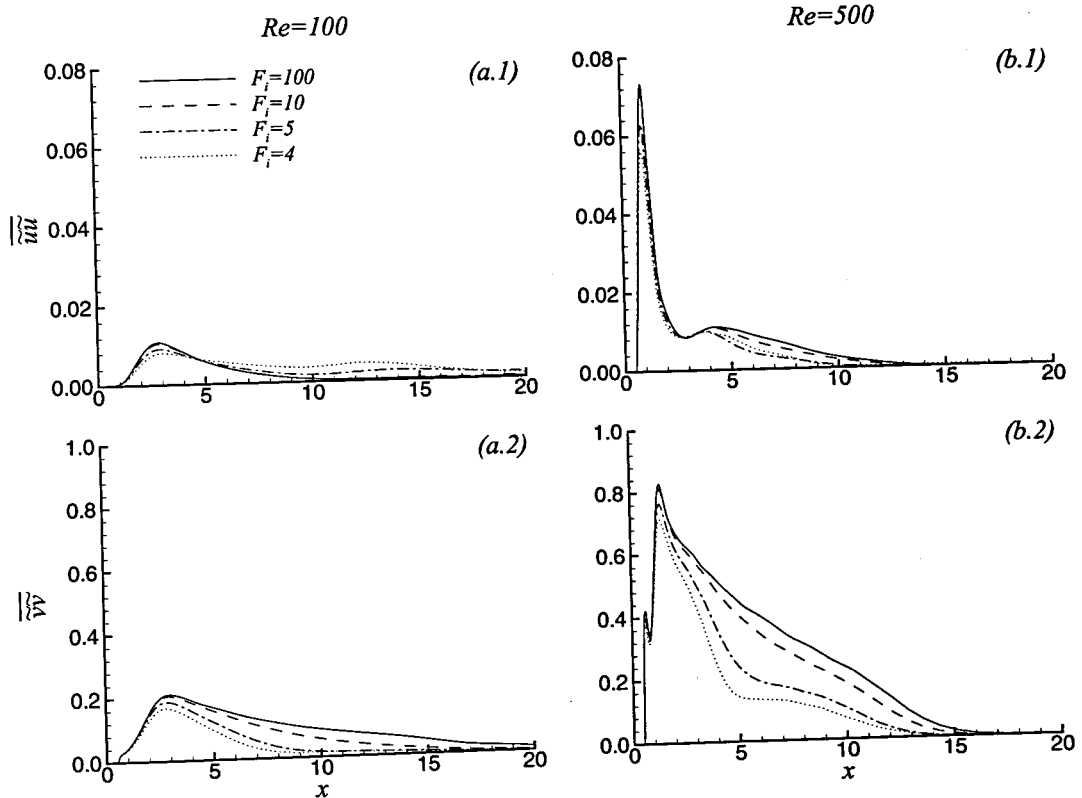


Figura 4.11: Perfis das tensões periódicas normais, na secção $y = 0$, nos escoamentos estratificados com $Re = 100$ (a) e 500 (b).

e $\overline{v'v'}$ fossem menores). Nem sempre tal aconteceu: nos escoamentos com $Re = 100$ ou 200 , quando aumentava a estratificação, a tensão $\overline{u'u'}$ aumentava na zona da esteira em que $5 \lesssim x \lesssim 15$ (figura 4.11a.1, apenas para o escoamento com $Re = 100$). No caso do escoamento com $Re = 500$, o mesmo só aconteceu quando $F_i = 4$, caso em que as oscilações eram maiores que no escoamento com $F_i = 5$ (figura 4.11b.1). Notou-se, no entanto, que a tensão $\overline{v'v'}$ foi sempre reduzida pela estratificação (figuras 4.11a.2 e b.2), qualquer que fosse o número de Reynolds do escoamento. Este facto está relacionado com a tendência da estratificação para inibir a movimentação vertical do fluido.

A figura 4.12 mostra perfis verticais das componentes longitudinal e transversal da velocidade média ($\overline{u}$ e $\overline{v}$), assim como da perturbação média da massa específica ($\overline{\rho'}$). As secções foram escolhidas por ilustrarem zonas distintas do escoamento: sobre o cilindro, incluindo a zona de recirculação e uma zona mais distante da esteira.

Registou-se que até à altura representada na figura ($y = 3$) ocorreu sempre uma redução de $\overline{u}$ com o aumento da estratificação (figuras 4.12a.1-3). Obviamente, para que houvesse conservação de massa, existia um aumento nos níveis superiores. Também se observou que $\overline{\rho'}$ apresentava uma zona nos locais mais próximos do prisma em que, praticamente, não

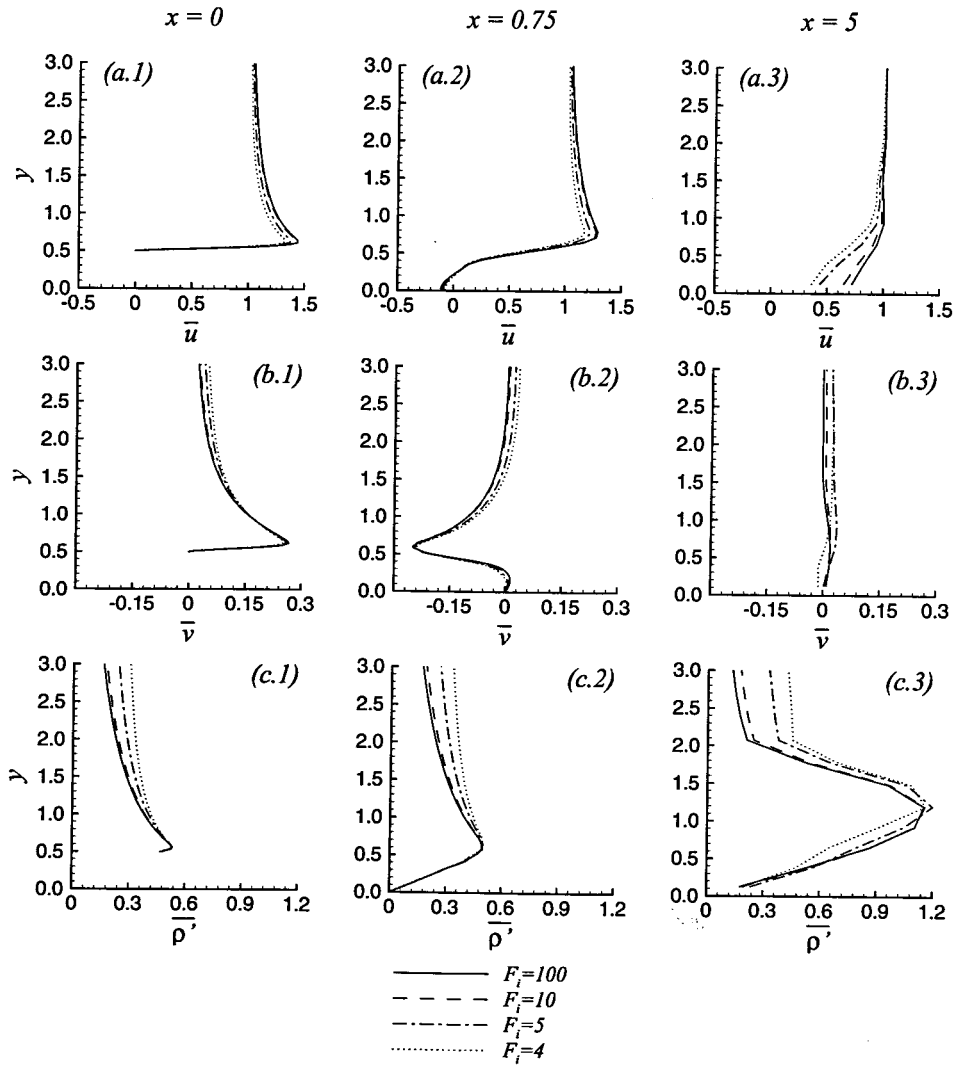


Figura 4.12: Perfis da velocidade média e da perturbação média da massa específica, em três secções verticais, nos escoamentos estratificados com $Re = 500$.

dependia do número de Froude interno (figuras 4.12c.1-3). A dimensão dessa zona crescia para jusante do escoamento. Fora dela, a perturbação da massa específica era maior nos escoamentos mais estratificados.

Conforme já referimos, nos escoamentos com $Re = 100, 200$ e 500 ocorreu desprendimento de vórtices. Pao et al. (1968) e Honji (1987) observam que a estratificação inibe a formação de vórtices. Isso acontece porque os vórtices tendem a criar perfis de massa específica instáveis (fluido mais pesado sobre fluido mais leve), após o que se “partem”. Monroe and Mei (1968) assinalam também que o crescimento da esteira, imediatamente atrás do cilindro, é semelhante à situação sem estratificação, mas que, quando atingida uma determinada espessura, que aumenta com o número de Froude, o seu crescimento é inibido pela estratificação.

Na figura 4.13, que mostra as linhas de iso-vorticidade na fase 1 do escoamento com $Re = 200$, pode ver-se o efeito da estratificação sobre os vórtices. Na zona mais próxima do cilindro, não eram significativamente afectados; no entanto, à medida que se afastavam, o seu tamanho era menor nos escoamentos mais estratificados, até eventualmente desaparecerem.

A figura 4.14 mostra ainda o campo de iso-vorticidade, mas na fase 1 do escoamento com $Re = 50$. Neste escoamento não ocorria desprendimento de vórtices, mas, no escoamento sem estratificação, existiam oscilações na esteira. Essas oscilações foram suprimidas nos escoamentos com $Fi = 5$ e 4 ; o escoamento passou a verificar-se num regime estacionário e a apresentar uma esteira simétrica (figuras 4.14c e d).

A tendência dos vórtices para colocar fluido mais pesado sobre fluido mais leve, responsável, segundo Pao et al. (1968) e Honji (1987), pelo facto de eles, depois, se “partirem”, foi confirmada pela observação da figura 4.15: nos escoamentos mais estratificados, a esteira apresenta menos zonas instáveis à medida que o fluido se afasta do cilindro.

4.4 Conclusões

Neste capítulo comparámos resultados de simulações de escoamentos bidimensionais em torno de um cilindro, com e sem estratificação estável, para determinar efeitos da estratificação. Simularam-se os escoamentos com $Re = 20, 50, 100, 200$ e 500 e com $Fi = \infty$ (sem estratificação), $100, 10, 5$ e 4 . Considerámos sempre $Sc = 700$, valor apropriado considerando o fluido de trabalho uma solução estratificada de sal em água.

Para evitar que as ondas gravíticas existentes nos escoamentos estratificados fossem reflectidas nas fronteiras do domínio computacional, usámos zonas de amortecimento junto de todas elas, excepto a de saída, em que a condição de fronteira usada permitia a radiação das ondas incidentes. Mesmo assim, com a dimensão do domínio, com o comprimento e com a intensidade das zonas de amortecimento usadas, não foi possível simular escoamentos

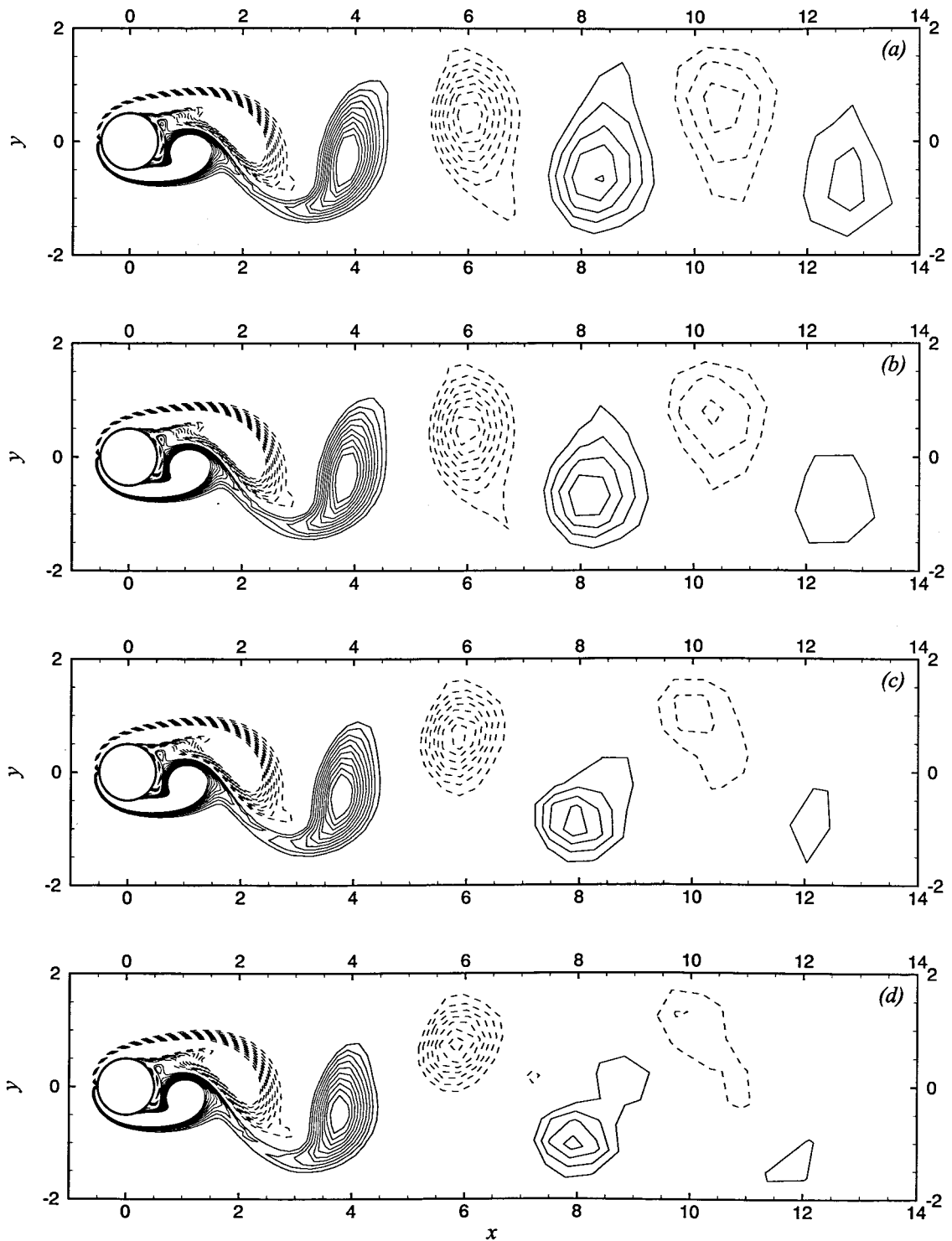


Figura 4.13: Linhas de iso-vorticidade na fase 1 dos escoamentos com $Re = 200$ e $F_i = 100$ (a), 10 (b), 5 (c) e 4 (d). Níveis representados: $[-2.2, -0.4]$ e $[0.4, 2.2]$ com um passo de 0.2.

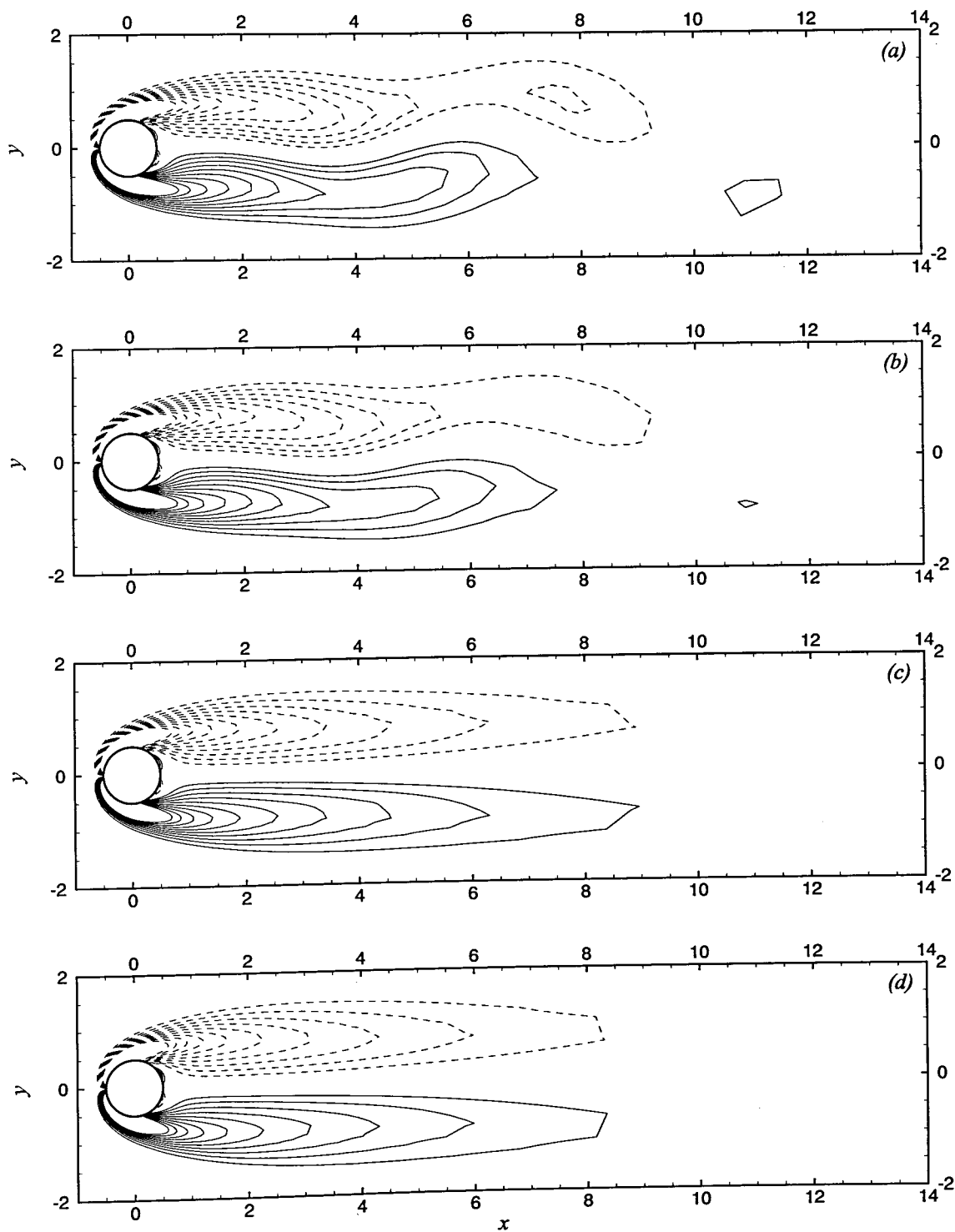


Figura 4.14: Linhas de iso-vorticidade na fase 1 dos escoamentos com $Re = 50$ e $F_i = 100$ (a), 10 (b), 5 (c) e 4 (d). Níveis representados: $[-2.2, -0.4]$ e $[0.4, 2.2]$ com um passo de 0.2.

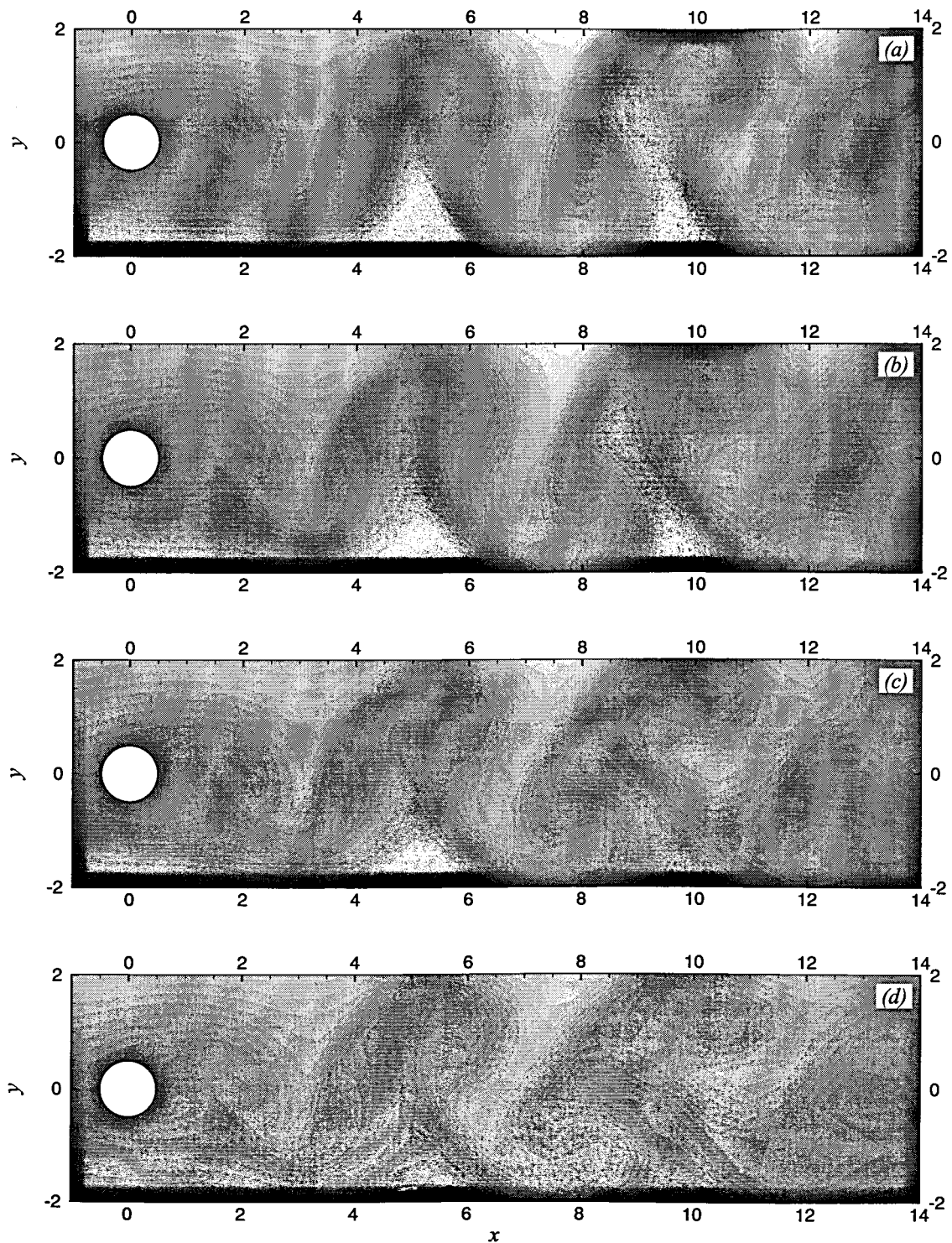


Figura 4.15: Campo da massa específica na fase 1 dos escoamentos com $Re = 200$ e $F_i = 100$ (a), 10 (b), 5 (c) e 4 (d). Os níveis de menor massa específica são os mais claros.

com $F_i < 4$, sem que a solução fosse afectada pelas reflexões das ondas gravíticas.

Concluimos que os escoamentos ainda não eram afectados significativamente pela estratificação quando $F_i = 100$, uma vez que parâmetros como o número de Strouhal, os coeficientes de arrasto médio e r.m.s., o coeficiente de sustentação r.m.s., o ângulo de estagnação r.m.s. e os ângulos de separação médio e r.m.s. eram idênticos aos dos escoamentos sem estratificação.

No caso do escoamento com $Re = 50$, a estratificação provocou uma mudança de regime, pois ele ocorreu em regime periódico quando $F_i \geq 10$ e em regime estacionário quando $F_i \leq 5$.

Quando a estratificação aumentava (diminuía o número de Froude interno), diminuía o número de Strouhal (St) dos escoamentos que ocorriam em regime periódico, isto é, aumentava o período.

Os coeficientes de fricção e de pressão médios, na superfície do cilindro, reduziam-se quando aumentava a estratificação. A redução do coeficiente de pressão era maior quando $\theta > 90^\circ$. As amplitudes de oscilação de ambos os coeficientes (e, consequentemente, os valores r.m.s.) também diminuía. Estes factos fizeram com que os coeficientes de arrasto médio e r.m.s. e o coeficiente de sustentação r.m.s. fossem menores nos escoamentos mais estratificados.

O ângulo de estagnação r.m.s. e os ângulos de separação médio e r.m.s. foram pouco afectados pelo aumento da estratificação.

Geralmente, quando a estratificação aumentava, a componente $\bar{u}$ da velocidade média no plano $y = 0$ diminuía. No entanto, apresentava oscilações maiores ao longo da esteira, o que fez com que, em alguns casos, fosse maior na zona mais distante da esteira nos escoamentos com $F_i = 4$ do que nos escoamentos com $F_i = 5$. O aumento da estratificação também provocou uma redução da máxima velocidade negativa no interior da zona de recirculação, que atingiu os 36% nos escoamentos com $Re = 500$. Já o comprimento médio da zona de recirculação sofreu sempre alterações inferiores a 5%.

A influência da estratificação nas tensões periódicas $\overline{uu}$ e $\overline{vv}$ no plano $y = 0$ não foi semelhante: enquanto a tensão $\overline{uu}$ podia ser maior na zona mais distante da esteira nos escoamentos mais estratificados, a tensão $\overline{vv}$ diminuía sempre com o aumento da estratificação.

Finalmente, confirmámos a influência da estratificação sobre os vórtices que se desprendem do cilindro: quando se afastavam do cilindro diminuíam de tamanho até eventualmente desaparecerem, uma vez que tendiam a criar zonas instáveis, em que o fluido mais pesado se encontrava sobre fluido mais leve.

Capítulo 5

Simulação Numérica Directa do Decaimento da Turbulência Isotrópica Usando uma Malha Não-Ortogonal

Conteúdo do Capítulo

Estudámos o efeito da não-ortogonalidade da malha na simulação numérica directa (DNS) do decaimento da turbulência isotrópica (com $Re_\lambda \approx 40$), usando o método dos volumes finitos. Os domínios físicos considerados, discretizados por malhas regulares com 64^3 e 128^3 nós, tinham a forma de paralelepípedos rectos periódicos, com duas faces oblíquas relativamente ao plano Cartesiano yz . Considerámos quatro valores para o ângulo entre o plano yz e essas faces: 0, 15, 30 e 45°. No método numérico utilizado, alguns dos modos de Fourier das derivadas discretizadas, usando diferenças finitas centrais, tinham, devido à não-ortogonalidade da malha, amplitude maior ou a fase invertida relativamente aos da derivada exacta, o que nunca acontece numa malha ortogonal. Por via de tal, parâmetros como o coeficiente de achatamento das derivadas da velocidade apresentaram resultados diferentes, apesar de os campos de velocidade serem idênticos. Essas diferenças eram maiores no início das simulações e diminuíam durante o decaimento da turbulência, até serem da mesma ordem das diferenças entre simulações iniciadas no domínio ortogonal com campos de velocidade diferentes, embora com o mesmo espectro de energia. O alinhamento entre a vorticidade e as taxas de deformação principais, de que depende a transferência de energia da turbulência, nunca foi afectado pela não-ortogonalidade da malha.

5.1 Introdução

O conhecimento da turbulência isotrópica é um dos estudos fundamentais que tem recorrido por diversas vezes aos métodos da simulação numérica directa (DNS) e da simulação das grandes escalas da turbulência (LES). A primeira utilização do método da simulação numérica directa é geralmente atribuída a Orszag and Patterson (1972), que estudam o decaimento da turbulência com $Re_\lambda \approx 40$ num domínio periódico e fazem algumas comparações com cálculos da aproximação da interacção directa (*direct-interaction approximation*). Siggia (1981) estuda a turbulência estacionária (forçada), com $Re_\lambda \approx 100$; utiliza uma parametrização semelhante a um modelo de tensões residuais e revela, pela primeira vez, a existência de tubos longos e finos, nos quais a vorticidade é elevada. Kerr (1985) estuda o alinhamento desses tubos com as taxas de deformação principais e as correlações das derivadas de ordem superior à primeira; conclui que a maior taxa de deformação principal é de contracção, perpendicular aos tubos de vorticidade, e que as correlações das derivadas não obedecem às leis de escala previstas pelos modelos de intermitência estatísticos. Mais recentemente, Vincent and Meneguzzi (1991) investigam também os tubos de vorticidade e as estatísticas das derivadas da velocidade, para $Re_\lambda \approx 150$ e Métais and Lesieur (1992) estudam o decaimento da turbulência homogénea estavelmente estratificada. Por último, Jiménez et al. (1993) e Jiménez and Wray (1998) estudam as características (dimensões e velocidade) dos mesmos tubos de vorticidade, para valores de Re_λ entre 40 e 160.

Porém, o desenvolvimento dos meios computacionais tem permitido uma utilização crescente do método das grandes escalas da turbulência e, em alguns casos, também da simulação numérica directa, no estudo de escoamentos mais próximos do interesse da engenharia (e.g., Breuer and Rodi, 1994; Eggels et al., 1997). Nestas aplicações, nem sempre é possível utilizar métodos cuja validade já foi comprovada nos estudos mais fundamentais, como os métodos pseudo-espectrais. Por outro lado, a utilização em projecto exige a validação em situações semelhantes às de utilização. Surgem então trabalhos que comparam o desempenho de diversos esquemas de diferenças finitas com o método pseudo-espectral.

Rai and Moin (1991), por exemplo, efectuam simulações numéricas directas do escoamento no interior de um canal e sugerem a utilização de um método com precisão de quarta ordem, como forma de obter resultados idênticos aos do método pseudo-espectral; no cálculo dos termos convectivos, utilizam um esquema com mais um ponto a montante do que a jusante, para que o erro de truncatura seja de natureza dissipativa e elimine possíveis efeitos do erro de *aliasing*. Ghosal (1996) efectua simulações de turbulência isotrópica com o método das grandes escalas da turbulência e compara a magnitude dos termos devidos às tensões residuais com os erros de truncatura e de *aliasing*; conclui que o erro de *aliasing* é o mais importante e que a sua magnitude é superior à dos termos das tensões residuais. Kravchenko and Moin (1997) usam também o método das grandes escalas da turbulência para simular o escoamento num canal, com várias formas para os termos não-lineares, e estudam a influência dos erros de truncatura e de *aliasing*; também concluem que os erros podem ser da mesma ordem de grandeza dos termos devidos às tensões residuais, que os de

truncatura são mais importantes quando se utilizam esquemas de discretização de ordem de precisão reduzida e os de *aliasing* são mais importantes nos métodos de maior ordem de precisão e espectrais.

Muitos dos escoamentos com interesse em engenharia possuem uma direcção preferencial ou, então, a geometria das fronteiras é complexa, de modo que o seu estudo nem sempre pode efectuar-se usando uma malha Cartesiana uniformemente espaçada. Kaltenbach (1997) avalia a influência na anisotropia das tensões resolvidas e residuais de um filtro anisotrópico, devido à utilização de uma malha com espaçamento diferente nas várias direcções; conclui que o efeito depende de parâmetros como a própria anisotropia da malha, o conjunto de escalas resolvidas e a forma do espectro de energia próximo das escalas resolvidas mais pequenas. Knight et al. (1998) valida a utilização de uma malha não-estruturada com o método das grandes escalas, simulando o decaimento da turbulência isotrópica compressível.

Neste capítulo, é objecto de estudo o efeito da utilização de uma malha não-ortogonal na simulação da turbulência isotrópica. Para restringir os parâmetros capazes de influenciar o resultado final, foi escolhido como referência o decaimento da turbulência isotrópica de Orszag and Patterson (1972), distorcendo a forma do domínio cúbico original. Evitou-se assim a utilização de um modelo de tensões residuais e de um mecanismo para forçar a turbulência. As simulações iniciaram-se a partir de campos de velocidade com um espectro de energia e com correlações impostas. Os resultados mostraram que variáveis relacionadas com derivadas da velocidade podem ser afectadas pela não-ortogonalidade da malha, alterando a isotropia do campo de vorticidade e do tensor das taxas de deformação. No entanto, as maiores diferenças foram observadas no início das simulações e diminuíram durante o seu decurso. Após cerca de metade do *eddy turnover time* as diferenças observadas entre os diferentes domínios eram da mesma ordem das existentes entre simulações efectuadas no domínio ortogonal, iniciadas com campos de velocidade diferentes, embora com correlações e espectro de energia idênticos.

5.2 Modelo Matemático e Algoritmo

O modelo matemático era constituído pelas equações da continuidade (2.1) e de transporte de quantidade de movimento (2.2). Foram discretizadas utilizando a abordagem dos volumes finitos numa malha não-desfasada, usando a interpolação proposta por Rhie and Chow (1983). Tanto os fluxos convectivos como os difusivos foram aproximados usando diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão.

O domínio físico de referência (ortogonal) tinha uma forma cúbica, com aresta de comprimento $\ell = \pi$ cm. Para a sua discretização consideraram-se duas malhas: uma com 64^3 e outra com 128^3 nós. Orszag and Patterson (1972) referem que a malha com 64^3 nós proporciona a mesma precisão que o cálculo realizado por eles, com 32^3 modos de Fourier.

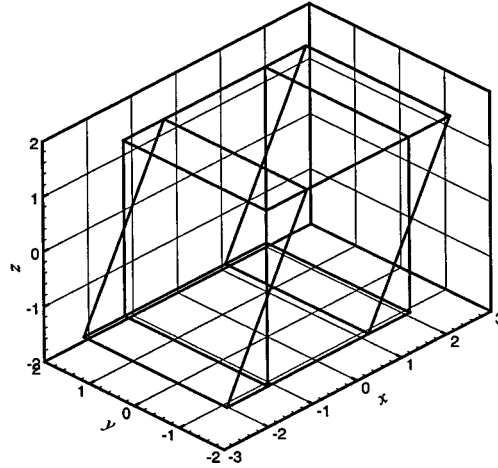


Figura 5.1: Domínios físicos com ângulos de 0 e 30° entre as direcções z e ζ .

Para estudar os efeitos da não-ortogonalidade, mantiveram-se as direcções físicas x e y sempre coincidentes com as direcções computacionais ξ e η , enquanto o ângulo entre as direcções z e ζ foi variado entre 0 e 45°, no plano Cartesiano xz , em passos de 15°. Visto não ter sido aplicada qualquer outra distorção, o volume dos domínios com fronteiras inclinadas era o mesmo do domínio ortogonal. A título de exemplo, a figura 5.1 ilustra o domínio ortogonal e aquele com um ângulo de 30° entre as direcções z e ζ , enquanto a figura 5.2 mostra, esquematicamente, a distorção da malha não-ortogonal no plano xz . A viscosidade cinemática ($\nu = 0.01189 \text{ cm}^2/\text{s}$) e o período de tempo simulado (0.8 s) foram os mesmos do trabalho de referência (Orszag and Patterson, 1972).

O algoritmo semi-implícito descrito no capítulo 2, secção 2.5.2, foi usado nestas simulações. Para a discretização temporal, usou-se o método de Runge-Kutta (4,3) (2.27), com $\Delta t = 0.004 \text{ s}$ na malha com 64^3 nós e $\Delta t = 0.002 \text{ s}$ na malha com 128^3 nós. Na resolução dos sistemas de equações lineares, usou-se um algoritmo espectral, baseado no descrito em Canuto et al. (1988), mas que efectuava as transformadas de Fourier nas direcções computacionais.

O campo de velocidade inicial era Gaussiano centrado (com média nula) e tinha um espectro de energia isotrópico, com a forma

$$E(k, 0) = Ak^4 e^{-Bk^2} . \quad (5.1)$$

A e B foram calculados de modo ao máximo de $E(k, 0)$ ocorrer para $k_p = 2^{9/4} \text{ cm}^{-1}$ e a que $\int_0^\infty E(k, 0) dk = 1.5 (\text{cm/s})^2$. Deste modo, no início das simulações, o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor e na flutuação de velocidade r.m.s. ($Re_\lambda = v_{\text{rms}}\lambda/\nu$) era aproximadamente 40.

Para gerar os campos de velocidade iniciais com as características pretendidas, usou-

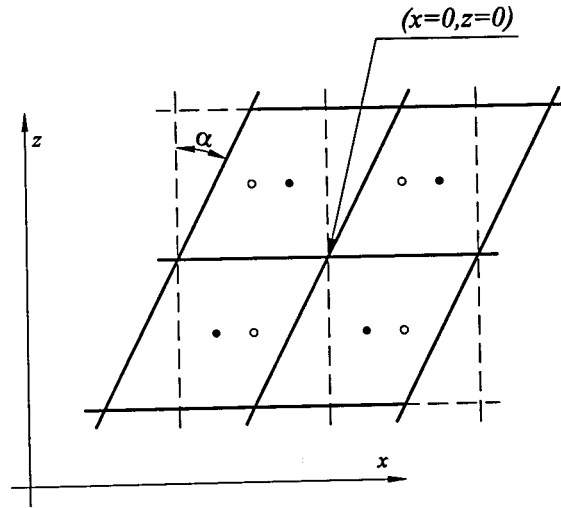


Figura 5.2: Representação esquemática da distorção da malha no plano xz . Encontra-se assinalado o ângulo entre as direcções z e ζ (α).

-se, no domínio ortogonal, o método descrito em Schumann (1985). Este método permite gerar um campo de velocidade periódico, que satisfaz a equação da continuidade e tem correlações e espectro impostos, num conjunto de pontos dado por

$$\mathbf{x}_{i,j,k} = \frac{\ell}{N} \left(i - \frac{N+1}{2}, j - \frac{N+1}{2}, k - \frac{N+1}{2} \right), \quad i, j, k = 1, \dots, N, \quad (5.2)$$

em que N é o número de pontos da malha em cada direcção. Para cada vector número de onda definido por

$$\mathbf{k}_{l,m,n} = \frac{2\pi}{\ell} (l, m, n), \quad l, m, n = -N/2, \dots, 0, \dots, N/2 - 1,$$

este método gera um modo de Fourier $\hat{v}_{l,m,n} = \hat{v}(\mathbf{k}_{l,m,n})$, de maneira que o campo de velocidade tenha as características pretendidas. Após a obtenção do campo de velocidade no espaço de Fourier, faz-se a transformação inversa, para obter o campo de velocidade $\mathbf{v}_{i,j,k} = \mathbf{v}(\mathbf{x}_{i,j,k})$ no espaço Cartesiano:

$$\mathbf{v}_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} \hat{v}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}.$$

Este método não é aplicável nos domínios não-ortogonais que considerámos, com um ângulo α entre as direcções z e ζ , em que o conjunto de pontos da malha é dado por

$$\mathbf{x}_{i,j,k} = \frac{\ell}{N} \left(i - \frac{N+1}{2} + \left(k - \frac{N+1}{2} \right) \tan \alpha, j - \frac{N+1}{2}, k - \frac{N+1}{2} \right), \quad i, j, k = 1, \dots, N. \quad (5.3)$$

Neste caso, procedia-se no espaço de Fourier tal como nos domínios ortogonais, mas sem forçar a satisfação da equação da continuidade. Este campo de velocidade designava-se $\hat{v}_{l,m,n}^*$, referindo-se o expoente ‘*’ ao facto de não satisfazer a equação da continuidade. A transformação deste campo, do espaço de Fourier para a malha não-ortogonal no espaço físico, fez-se usando a transformada de Fourier inversa, tendo em atenção que os pontos $x_{i,j,k}$ eram dados pela expressão (5.3):

$$v_{i,j,k}^* = \sum_{l,m,n} \hat{v}_{l,m,n}^* e^{i k_{l,m,n} \cdot x_{i,j,k}} .$$

Como este campo de velocidade não verificava a equação da continuidade, definiu-se uma variável auxiliar ϕ , que satisfazia a equação

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot v^* .$$

Esta é uma equação de Poisson, idêntica à que determinava a correcção de pressão e foi resolvida do mesmo modo. Finalmente, o campo de velocidade v^* era corrigido por

$$v = v^* - \nabla \phi ,$$

após o que passava a satisfazer a equação da continuidade. As características dos campos de velocidade que obtivemos são analisadas na secção 5.3.2.

5.3 Resultados e Discussão

Quaisquer efeitos da não-ortogonalidade da malha faziam-se sentir através do cálculo das derivadas, em que se utilizou um procedimento diferente nas malhas não-ortogonais: para calcular uma derivada relativamente a uma das direcções Cartesianas, calculavam-se as derivadas relativamente às direcções computacionais e efectuava-se a transformação de coordenadas (2.39). Por isso, justifica-se que se tenha estudado como foram afectados os modos de Fourier das derivadas discretizadas, usando diferenças finitas centrais com segunda ou quarta ordem de precisão.

Essas diferenças alargavam-se depois a outros aspectos do escoamento através das equações do movimento, de modo que se verificou como foram influenciadas a isotropia dos campos de velocidade, vorticidade e do tensor das taxas de deformação, as distribuições estatísticas da velocidade, das suas derivadas e da pressão em dois instantes de tempo particulares: no início e no final das simulações ($t = 0$ e 0.8 s). A evolução da energia cinética da turbulência, do coeficiente de simetria e do coeficiente de achatamento das derivadas da velocidade durante o decaimento da turbulência isotrópica também foram comparadas.

5.3.1 Influência da Não-Ortogonalidade da Malha nas Derivadas Discretizadas

Consideremos a expansão em série de Fourier de uma variável genérica ϕ :

$$\phi_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i k_{l,m,n} \cdot x_{i,j,k}}, \quad (5.4)$$

em que $x_{i,j,k}$ são os pontos da malha, definidos por (5.3). A série da derivada $\partial\phi/\partial x_i$ é dada por

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_i} \right)_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} i k_i \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i k_{l,m,n} \cdot x_{i,j,k}}, \quad (5.5)$$

de onde se conclui que os modos de Fourier de $\partial\phi/\partial x_i$ são

$$\widehat{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_i} \right)}_{l,m,n} = i k_i \hat{\phi}_{l,m,n}.$$

A única forma de obter esta série numa simulação numérica é usar um método espectral. Conforme já referimos, neste trabalho utilizaram-se diferenças finitas centrais. Para avaliar o efeito da sua utilização, considerou-se o quociente entre os modos de Fourier das derivadas discretizadas e exactas:

$$Q = \frac{\widehat{(\delta\phi/\delta x_i)}_{l,m,n}}{\widehat{(\partial\phi/\partial x_i)}_{l,m,n}}. \quad (5.6)$$

O ideal seria que $Q = 1$ em todos os números de onda considerados. Quando $|Q| < 1$, a amplitude dos modos da derivada discretizada é menor que os da derivada exacta e maior quando $|Q| > 1$; se $Q < 0$, os modos de Fourier da derivada discretizada estão em oposição de fase relativamente aos da derivada exacta.

Verificámos como Q variava em cada um dos casos considerados neste trabalho: domínio ortogonal e ângulos de 15, 30 e 45° entre os eixos z e ζ . Para isso, admitimos que a discretização se efectuava por diferenças finitas centrais com segunda ou com quarta ordem de precisão, embora só tenhamos realizado simulações usando o esquema com segunda ordem de precisão.

5.3.1.1 Diferenças Finitas Centrais com Segunda Ordem de Precisão

Usando a discretização por diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão, as derivadas relativamente às direcções computacionais são aproximadas por

$$\begin{aligned}\left(\frac{\delta\phi}{\delta\xi}\right)_{i,j,k} &= \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2}, \\ \left(\frac{\delta\phi}{\delta\eta}\right)_{i,j,k} &= \frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2}, \\ \left(\frac{\delta\phi}{\delta\zeta}\right)_{i,j,k} &= \frac{\phi_{i,j,k+1} - \phi_{i,j,k-1}}{2},\end{aligned}$$

em que se considerou $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\zeta = 1$. Usando a propriedade da translação das séries de Fourier e a igualdade $e^{i\theta} - e^{-i\theta} = 2i \sin \theta$, obtemos as séries de Fourier destas derivadas discretizadas:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\delta\phi}{\delta\xi}\right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \sin(k_x \Delta) \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \\ \left(\frac{\delta\phi}{\delta\eta}\right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \sin(k_y \Delta) \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \\ \left(\frac{\delta\phi}{\delta\zeta}\right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \sin(k'_z \Delta) \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}},\end{aligned}$$

em que $\Delta = \ell/N$ é o espaçamento da malha ortogonal e

$$k'_z = k_x \tan \alpha + k_z. \quad (5.7)$$

Para obter as derivadas relativamente às direcções Cartesianas, usámos a transformação de coordenadas (2.39). Nos casos que considerámos, as direcções x e y coincidiam com as direcções computacionais ξ e η e as direcções z e ζ formavam um ângulo α no plano xz , de modo que a matriz de mudança de coordenadas β/J era

$$\frac{\beta}{J} = \Delta^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\tan \alpha & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

As séries das derivadas relativamente às direcções Cartesianas são dadas por:

$$\left(\frac{\delta\phi}{\delta x}\right)_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k_x \Delta)}{\Delta} \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \quad (5.8)$$

$$\left(\frac{\delta\phi}{\delta y}\right)_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k_y \Delta)}{\Delta} \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \quad (5.9)$$

$$\left(\frac{\delta\phi}{\delta z}\right)_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k'_z \Delta) - \sin(k_x \Delta) \tan \alpha}{\Delta} \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}. \quad (5.10)$$

As expressões (5.8) e (5.9) são idênticas às que se obtêm numa malha ortogonal, de modo que não iremos debruçar-nos sobre elas. Só (5.10) é afectada pela não-ortogonalidade da malha, pois depende adicionalmente de k_x e de $\tan \alpha$. No caso de uma malha não-ortogonal mais geral, em que nenhuma direcção computacional coincidissem com uma das direcções Cartesianas e os ângulos entre as direcções Cartesianas e as direcções computacionais não se situassem num plano Cartesiano, todas as derivadas dependeriam de todas as componentes do vector número de onda (k_x , k_y e k_z) e dos ângulos entre as direcções Cartesianas e as computacionais.

Definindo o número da onda de maior frequência passível de se propagar numa malha com espaçamento Δ ,

$$k_{\max} = \pi/\Delta ,$$

e usando-o para normalizar os números de onda,

$$k_x^* = k_x/k_{\max} \quad \text{e} \quad k_z^* = k_z/k_{\max} ,$$

obtemos para o quociente entre os modos de Fourier da derivada discretizada (5.10) e da derivada exacta (5.5):

$$Q_2 = \frac{\sin(k_z^{*'}\pi) - \sin(k_x^*\pi) \tan \alpha}{k_z^*\pi} , \quad (5.11)$$

em que o índice '2' se refere à ordem de precisão das diferenças finitas, $k_z^{*'} = k_x^* \tan \alpha + k_z^*$ e $k_x^*, k_z^* \in [-1, 1]$.

A figura 5.3 mostra esta relação para uma malha ortogonal ($\alpha = 0^\circ$). Este resultado é conhecido (e.g., Ferziger and Perić, 1996) e mostra que os modos de Fourier da derivada cuja componente k_z^* do número de onda é menor (em módulo) são mais bem aproximados que os modos em que essa componente é maior. A relação é contínua e, porque $0 \leq Q_2 \leq 1$, é limitada e os modos da derivada exacta e da discretizada têm sempre a mesma fase. Uma vez que Q_2 tem unicamente um máximo, quando $k_z^* = 0$ ($Q_2 = 1$), e nenhum mínimo, a utilização de uma malha mais fina melhora a resolução: permite resolver mais modos e melhorar a precisão dos que já eram resolvidos anteriormente, pois passam a ter um valor de Q_2 mais próximo do ideal.

O comportamento de Q_2 em malhas não-ortogonais é diferente. Por exemplo, em todas as malhas não-ortogonais que considerámos Q_2 podia tomar valores negativos (figura 5.4). Além disso, nas malhas com $\alpha = 15$ ou 30° , a relação não era limitada nem contínua quando $k_x^* \neq 0$ e $k_z^* = 0$ (figuras 5.4a e b). De facto, verificou-se que $\lim_{k_z^* \rightarrow 0, k_x^* \neq 0} Q_2 = \pm\infty$, dependendo do sinal de k_x^* e se $k_z^* \rightarrow 0^-$ ou se $k_z^* \rightarrow 0^+$. Consequentemente, alguns dos modos da derivada discretizada podiam ter a amplitude maior ou a fase invertida relativamente aos da derivada exacta. Quando $\alpha = 45^\circ$, porque $\tan \alpha = 1$, Q_2 era contínuo e limitado, mas também podia apresentar valores negativos (figura 5.4c).

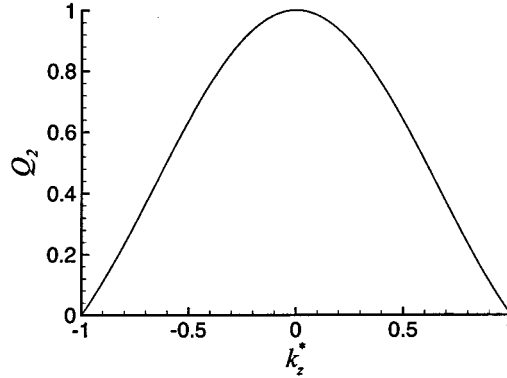


Figura 5.3: Quociente Q_2 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão, e da derivada exacta, na malha ortogonal ($\alpha = 0^\circ$), em função da componente k_z^* do vector número de onda.

A avaliação do efeito que a utilização de uma malha mais fina pode ter na precisão é mais complexa que no caso da malha ortogonal. Nos casos que considerámos, a precisão dependia de duas componentes do número de onda (k_x^* e k_z^*), logo do refinamento em duas direcções. É certo que o aumento do número de nós permite resolver mais modos de Fourier, mas o efeito sobre os modos que já eram resolvidos pode ser contrário ao que se verifica numa malha ortogonal. A título de exemplo, considere-se uma malha qualquer com $\alpha = 45^\circ$ e um modo com $k_x^* = k_z^* = 0.9$ (ponto A na figura 5.4c), para o qual $Q_2 = -0.32$: se o número de nós em cada direcção for duplicado, o mesmo modo passa a ter $k_x^* = k_z^* = 0.45$ (ponto B), a que corresponde $Q_2 = -0.48$, não sendo certo que seja discretizado com mais precisão. Deste modo, o efeito global dependerá da forma do espectro, que faz um balanço entre os modos em que a precisão aumenta e aqueles em que diminui.

5.3.1.2 Diferenças Finitas Centrais com Quarta Ordem de Precisão

No caso das diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão, as derivadas relativamente às direcções computacionais são dadas por

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta \phi}{\delta \xi} \right)_{i,j,k} &= \frac{-\phi_{i+2,j,k} + 8\phi_{i+1,j,k} - 8\phi_{i-1,j,k} + \phi_{i-2,j,k}}{12}, \\ \left(\frac{\delta \phi}{\delta \xi} \right)_{i,j,k} &= \frac{-\phi_{i,j+2,k} + 8\phi_{i,j+1,k} - 8\phi_{i,j-1,k} + \phi_{i,j-2,k}}{12}, \\ \left(\frac{\delta \phi}{\delta \xi} \right)_{i,j,k} &= \frac{-\phi_{i,j,k+2} + 8\phi_{i,j,k+1} - 8\phi_{i,j,k-1} + \phi_{i,j,k-2}}{12}. \end{aligned}$$

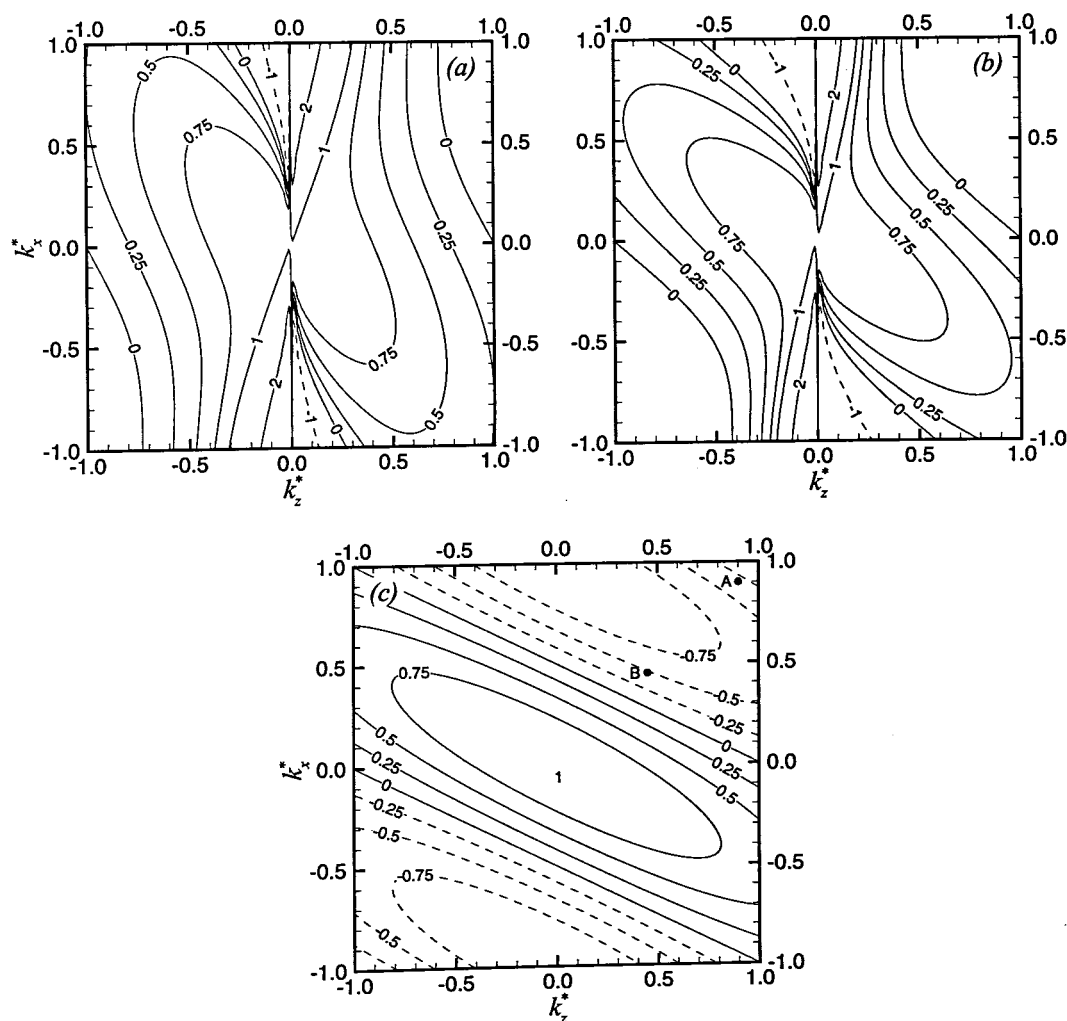


Figura 5.4: Quociente Q_2 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com segunda ordem de precisão, e da derivada exacta, para $\alpha = 15^\circ$ (a), 30° (b) e 45° (c), em função das componentes k_x^* e k_z^* do vector número de onda.

Usando novamente a propriedade da translação das séries de Fourier e as igualdades $e^{i\theta} - e^{-i\theta} = 2i \sin \theta$ e $e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2 \cos \theta$, as séries de Fourier destas derivadas discretizadas são dadas por

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta \phi}{\delta \xi} \right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k_x \Delta)}{3} [4 - \cos(k_x \Delta)] \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \\ \left(\frac{\delta \phi}{\delta \eta} \right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k_y \Delta)}{3} [4 - \cos(k_y \Delta)] \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \\ \left(\frac{\delta \phi}{\delta \zeta} \right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k'_z \Delta)}{3} [4 - \cos(k'_z \Delta)] \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \end{aligned}$$

em que k'_z é o já definido em (5.7). As séries das derivadas relativamente às direcções Cartesianas são dadas por

$$\left(\frac{\delta \phi}{\delta x} \right)_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k_x \Delta)}{3\Delta} [4 - \cos(k_x \Delta)] \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \quad (5.12)$$

$$\left(\frac{\delta \phi}{\delta y} \right)_{i,j,k} = \sum_{l,m,n} i \frac{\sin(k_y \Delta)}{3\Delta} [4 - \cos(k_y \Delta)] \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}, \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta \phi}{\delta z} \right)_{i,j,k} &= \sum_{l,m,n} i \left\{ \frac{\sin(k'_z \Delta)}{3\Delta} [4 - \cos(k'_z \Delta)] + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sin(k_x \Delta)}{3\Delta} [4 - \cos(k_x \Delta)] \tan \alpha \right\} \hat{\phi}_{l,m,n} e^{i \mathbf{k}_{l,m,n} \cdot \mathbf{x}_{i,j,k}}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Tal como no esquema com segunda ordem de precisão, as expressões (5.12) e (5.13) são semelhantes às que se obtêm numa malha ortogonal e (5.14) depende, adicionalmente, de k_x e de $\tan \alpha$. De modo idêntico ao que se fez anteriormente, definiu-se o quociente entre os modos de Fourier da derivada discretizada (5.14) e da derivada exacta (5.5), já com os números de onda normalizados:

$$Q_4 = \frac{\sin(k'_z \pi) [4 - \cos(k'_z \pi)] - \sin(k_x^* \pi) [4 - \cos(k_x^* \pi)] \tan \alpha}{3 k_z^* \pi}. \quad (5.15)$$

Tal como em Q_2 , o índice '4' refere-se à ordem de precisão do esquema de diferenças finitas.

A figura 5.5 patenteia esta relação para uma malha ortogonal ($\alpha = 0^\circ$). A curva tem uma forma semelhante à do esquema com segunda ordem de precisão (figura 5.3), mas mostra que as diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão proporcionam uma precisão acrescida em todos os números de onda.

Nas malhas não-ortogonais consideradas, o quociente Q_4 (figura 5.6) foi semelhante a Q_2 (figura 5.4). Como principais diferenças, notou-se que as áreas em que $0.75 < Q_4 < 1$

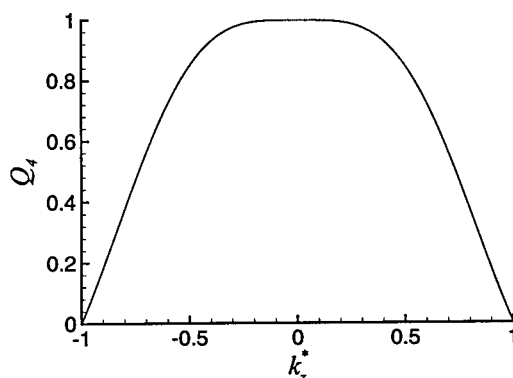


Figura 5.5: Quociente Q_4 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão, e da derivada exacta, na malha ortogonal ($\alpha = 0^\circ$), em função da componente k_z^* do vector número de onda.

e em que $|Q_4| > 1$ eram maiores que as áreas em que $0.75 < Q_2 < 1$ e em que $|Q_2| > 1$ (figura 5.4). Estes dois factos são contraditórios no que se refere à precisão adicional que este esquema deveria proporcionar em relação ao de segunda ordem, pois o aumento da área em que $0.75 < Q_4 < 1$ favorece-a, enquanto o aumento da área em que $|Q_4| > 1$ a piora. As descontinuidades observadas em Q_2 , quando $k_x^* \neq 0$, $k_z^* = 0$ e $\alpha = 15$ ou 30° , também existiam em Q_4 (figura 5.6a e b). Visto este esquema não ter sido utilizado nas simulações efectuadas, não foi possível avaliar que tendência prevaleceria.

Tal como no esquema com segunda ordem de precisão, o aumento de resolução da malha pode degradar a precisão com que são resolvidos alguns dos modos de Fourier, de modo que o efeito global dependerá da forma do espectro.

5.3.2 Campos Iniciais

Em cada domínio, obtivemos três campos de velocidade iniciais para a malha com 64^3 nós (diferiam na *semente* do gerador de números aleatórios) e um para a malha com 128^3 nós. Utilizou-se o gerador de números aleatórios RAN0, descrito no capítulo 7 do livro “*Numerical Recipes in FORTRAN*” (Press et al., 1993), pois foi o que permitiu obter o melhor compromisso entre a qualidade e o tempo de computação necessário, quando comparado com os outros algoritmos descritos no mesmo livro e com o gerador da máquina (Silicon Graphics Power Challenge). O mesmo conjunto de sementes foi usado com todas as inclinações da malha, para que os campos obtidos tivessem as mesmas características. O facto de dispormos de três campos de velocidade por cada domínio discretizado com a malha de 64^3 nós permitiu-nos obter uma estimativa das variações dos diversos parâmetros comparados ao longo das simulações associadas à utilização de campos iniciais diferentes e ter amostras maiores para o cálculo de estatísticas.



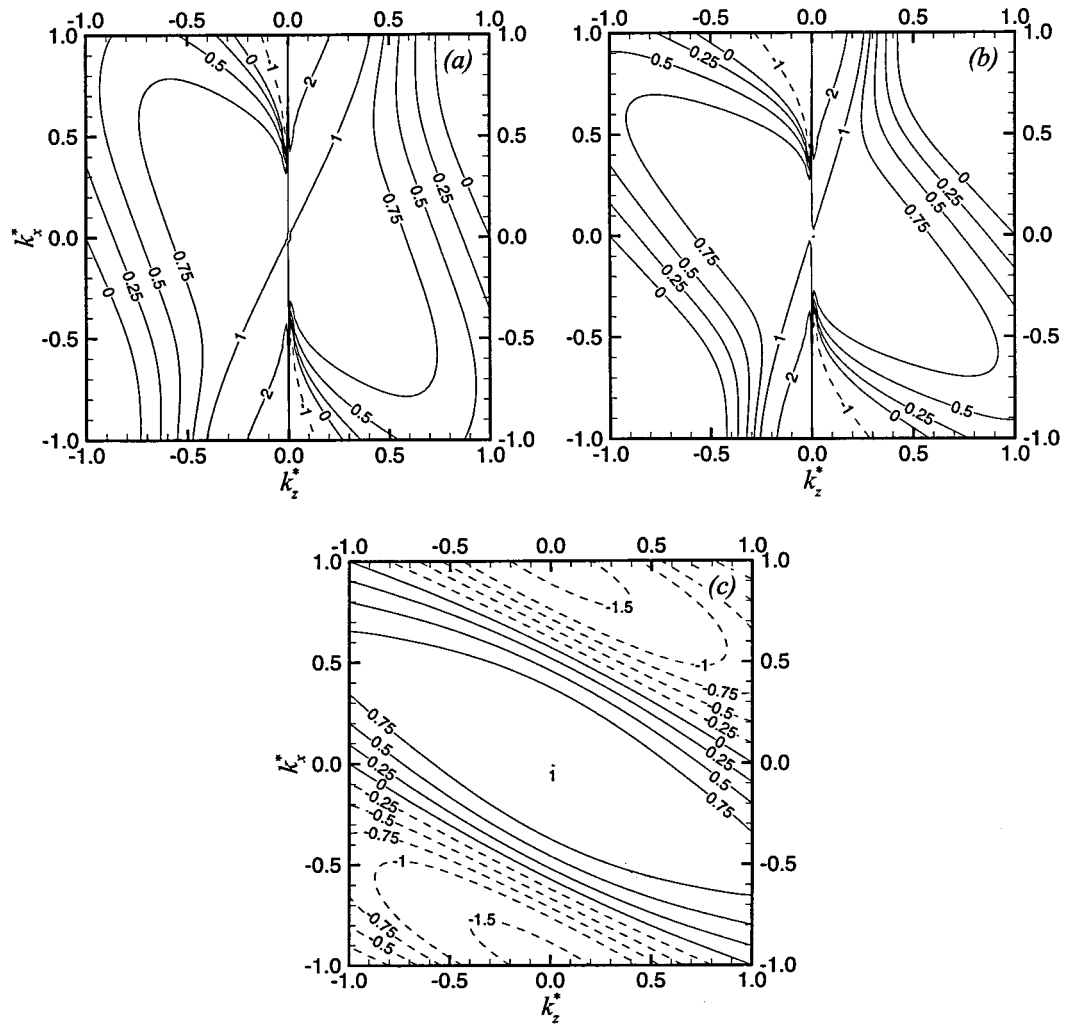


Figura 5.6: Quociente Q_4 entre as amplitudes dos modos de Fourier da derivada discretizada, usando diferenças finitas centrais com quarta ordem de precisão, e da derivada exacta, para $\alpha = 15^\circ$ (a), 30° (b) e 45° (c), em função das componentes k_x^* e k_z^* do vector número de onda.



Malha com 64 ³ nós			
$\angle(z, \zeta)$	$\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$	$\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$
0°	0.303, 0.392, 0.305	0.343, 0.295, 0.362	2.000
	0.333, 0.327, 0.341	0.341, 0.365, 0.294	2.000
	0.306, 0.334, 0.360	0.345, 0.328, 0.327	2.000
15°	0.310, 0.398, 0.292	0.377, 0.338, 0.285	1.897
	0.333, 0.336, 0.331	0.383, 0.377, 0.240	1.876
	0.301, 0.334, 0.365	0.370, 0.350, 0.280	1.942
30°	0.301, 0.408, 0.291	0.378, 0.339, 0.283	1.909
	0.320, 0.347, 0.333	0.402, 0.368, 0.230	1.876
	0.317, 0.322, 0.361	0.370, 0.353, 0.278	1.940
45°	0.303, 0.392, 0.305	0.341, 0.294, 0.364	1.997
	0.332, 0.327, 0.340	0.340, 0.363, 0.296	1.997
	0.305, 0.334, 0.361	0.344, 0.327, 0.329	1.998

Malha com 128 ³ nós			
$\angle(z, \zeta)$	$\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$	$\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$
0°	0.272, 0.391, 0.337	0.361, 0.318, 0.321	2.000
15°	0.279, 0.384, 0.337	0.420, 0.356, 0.224	1.857
30°	0.295, 0.387, 0.318	0.446, 0.349, 0.205	1.847
45°	0.272, 0.391, 0.337	0.361, 0.318, 0.321	2.000

Tabela 5.1: Medidas da isotropia dos campos no instante $t = 0$ s. Cada linha da tabela corresponde a uma simulação diferente.

Como a técnica de geração desses campos iniciais não tinha sido previamente aplicada em malhas não-ortogonais, investigou-se se eles tinham as características pretendidas. Utilizou-se a distribuição das flutuações da velocidade e da vorticidade pelas três componentes Cartesianas, pois são consideradas medidas da isotropia das grandes e das pequenas escalas, respectivamente. Além disso, uma vez que os efeitos da não-ortogonalidade da malha se faziam sentir através das derivadas, a vorticidade era um bom parâmetro para os avaliar. A relação isotrópica

$$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle = 2, \quad (5.16)$$

em que $\text{tr}(\mathcal{S}^2) = \sum S_{ij}S_{ji}$, é o traço do tensor quadrado das taxas de deformação, também foi verificada (tabela 5.1).

Nos domínios não-ortogonais, a repartição das flutuações de velocidade pelas componentes Cartesianas não mostrou qualquer desvio sistemático que possa ser atribuído à não-ortogonalidade. As diferenças entre os diversos domínios deveram-se à circunstância de os pontos da malha corresponderem a localizações diferentes no espaço físico e à obri-

gação da continuidade ser satisfeita no espaço discreto. Os campos obtidos apresentaram um desvio máximo relativamente ao valor isotrópico ($1/3$) de 12% na malha com 64^3 nós e 18% na malha com 128^3 nós, não tendo sido atribuído qualquer significado ao facto de o valor ser maior na malha mais fina. Como no algoritmo de geração se tinha utilizado $\langle u_i^2 \rangle = 1 \text{ (cm/s)}^2$, considerámos aceitáveis desvios com esta ordem de grandeza na distribuição das flutuações da velocidade e da vorticidade pelas três componentes Cartesianas.

Já a distribuição das flutuações de vorticidade foi afectada pela inclinação do domínio. Nos domínios com 15° e 30° de inclinação, as flutuações de ω_x e ω_y foram sempre maiores que no domínio ortogonal, enquanto que as flutuações de ω_z foram menores. Tendo em conta a inclinação dos domínios e que as derivadas em ordem a z de componentes da velocidade entram apenas no cálculo das componentes ω_x e ω_y da vorticidade, a causa deste comportamento foi atribuída à descontinuidade existente no quociente Q_2 (5.11), entre os modos da derivada discretizada e exacta (figura 5.4). O facto de os valores registados no domínio com 45° de inclinação serem idênticos aos do domínio ortogonal impediu que a causa deste comportamento pudesse ser atribuída à existência de valores negativos nesse quociente. A utilização de uma malha mais fina acentuou a distribuição desigual das flutuações de vorticidade nos domínios com 15° e 30° de inclinação, mas permitiu obter os mesmos resultados do domínio ortogonal no domínio com 45° de inclinação. Tanto no domínio ortogonal como naquele com 45° de inclinação, o desvio máximo da distribuição das flutuações de vorticidade relativamente ao valor isotrópico foi de 12%, tal-qualmente sucedeu nos campos de velocidade da malha mais grossa.

A relação isotrópica (5.16) também mostrou que os campos gerados nos domínios não-ortogonais eram menos isotrópicos que os do domínio ortogonal. Enquanto neste último foi sempre satisfeita até à terceira casa decimal (erro inferior a 0.05%), nos domínios com 15° e 30° de inclinação apresentou um erro máximo de 8% e de 0.2% no domínio com 45° de inclinação. Também aqui o efeito da malha mais fina foi contraditório, pois com a malha com 128^3 nós o erro foi maior nos domínios com 15° e 30° de inclinação e menor no domínio com 45° . Siggia (1981) observou um desvio máximo de 1% na satisfação desta relação, durante simulações de turbulência estacionária. Dado que as quantidades que nela intervêm (taxas de deformação e vorticidade) são proporcionais a derivadas do campo de velocidade, este comportamento também foi atribuído à forma de cálculo das derivadas. No entanto, ao contrário da distribuição das flutuações de vorticidade, neste caso o domínio com 45° de inclinação também foi afectado (embora só na malha com 64^3 nós).

As distribuições estatísticas da velocidade, das suas derivadas longitudinal e lateral ($\partial u/\partial x$ e $\partial u/\partial y$) e da vorticidade foram estudadas, recorrendo às funções densidade de probabilidade (PDF — *Probability Density Function*) respectivas; deviam ser Gaussianas, devido às características do método de geração utilizado. As funções representadas aqui foram sempre determinadas considerando os campos isotrópicos, o que permitiu aumentar a dimensão das amostras usando, por exemplo, as componentes u , v e w da velocidade na determinação da função densidade de probabilidade de u . No entanto, já se verificou que os campos iniciais nos domínios não-ortogonais eram, sequer, menos isotrópicos que os do

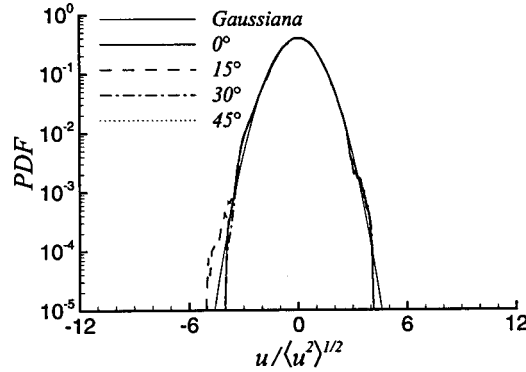


Figura 5.7: Funções densidade de probabilidade normalizadas da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

domínio ortogonal, principalmente nos domínios com 15 e 30° de inclinação. Diferenças que existam relativamente a funções determinadas sem invocar a isotropia dos campos serão referidas no texto.

A distribuição da velocidade inicial foi Gaussiana em todos os domínios considerados, tivesse a malha 64^3 nós (figura 5.7) ou 128^3 nós. No entanto, as distribuições das derivadas longitudinal e lateral da velocidade e da vorticidade, nos domínios com 15 e 30° de inclinação, mostraram caudas mais largas que a distribuição Gaussiana (figuras 5.8 e 5.9). Nesses casos, uma análise das funções obtidas sem invocar a isotropia mostrou que as caudas mais largas eram provocadas pela derivada $\partial w / \partial z$ nas distribuições da derivada longitudinal, pela derivada $\partial v / \partial z$ nas distribuições da derivada lateral e pelas componentes ω_x e ω_y nas distribuições da vorticidade. Como o domínio com 45° de inclinação não foi afectado, atribuiu-se novamente a causa deste comportamento à descontinuidade existente no quociente Q_2 nas malhas com 15 e 30° de inclinação. A utilização de uma malha mais fina não atenuou este comportamento, pois as funções densidade de probabilidade calculadas na malha com 128^3 nós mostraram caudas ainda maiores (figuras 5.10 e 5.11). Apesar do desvio evidente das distribuições relativamente à distribuição Gaussiana, note-se que ele é acentuado na representação gráfica pela utilização de uma escala vertical logarítmica. A sua influência nos parâmetros da tabela 5.1 foi reduzida, uma vez que, nos domínios com 15 e 30° de inclinação, os valores mais elevados nas caudas das funções densidade de probabilidade nunca excederam 10^{-3} .

Uma vez que a não-ortogonalidade da malha afectou quantidades relacionadas com a derivada em ordem a z das componentes da velocidade, verificou-se também de que forma foi influenciado o espectro da dissipação. Dada a relação existente entre este e o espectro de energia ($D(k, t) = 2\nu k^2 E(k, t)$), deveríamos ter $D(k, 0) = 2\nu A k^6 e^{-Bk^2}$, em que A e B são os já definidos na página 92. O espectro foi semelhante em todos os domínios e conforme ao imposto na geração do campo de velocidade (figura 5.12). Salienta-se apenas

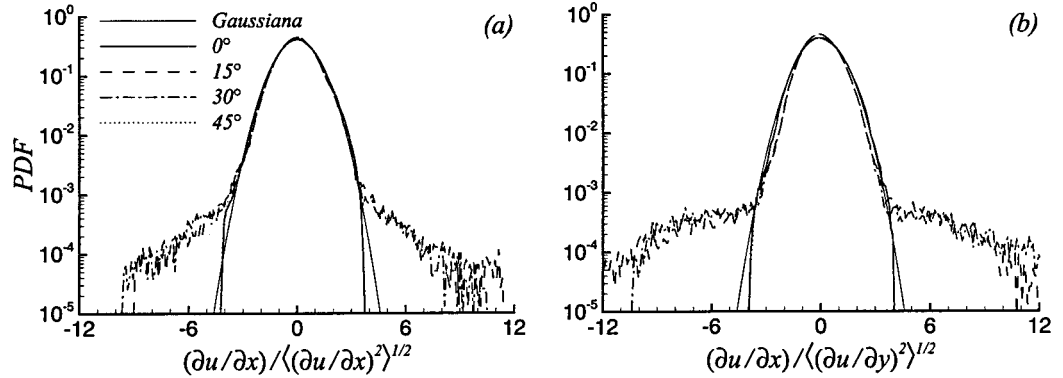


Figura 5.8: Funções densidade de probabilidade normalizadas das derivadas longitudinal (a) e lateral (b) da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

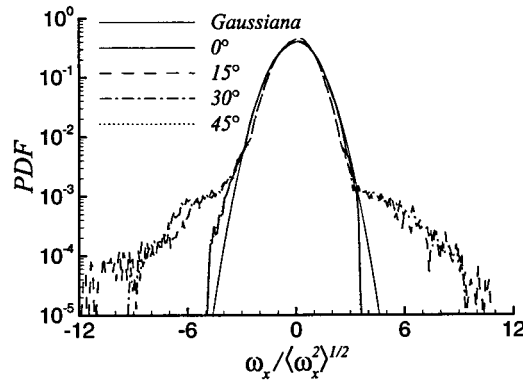


Figura 5.9: Funções densidade de probabilidade normalizadas da vorticidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

que, para $k > 8$, os valores nos domínios com 15 e 30° de inclinação eram superiores, tanto na malha com 64^3 nós como na malha com 128^3 nós. Não nos foi possível determinar se esses valores eram reais ou um erro numérico cometido no cálculo dos espectros nas malhas não-ortogonais, visto que nesse caso é necessário recorrer à definição de transformada de Fourier e não podem utilizar-se os procedimentos habituais em malhas Cartesianas (FFT — *Fast Fourier Transform*). No entanto, as diferenças verificadas aqui foram menores que as verificadas na distribuição das flutuações de vorticidade pelas três componentes Cartesianas ou nas distribuições estatísticas.

Também foram verificados os valores próprios do tensor das taxas de deformação $\mathcal{S}$ (λ_1 , λ_2 e λ_3). λ_1 é o menor e é sempre negativo e λ_3 , o maior e sempre positivo (a continuidade implica que $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0$). λ_2 é positivo se $|\lambda_1| > |\lambda_3|$, ou negativo no caso contrário. Atento o modo aleatório como tinham sido gerados os campos de velocidade, esperava-se

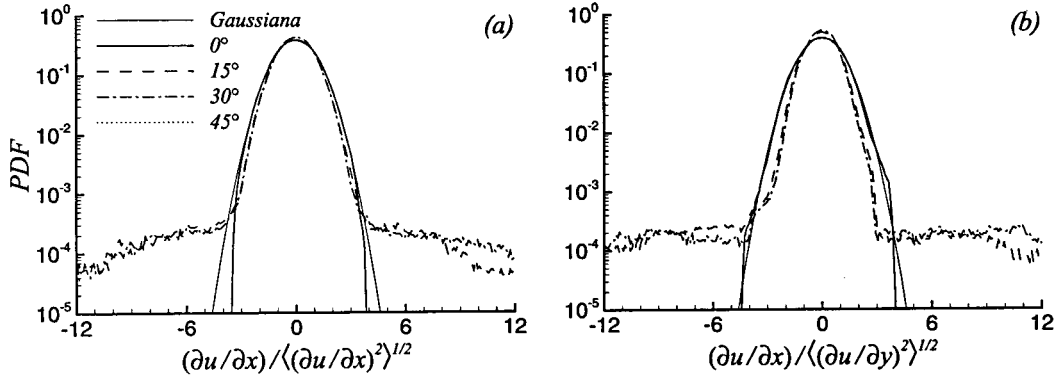


Figura 5.10: Funções densidade de probabilidade normalizadas das derivadas longitudinal (a) e lateral (b) da velocidade (calculadas nas malhas com 128^3 nós), no instante $t = 0$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

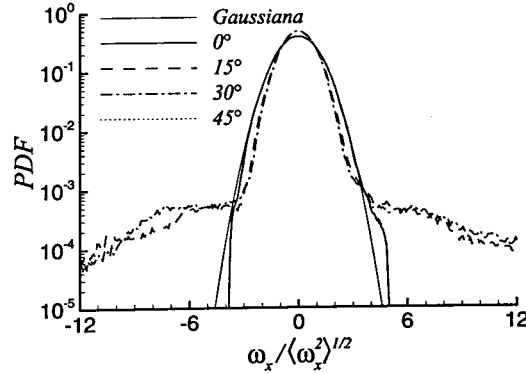


Figura 5.11: Funções densidade de probabilidade normalizadas da vorticidade (calculadas nas malhas com 128^3 nós), no instante $t = 0$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

que λ_2 fosse positivo em aproximadamente 50% do domínio. Os valores verificados em todos os domínios, tanto com a malha com 64^3 nós como com a malha com 128^3 nós, situaram-se no intervalo entre 47 e 50%, não tendo os domínios não-ortogonais mostrado qualquer desvio sistemático relativamente ao ortogonal.

O alinhamento entre a vorticidade e as taxas de deformação principais também foi verificado. Se e_1 , e_2 e e_3 são os vectores próprios associados aos valores próprios λ_1 , λ_2 e λ_3 , o ângulo θ_i , entre a vorticidade e a direcção principal da taxa de deformação representada pelo vector próprio e_i , é calculado por

$$\theta_i = \arccos \frac{|\omega \cdot e_i|}{\|\omega\| \|e_i\|}. \quad (5.17)$$

Também por causa do processo aleatório como tinham sido gerados os campos de velo-

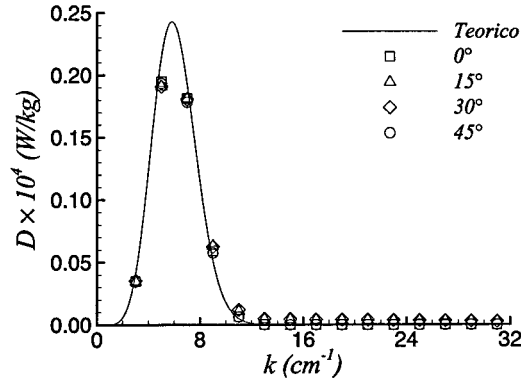


Figura 5.12: Espectro da dissipação (calculado na malha com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s.

cidade iniciais, esperava-se que as funções densidade de probabilidade dos ângulos θ_1 , θ_2 e θ_3 fossem semelhantes às do ângulo entre um vector e uma direcção quaisquer. Essas semelhanças existiram, mas todas mostraram que ângulos superiores a cerca de 50° eram mais prováveis que no caso aleatório (figura 5.13); essas diferenças podem ser devidas ao facto de a vorticidade e as direcções principais das taxas de deformação não serem totalmente independentes, mas resultantes do mesmo campo de velocidade. No entanto, também aqui não existiu qualquer desvio sistemático das funções densidade de probabilidade calculadas nos domínios não-ortogonais relativamente às do ortogonal.

5.3.3 Evolução Temporal de Parâmetros Estatísticos

Após o estudo dos campos iniciais, comparou-se a evolução temporal de parâmetros significativos para o estudo da turbulência, como a energia cinética da turbulência e os coeficientes de simetria e de achatamento das derivadas da velocidade.

Embora a energia cinética da turbulência tenha decrescido de modo idêntico em todos os domínios, no final das simulações o domínio ortogonal possuía sempre mais energia que os outros e o domínio com 30° de inclinação, menos (figura 5.14). A diferença entre eles era aproximadamente 7%, tanto na malha com 64^3 nós como na com 128^3 nós. A evolução no domínio com 45° de inclinação foi a mais próxima da do domínio ortogonal, como mostra a diferença de 1% na energia no final das simulações. No domínio com 15° de inclinação, o decaimento da energia era intermédio entre o do domínio ortogonal e o do domínio com 30° de inclinação.

O coeficiente de simetria da derivada longitudinal da velocidade, definido por

$$S_{\partial u / \partial x} = - \frac{\langle (\partial u / \partial x)^3 \rangle}{\langle (\partial u / \partial x)^2 \rangle^{1.5}},$$

é uma medida adimensional da produção de enstrofia e da transferência de energia devido

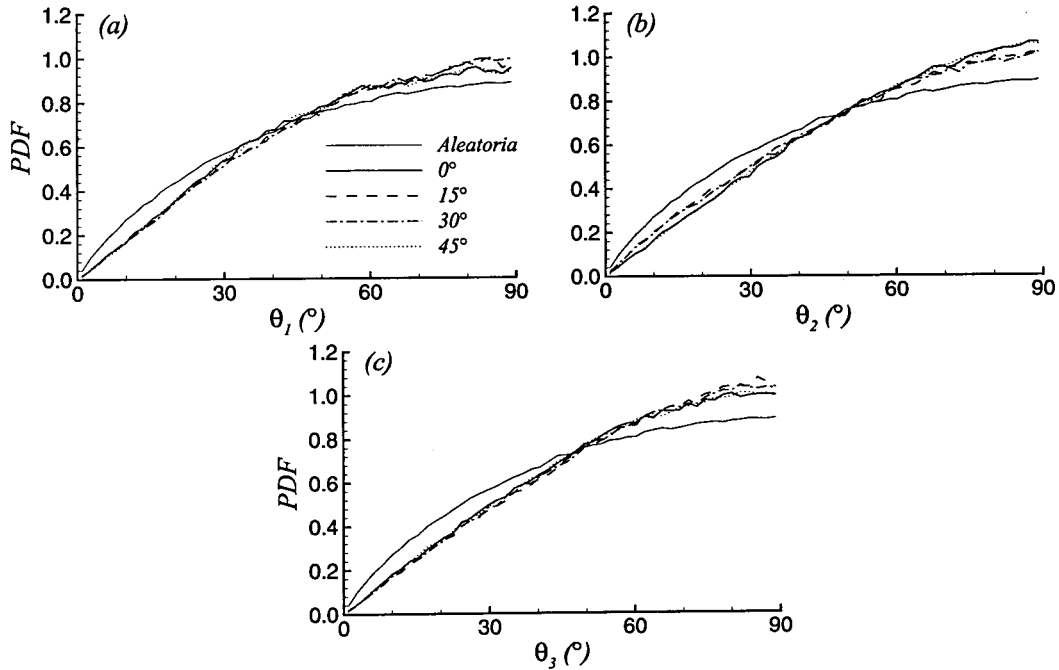


Figura 5.13: Funções densidade de probabilidade dos ângulos entre a vorticidade e as taxas de deformação principais (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0$ s, mostradas juntamente com a do ângulo entre um vector e uma direcção aleatórios.

a interações não-lineares. A sua evolução foi semelhante em todos os domínios, com qualquer das duas malhas utilizadas, e idêntica à observada por Orszag and Patterson (1972) (figura 5.15). As diferenças entre os domínios não-ortogonais e o ortogonal, que podiam atingir 7%, foram consideradas aceitáveis, por serem da mesma ordem das que ocorreram entre as três simulações realizadas no domínio ortogonal com a malha com 64^3 nós.

O coeficiente de achatamento das derivadas longitudinal e lateral da velocidade,

$$F_{\partial u / \partial x} = \frac{\langle (\partial u / \partial x)^4 \rangle}{\langle (\partial u / \partial x)^2 \rangle^2},$$

$$F_{\partial u / \partial y} = \frac{\langle (\partial u / \partial y)^4 \rangle}{\langle (\partial u / \partial y)^2 \rangle^2},$$

proporciona informação acerca do alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação principais (Siggia, 1981). No entanto, já se verificou que as distribuições iniciais das derivadas da velocidade nos domínios com 15 e 30° de inclinação têm caudas mais largas que a Gaussiana (figura 5.8), a que corresponde um coeficiente de achatamento mais elevado, sem que o alinhamento entre a vorticidade e as taxas de deformação principais tenha sido afectado (figura 5.13).

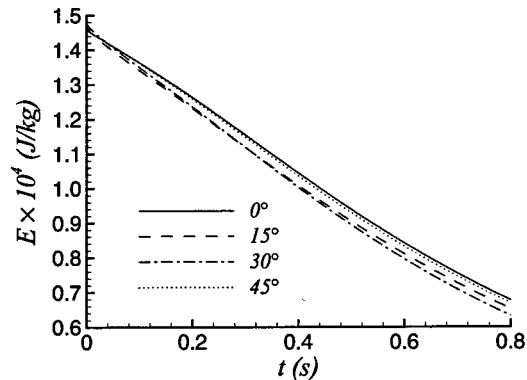


Figura 5.14: Evolução temporal da energia cinética da turbulência nas simulações com a malha com 64^3 nós.

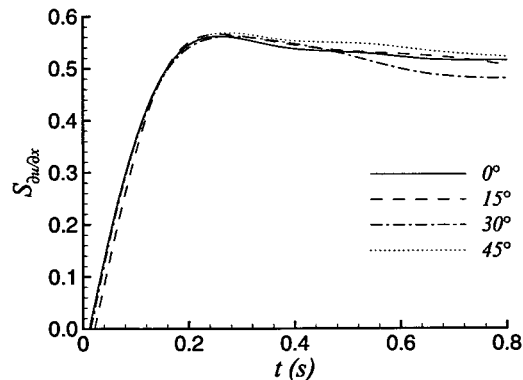


Figura 5.15: Evolução temporal do coeficiente de simetria da derivada longitudinal da velocidade nas simulações com a malha com 64^3 nós.

A evolução do coeficiente de achatamento mostra os valores iniciais mais elevados nos domínios com 15° e 30° de inclinação: aproximadamente três vezes mais para a derivada longitudinal e seis vezes para a derivada lateral (figura 5.16). Uma diferença entre as duas foi a redução do coeficiente de achatamento da derivada longitudinal em apenas um passo temporal (0.004 s na malha com 64^3 nós e 0.002 s na malha com 128^3 nós), enquanto a derivada lateral necessitou de cerca de 0.3 s (cerca de metade do *eddy turnover time*). É provável que tal esteja associado ao facto de as derivadas longitudinais da velocidade intervirem na equação da continuidade. Assim, a pressão determinada pelo algoritmo actuará de modo a corrigir num só passo temporal o comportamento anómalo nos domínios com 15° e 30° de inclinação. A evolução no domínio com 45° de inclinação foi a mais semelhante à do domínio ortogonal, o que se deveu ao facto de as distribuições iniciais das derivadas não apresentarem as caudas maiores. Após os 0.3 s em que se verificou a redução do coeficiente de achatamento da derivada lateral, a diferença máxima entre os diversos domínios foi de aproximadamente 10%. Tal como no coeficiente de simetria, esta diferença era da mesma ordem da verificada entre as três simulações realizadas no domínio ortogonal.

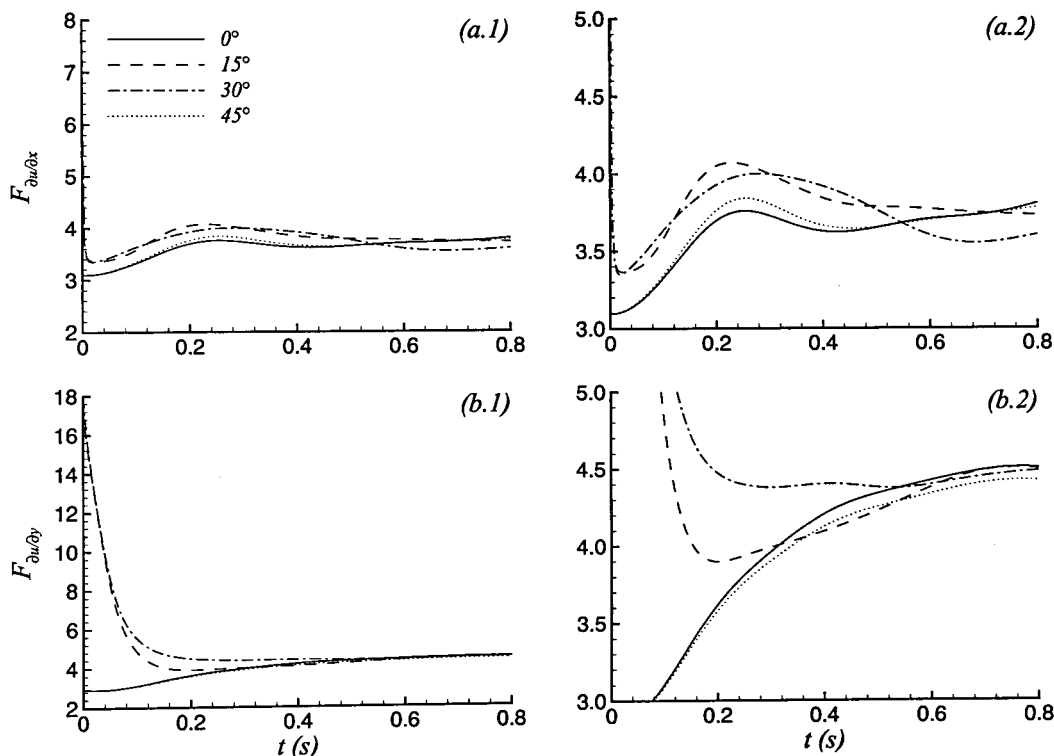


Figura 5.16: Evolução temporal do coeficiente de achatamento da derivada longitudinal (a) e lateral (b) da velocidade nas simulações com a malha com 64^3 nós.

Observámos, tal como Vincent and Meneguzzi (1991), que o coeficiente de achatamento da derivada lateral da velocidade era superior ao da derivada longitudinal. No entanto, nesse caso, em que $Re_\lambda \approx 150$, os valores ($F_{\partial u / \partial x} = 5.9$ e $F_{\partial u / \partial y} = 8.0$) eram superiores aos referidos aqui ($F_{\partial u / \partial x} = 3.6$ e $F_{\partial u / \partial y} = 4.5$).

5.3.4 Campos Após o Decaimento

A evolução temporal de parâmetros estatísticos mostrou que as diferenças entre as simulações efectuadas nos domínios com inclinações diferentes eram da mesma ordem das existentes entre simulações iniciadas com campos de velocidade diferentes no domínio ortogonal. No entanto, as características dos campos deviam ser verificadas em momentos diferentes das simulações. Aqui apresentaremos alguns resultados obtidos no final ($t = 0.8$ s).

A isotropia dos campos foi novamente verificada nas escalas maiores e mais pequenas (velocidade e vorticidade) e pela relação isotrópica (5.16) (tabela 5.2). Após o decaimento, as distribuições das flutuações de velocidade e vorticidade nos domínios não-ortogonais eram mais próximas das do domínio ortogonal que no início das simulações, não tendo sido significativamente afectadas pela menor isotropia inicial. Embora tenham apresentado

Malha com 64^3 nós			
$\angle(z, \zeta)$	$\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$	$\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$
0°	0.336, 0.348, 0.316	0.336, 0.332, 0.331	2.000
	0.360, 0.339, 0.302	0.332, 0.333, 0.335	2.000
	0.259, 0.372, 0.369	0.308, 0.342, 0.350	2.000
15°	0.341, 0.360, 0.299	0.361, 0.313, 0.327	2.000
	0.373, 0.331, 0.296	0.328, 0.340, 0.332	2.000
	0.258, 0.376, 0.366	0.314, 0.323, 0.363	2.000
30°	0.321, 0.358, 0.321	0.357, 0.320, 0.323	2.000
	0.347, 0.338, 0.315	0.333, 0.321, 0.346	2.000
	0.286, 0.385, 0.330	0.327, 0.329, 0.344	2.000
45°	0.337, 0.353, 0.311	0.341, 0.322, 0.337	2.000
	0.365, 0.340, 0.296	0.336, 0.323, 0.341	2.000
	0.260, 0.374, 0.365	0.313, 0.329, 0.359	2.000

Malha com 128^3 nós			
$\angle(z, \zeta)$	$\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$	$\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$
0°	0.239, 0.435, 0.326	0.326, 0.342, 0.332	2.000
15°	0.266, 0.407, 0.327	0.334, 0.328, 0.338	2.000
30°	0.275, 0.412, 0.313	0.339, 0.329, 0.331	2.000
45°	0.239, 0.436, 0.325	0.328, 0.339, 0.333	2.000

Tabela 5.2: Medidas da isotropia dos campos no instante $t = 0.8$ s.

diferenças que podiam atingir os 10%, foram sempre qualitativamente semelhantes. Veja-se, por exemplo, que a terceira simulação realizada com a malha com 64^3 nós apresentou sempre um valor reduzido para as flutuações de u_x (comparando com u_y e u_z). Além disso, se as diferenças na distribuição das flutuações de vorticidade eram maiores na malha com 128^3 nós inicialmente, tal já não se verificou no fim, em que foram de aproximadamente 5%. No entanto, como apenas se realizou uma simulação com essa malha em cada domínio, não estamos certos da repetibilidade deste facto. Ao contrário do acontecido nos campos iniciais, a relação isotrópica (5.16) foi satisfeita em todos os domínios com um erro inferior a 0.05%.

A distribuição estatística da velocidade (figura 5.17) era idêntica em todos os domínios e aproximadamente Gaussiana, como resulta do conhecimento de simulações anteriores (Schumann, 1985).

A distribuição da pressão nos diversos domínios também era semelhante: exponencial nas pressões baixas e Gaussiana nas altas, como em Métais and Lesieur (1992).

As distribuições estatísticas da derivada longitudinal e lateral da velocidade e da vor-

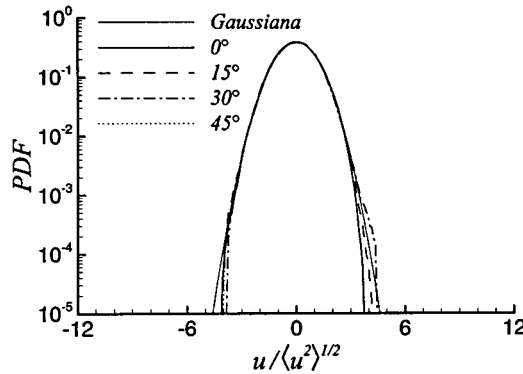


Figura 5.17: Funções densidade de probabilidade normalizadas (calculadas nas malhas com 64^3 nós) da velocidade, no instante $t = 0.8$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

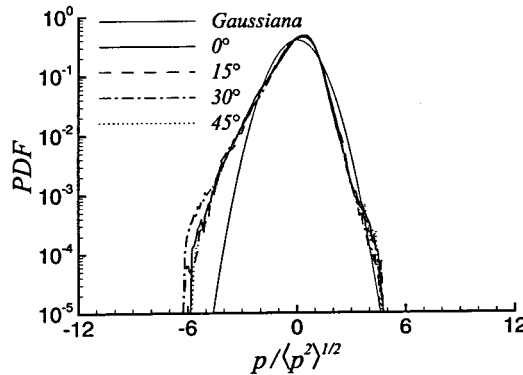


Figura 5.18: Funções densidade de probabilidade normalizadas da pressão (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

ticidade (figuras 5.19 e 5.20), nos domínios com inclinações diferentes, eram semelhantes. Era visível alguma variação nas caudas, que atribuímos à dimensão limitada das amostras.

Kerr (1985) descobriu e Vincent and Meneguzzi (1991) confirmaram que, em geral, a maior taxa de deformação principal é de contração e perpendicular à vorticidade, a menor taxa de deformação principal de extensão está alinhada com a vorticidade e a maior é-lhe perpendicular. Nas nossas simulações, a taxa de deformação principal λ_2 era positiva e, consequentemente, λ_1 era a maior taxa de deformação principal em valor absoluto em aproximadamente 77% do domínio, qualquer que fosse a inclinação. Este valor era mais elevado que os 67% referidos por Vincent and Meneguzzi (1991) para $Re_\lambda \approx 150$. Para verificar se as diferentes inclinações do domínio alteravam o alinhamento entre a vorticidade e as taxas de deformação principais, estudámos as funções densidade de probabilidade dos ângulos θ_i , definidos em (5.17). As suas distribuições nos diferentes domínios eram simi-

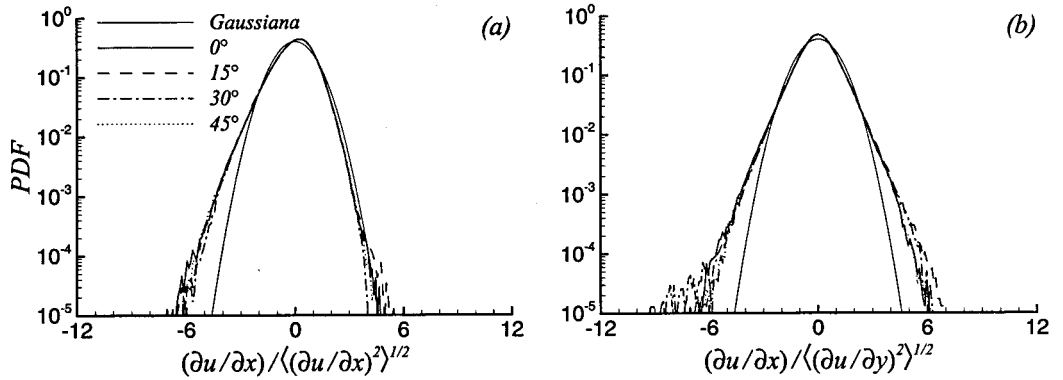


Figura 5.19: Funções densidade de probabilidade normalizadas das derivadas longitudinal (a) e lateral (b) da velocidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

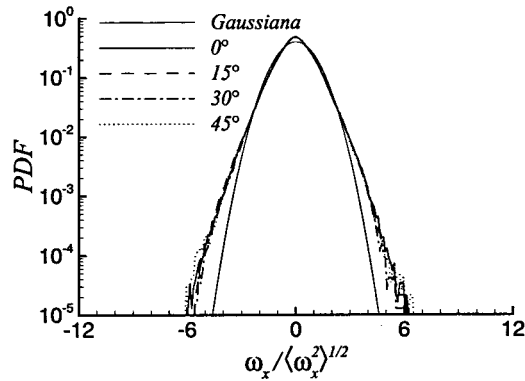


Figura 5.20: Funções densidade de probabilidade normalizadas da vorticidade (calculadas nas malhas com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s, mostradas juntamente com a de uma distribuição Gaussiana.

lares, não tendo sido afectadas pela inclinação do domínio (figura 5.21). As distribuições de θ_1 mostraram que ângulos maiores que 65° eram mais frequentes que na distribuição aleatória, enquanto as distribuições de θ_2 indicavam que ângulos menores que 45° eram mais frequentes. Estas distribuições tinham-se alterado significativamente no decurso das simulações, não se tendo verificado o mesmo com as distribuições de θ_3 (compare-se com a figura 5.13), que mostravam que ângulos maiores que 60° eram mais frequentes que no caso aleatório.

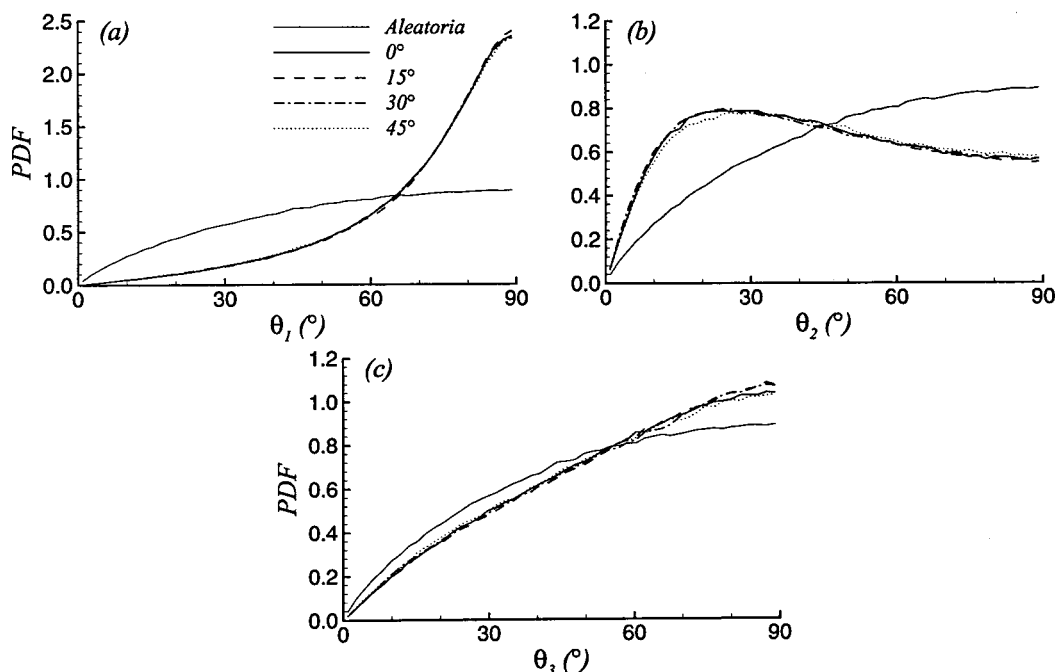


Figura 5.21: Funções densidade de probabilidade dos ângulos entre a vorticidade e as taxas de deformação principais (calculadas na malha com 64^3 nós), no instante $t = 0.8$ s, mostradas juntamente com a do ângulo entre um vector e uma direcção aleatórios.

5.4 Conclusões

Realizaram-se simulações do decaimento da turbulência isotrópica, usando a técnica dos volumes finitos e uma malha não-ortogonal não-desfasada, com o objectivo de estudar a influência da não-ortogonalidade da malha nas simulações da turbulência. Foram considerados quatro domínios, diferentes no ângulo entre a direcção física z e a direcção computacional ζ : 0° (domínio ortogonal, usado como referência), 15° , 30° e 45° .

Em todos os domínios foram gerados campos de velocidade iniciais idênticos, com um espectro de energia e correlações impostos. No entanto, devido ao modo como eram calculadas as derivadas nos domínios não-ortogonais, os campos iniciais da vorticidade e o tensor das taxas de deformação não eram idênticos. Isso influenciou, por exemplo, as distribuições estatísticas das derivadas da velocidade e da vorticidade, que apresentaram caudas mais largas nos domínios com 15° e 30° de inclinação. Todavia, durante o decaimento da turbulência as diferenças atenuaram-se e as distribuições nos diversos domínios tornaram-se idênticas após 0.3 s, cerca de metade do *eddy turnover time*.

Quando as distribuições estatísticas das derivadas da velocidade e da vorticidade eram semelhantes, as diferenças na evolução do coeficiente de simetria da derivada longitudinal da velocidade (relacionado com a transferência de energia) e do coeficiente de achatamento

das derivadas longitudinal e lateral da velocidade (relacionado com o alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação principais) eram inferiores a 10% e da mesma ordem das diferenças observadas em simulações iniciadas com campos de velocidade diferentes no domínio ortogonal. No final das simulações ($t = 0.8$ s), os domínios não-ortogonais tinham menos energia cinética turbulenta que o ortogonal, mas a diferença não excedeu os 7%. O domínio que mostrou uma evolução mais semelhante ao domínio ortogonal foi o com 45° de inclinação.

Finalmente, as diferentes inclinações do domínio não afectaram nem a isotropia, nem as correlações entre a vorticidade e as taxas de deformação principais. Em geral, a vorticidade estava alinhada com a segunda direcção principal das taxas de deformação e era perpendicular às outras.

Como conclusão geral, pode estabelecer-se que a não-ortogonalidade da malha afectou as propriedades dos campos iniciais devido às diferenças resultantes do cálculo das derivadas do campo de velocidade. Contudo, essas diferenças atenuaram-se no decorrer das simulações, considerando-se que não eram suficientemente significativas para que não possa admitir-se a utilização de um sistema de coordenadas genérico na simulação numérica directa de escoamentos.

Capítulo 6

Simulação do Escoamento Atmosférico Sobre o Monte de Askervein

Conteúdo do Capítulo

Comparámos resultados de simulações do escoamento atmosférico sobre o monte de Askervein com resultados experimentais, para identificar os aspectos que devem ser melhorados no programa desenvolvido, de simulação das grandes escalas da turbulência (LES) em geometrias complexas, antes de ser utilizado no estudo de escoamentos atmosféricos. As simulações proporcionaram boas previsões do campo de velocidade médio, mas, junto do solo, as tensões de Reynolds resolvidas eram reduzidas, pois uma parte excessiva era contabilizada pelo modelo de Smagorinsky, para as tensões residuais. Existiu também alguma discrepância dos resultados em função do tempo de desenvolvimento do escoamento, associados à presença de zonas de recirculação na esteira do monte, mas considerámos que a modelação das tensões residuais junto de superfícies sólidas é o aspecto que necessita de maior desenvolvimento para se poderem simular adequadamente escoamentos atmosféricos sobre terreno complexo.

6.1 Introdução

A simulação de escoamentos atmosféricos sobre terreno complexo é útil em situações como, por exemplo, o cálculo das forças aerodinâmicas em estruturas, a previsão do estado do tempo e o estudo da dispersão de poluentes ou do potencial eólico de um dado local. O método da simulação das grandes escalas da turbulência (LES) é um dos que se pode

utilizar; porém, devido aos seus custos computacionais, é natural que seja mais usado para auxiliar o desenvolvimento de modelos de turbulência mais simples e complementar medições de campo do que para conhecer apenas algumas características do campo médio ou do campo turbulento. Até hoje, tem sido aplicado principalmente ao estudo da camada atmosférica convectiva (Moeng, 1984; Schimdt and Schumann, 1989; Coleman et al., 1990) ou da estratificação (Kaltenbach et al., 1994). Segundo Schumann (1993), parte do sucesso que tem encontrado deve-se ao facto de as tensões residuais, quando comparadas com as resolvidas, não serem muito significativas, de modo que a precisão do modelo de tensões residuais não é crítica.

Já a simulação de escoamentos atmosféricos em que a turbulência é influenciada por uma superfície sólida limita-se praticamente ao estudo da camada limite planetária de Mason and Thomson (1992) e de Mason and Brown (1994), embora, fora do âmbito dos escoamentos atmosféricos, existam vários trabalhos acerca do escoamento num canal (e.g., Moin and Kim, 1982; Kim et al., 1987). Tal acontece porque, próximo da superfície sólida, as tensões residuais são tão importantes como as resolvidas e observam-se correlações negativas entre elas e o tensor das taxas da deformação das grandes escalas, a que corresponde uma transferência de energia das escalas residuais para as resolvidas, que é impossível de prever pelos modelos de viscosidade turbilhonar vulgarmente utilizados (Härtel and Kleiser, 1993).

O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi aplicar o programa desenvolvido, de simulação das grandes escalas da turbulência em geometrias complexas, a um escoamento atmosférico sobre terreno complexo — no caso, o monte de Askervein. Este monte foi escolhido por se encontrar rodeado por um terreno praticamente plano, o que facilita a especificação das condições de fronteira, e por existirem medições experimentais detalhadas, tanto do campo médio como do campo turbulento (Taylor and Teunissen, 1983, 1985), com as quais é possível comparar os resultados das simulações. Acresce que, havendo uma tese de doutoramento em que o mesmo escoamento foi simulado usando o modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997), julgou-se útil dar continuidade ao estudo nela levado a cabo.

Os resultados obtidos levaram-nos a concluir que seria desejável dispor de recursos computacionais superiores àqueles que utilizámos, uma vez que, para melhorar os resultados do escoamento na esteira do monte, seria conveniente usar malhas com mais resolução e um tempo de desenvolvimento do escoamento maior (tempo simulado antes do início do cálculo das estatísticas). Por outro lado, o modelo de Smagorinsky utilizado não é capaz de prever a transferência de energia das escalas residuais para as resolvidas e os resultados junto do solo mostraram que as tensões de Reynolds eram contabilizadas em excesso pelo campo residual. Daí ser também conveniente usar um modelo de tensões residuais mais elaborado, capaz de prever a transferência de energia das escalas residuais para as escalas resolvidas.

6.2 Métodos

Nesta secção referem-se o modelo matemático e as técnicas numéricas utilizadas no trabalho descrito neste capítulo, com particular relevo do modelo de tensões residuais. Apresentam-se também o domínio de cálculo, as malhas, as condições de fronteira e iniciais utilizadas e o procedimento usado para obter uma condição de entrada que incluiu flutuações turbulentas das grandes escalas.

6.2.1 Modelo Matemático e Algoritmo

O modelo matemático era constituído pela equação da continuidade (2.15) e pelas equações de transporte de quantidade de movimento (2.16), sendo as propriedades do fluido as do ar à pressão de 1 atm e à temperatura de 20°C ($\rho = 1 \text{ kg/m}^3$ e $\mu = 1.8 \times 10^{-5} \text{ (N}\cdot\text{s)/m}^2$). Para a discretização dos fluxos convectivos e difusivos, usámos as diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão, enquanto na discretização temporal usámos o método de Runge-Kutta (4,3) (2.27) e, para integrar as equações discretizadas, o algoritmo semi-implícito descrito na secção 2.5.2.

O modelo de Smagorinsky, definido pelas expressões (2.17) e (2.18), foi utilizado para a modelação das tensões residuais. Conforme já referimos, este modelo não é capaz de prever a redução do comprimento característico das escalas residuais que deve ocorrer junto de uma superfície sólida, de modo que o comprimento $\ell_s = C_s \Delta$, em que C_s é a constante de Smagorinsky e Δ , o comprimento característico da malha, só é correcto no interior do escoamento. Mason and Thomson (1992) propõem que, na proximidade de uma superfície com rugosidade caracterizada por um comprimento z_0 , o comprimento característico seja o comprimento de mistura de Prandtl, $\kappa(z' + z_0)$, em que κ é a constante de von Kármán ($\kappa \approx 0.4$) e z' , a distância à superfície. Os mesmos autores sugerem a utilização da expressão

$$\frac{1}{\ell_s^2} = \frac{1}{(C_s \Delta)^2} + \frac{1}{[\kappa(z' + z_0)]^2} \quad (6.1)$$

para determinar o comprimento característico das escalas residuais, pois permite obter os valores correctos tanto no interior do escoamento como próximo da superfície rugosa e, de entre as que testaram, foi a que permitiu obter a melhor previsão da tensão de corte numa camada limite planetária.

Na verdade, existe uma diferença entre a expressão (6.1), utilizada por nós, e a proposta por Mason and Thomson (1992): esses autores usam um comprimento característico fixo para as escalas residuais no interior do escoamento (ℓ_0), que não dependente de $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$. Nos casos por eles considerados, o espaçamento da malha varia apenas na direcção normal à parede (z) e, por isso, afirmam não ser possível resolver os turbilhões tridimensionais que transportam a tensão de corte junto da parede, cujo comprimento característico é o de mistura de Prandtl, menor que o espaçamento da malha

nas direcções horizontais (Mason and Callen, 1986). Deste modo, consideram não existir razão para reduzir o comprimento característico ℓ_0 próximo da parede, reflectindo o aumento de resolução vertical. Como no nosso caso o espaçamento da malha varia em todas as direcções, pareceu-nos ser mais correcto usar a expressão do modelo de Smagorinsky original, apesar de não podermos garantir a resolução dos turbilhões tridimensionais. Para a constante de Smagorinsky, utilizámos $C_s = 0.1$, valor que está de acordo com o usado em simulações de escoamentos atmosféricos anteriores (e.g., Cai and Steyn, 1996).

6.2.2 Resolução do Sistema de Equações Lineares

Para a resolução do sistema de equações, que determina a correcção da pressão, servimo-nos do algoritmo SIP. Contudo, quando se usa uma malha não-ortogonal e os procedimentos que descrevemos no capítulo 2 para o cálculo das derivadas nas faces dos volumes de controlo, a correcção do caudal (2.62) relaciona a correcção de pressão em cada ponto com a correcção em 18 dos seus vizinhos, enquanto caso a malha fosse Cartesiana seriam envolvidos apenas seis dos pontos vizinhos. Como o algoritmo SIP original (Stone, 1968) prevê apenas a hipótese de a malha ser Cartesiana, necessitámos de adaptá-lo do modo que descrevemos a seguir, para a utilização com uma malha não-ortogonal. Cabe aqui referir que duas adaptações são efectuadas por Schneider and Zedan (1981) e por Perić (1987), para o caso de malhas não-ortogonais bidimensionais, que envolvem oito pontos vizinhos em vez dos quatro das malhas Cartesianas; no entanto qualquer desses procedimentos não foi ainda estendido a malhas tridimensionais.

Consideremos o sistema de equações que determina a correcção da pressão p' , que tem a forma

$$\mathcal{A}^p p' = Q_p . \quad (6.2)$$

Se na resolução deste sistema for usado um método iterativo estacionário, existem duas matrizes $\mathcal{M}$ e $\mathcal{N}$, de tal modo que

$$\mathcal{M} - \mathcal{N} = \mathcal{A}^p , \quad (6.3)$$

em que $\mathcal{M}$ é uma matriz mais fácil de inverter que $\mathcal{A}^p$. A diferença entre os vários métodos é a escolha das matrizes $\mathcal{M}$ e $\mathcal{N}$; no algoritmo SIP, a matriz $\mathcal{M}$ é o produto de duas matrizes $\mathcal{L}$ e $\mathcal{U}$, em que $\mathcal{L}$ é triangular inferior e $\mathcal{U}$, triangular superior de diagonal unitária. O modo como são calculadas não constitui assunto deste trabalho; tal pode ser encontrado, por exemplo, em Stone (1968).

Usando o método iterativo, na iteração m dispomos de uma estimativa p'^m da solução do sistema linear (6.2), que verifica a equação

$$\mathcal{A}^p p'^m = Q_p - \rho^m , \quad (6.4)$$

em que ρ^m é o resíduo. A estimativa p'^{m+1} é obtida solucionando o sistema

$$\mathcal{M}p'^{m+1} = \mathcal{N}p'^m + Q_p ,$$

ou, subtraindo $\mathcal{M}p'^m$ a ambos os membros,

$$\mathcal{M}(p'^{m+1} - p'^m) = Q_p - (\mathcal{M} - \mathcal{N})p'^m ,$$

ou seja:

$$\mathcal{M}\delta^m = \rho^m , \quad (6.5)$$

em que $\delta^m = p'^{m+1} - p'^m$ é a correcção.

Para usar o algoritmo SIP com uma malha não-ortogonal, considerámos uma matriz de coeficientes $\mathcal{A}'^p$, cujos elementos não eram os coeficientes obtidos da equação (2.62), mas eram calculados supondo a malha Cartesiana, com os volumes de controlo com a mesma área nas faces e a mesma distância entre eles. Por exemplo, explicitando o coeficiente A_E ,

$$A_E = -\Delta t \frac{S_e}{L_{P,E}} ,$$

em que Δt é o passo temporal da discretização, S_e , a área da face 'e' e $L_{P,E}$, a distância entre os pontos P e E. Recorria-se à matriz $\mathcal{A}'^p$ na expressão (6.3), para o cálculo de $\mathcal{M}$, em vez da matriz $\mathcal{A}^p$. No entanto, o resíduo, usado em (6.5) no cálculo da correcção, era sempre obtido de (6.4), utilizando a matriz $\mathcal{A}^p$. Deste modo, era possível garantir que, após a obtenção de uma solução, o campo de velocidade corrigido satisfazia a equação da continuidade, a menos de um resíduo máximo admissível.

6.2.3 Domínio de Cálculo

O monte de Askervein situa-se na costa oeste da ilha escocesa de South Uist e tem uma altura máxima de 126 m acima do nível do mar (118 m em relação ao terreno plano que o rodeia). A sua forma é quase elíptica e o eixo maior, alinhado aproximadamente na direcção NW – SE, tem um comprimento de cerca de 2 km, enquanto o eixo menor mede aproximadamente 1 km.

Durante a realização das medições descritas nos relatórios de Taylor and Teunissen (1983, 1985) consideraram-se, entre outros, três pontos particulares: o ponto HT (*hill top*), o mais alto do monte, situado próximo da extremidade noroeste, o ponto CP (*centre point*), no centro do monte, e o ponto RS (*reference site*), que dista cerca de 3 km para sul-sudoeste do centro do monte e onde se efectuaram medições do escoamento não perturbado incidente. A partir dos pontos HT e CP definiram-se três linhas, ao longo das quais foram colocadas a maior parte das torres instrumentadas: a linha B, que contém ambos os pontos, a linha A,

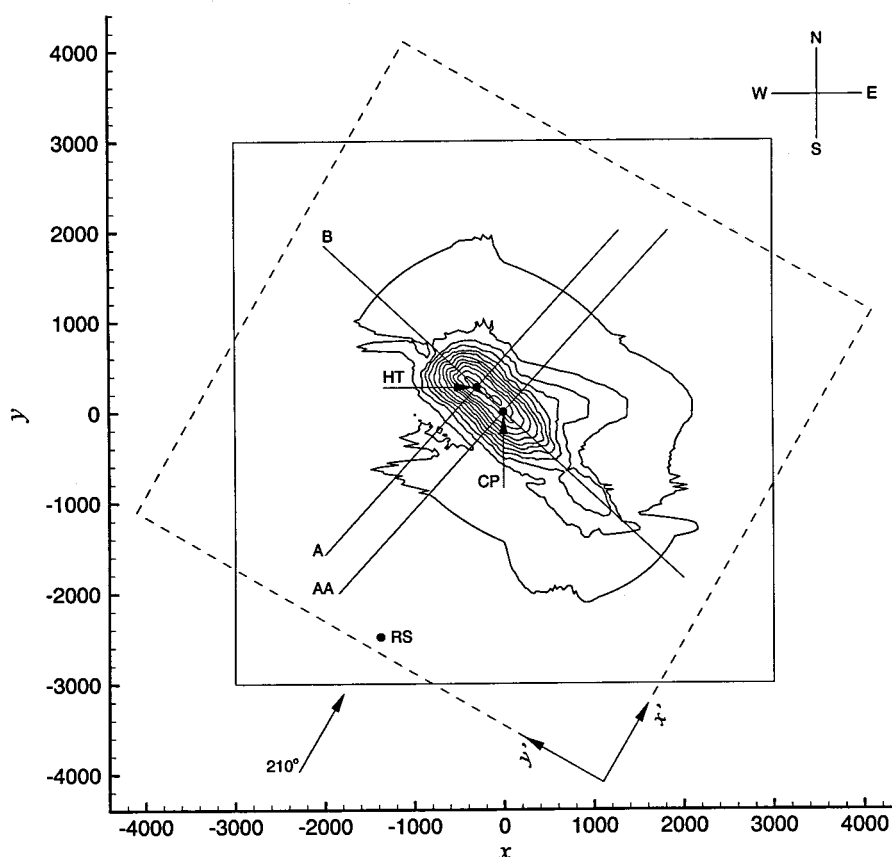


Figura 6.1: Curvas de nível do monte de Askervein (diferença de cota entre elas: 10 m). Encontram-se assinalados a localização dos pontos HT, CP e RS, as linhas A, AA e B, os limites do mapa discretizado disponível (—), os do domínio de cálculo considerado (— —) e o sentido do vento simulado (210°).

que contém o ponto HT e é perpendicular a B, e a linha AA, que passa pelo ponto CP e também é perpendicular a B. A figura 6.1 mostra a localização dos pontos e das linhas referidos, junto com as curvas de nível do monte.

Uma das dificuldades da simulação de um escoamento atmosférico real é encontrar um período de tempo em que as condições permaneçam constantes, de modo ao escoamento evoluir para um estado estacionário, pois, de outro modo, seria necessário conhecer detalhadamente as condições iniciais. Durante a realização das medições descritas em Taylor and Teunissen (1985), o escoamento apresentou pequenas variações em torno da estratificação neutra e o vento predominante foi de sudoeste. O período mais longo de medições durante o qual o vento permaneceu estável verificou-se entre as 14 e as 17 h do dia 3 de Outubro de 1983, em que o vento soprou com a intensidade de 8.9 m/s do sentido que faz 207.9° com o Norte, medidos no sentido inverso. Nesse dia, tanto a velocidade do vento

como a sua direcção permaneceram relativamente constantes, o que é confirmado pelo facto de entre as 12 e as 13 h o vento ter soprado com a velocidade de 9.8 m/s do sentido que faz 207.8° com o Norte (valores obtidos no ponto RS a 10 m do solo). Por essas razões, escolhemos simular o escoamento que ocorreu entre as 14 e as 17 h. Acerca dele existem no relatório três conjuntos de medições, com os quais comparámos os nossos resultados: TU03-B, que contém dados originalmente destinados ao estudo da turbulência, MF03-D, com dados destinados ao estudo do escoamento médio, e TK03, com dados provenientes de balões *TALA Kite*.

Tínhamos disponível um mapa da topografia, discretizado ao longo das direcções N – S e E – W, com uma resolução de 23 m. A área total da discretização media $6000\text{ m} \times 6000\text{ m}$ e estava centrada no ponto CP. Contudo, para facilitar a especificação das condições de fronteira e reduzir a difusão numérica, no domínio que considerámos, a direcção do escoamento incidente coincidia com uma das direcções Cartesianas e as fronteiras, excepto a inferior, eram paralelas a planos Cartesianos. Como utilizámos para o domínio computacional a mesma área total do mapa discretizado, existiam algumas zonas onde não havia informação da cota do terreno (veja-se a figura 6.1), tendo-se usado a da fronteira do mapa (8 m). Nos pontos do domínio situados no interior do mapa, a cota foi calculada usando interpolação bilinear entre os quatro pontos mais próximos. A fronteira superior do domínio situou-se a uma altura de 700 m relativamente ao terreno aproximadamente uniforme que rodeia o monte.

Foram utilizadas cinco malhas diferentes para a discretização do domínio computacional, designadas pelas letras de ‘A’ a ‘E’, que tinham as seguintes características comuns: tinham 31 nós na direcção vertical, estavam concentradas junto do ponto CP, onde $\Delta x_{\min} = \Delta y_{\min} = 10\text{ m}$, e existia um factor de expansão constante em cada direcção Cartesiana.

Para tentar reproduzir o escoamento real, nas nossas simulações existia um período de desenvolvimento, após o qual eram calculadas as estatísticas. Avaliámos a influência do tempo de desenvolvimento com as malhas A e B, realizando simulações designadas pelos números de 1 a 4, conforme o tempo de desenvolvimento fosse 5000, 10000, 15000 ou 20000 s. Nas restantes simulações, o tempo de desenvolvimento foi sempre 5000 s; em todas elas, as estatísticas foram calculadas durante 3600 s (1 h). Estes valores foram limitados principalmente pelos recursos computacionais disponíveis, pois as simulações com as malhas D e E exigiram, cada uma, cerca de um mês de cálculo. De acordo com Mason and Callen (1986), o escoamento num canal, com uma distância entre as paredes igual ao dobro da altura do domínio que considerámos, demora cerca de 20000 s a desenvolver-se. Já quanto ao tempo durante o qual se calcularam as médias, Mason and Callen (1986) afirmam que 1000 s são suficientes para obter estatísticas representativas, embora sejam necessários 10000 s para que elas sejam simétricas relativamente ao eixo do canal.

Usando a malha A e um tempo de desenvolvimento de 5000 s, estudou-se também a influência da condição de entrada, designando-se com a letra ‘a’ a simulação com uma con-

Simulação	Número de Nós	$\Delta z_{\min}$ (m)	f_x, f_y	f_z	Δt (s)	$t_{\text{desenv.}}$ (s)	Entrada
A1a	$57 \times 57 \times 31$	1.5	1.15	1.16	0.2	5000	Fixa
A1b	$57 \times 57 \times 31$	1.5	1.15	1.16	0.2	5000	Variável
A2	$57 \times 57 \times 31$	1.5	1.15	1.16	0.2	10000	Fixa
A3	$57 \times 57 \times 31$	1.5	1.15	1.16	0.2	15000	Fixa
A4	$57 \times 57 \times 31$	1.5	1.15	1.16	0.2	20000	Fixa
B1	$57 \times 57 \times 31$	0.6	1.15	1.21	0.1	5000	Fixa
B2	$57 \times 57 \times 31$	0.6	1.15	1.21	0.1	10000	Fixa
B3	$57 \times 57 \times 31$	0.6	1.15	1.21	0.1	15000	Fixa
B4	$57 \times 57 \times 31$	0.6	1.15	1.21	0.1	20000	Fixa
C	$77 \times 77 \times 31$	0.6	1.09	1.21	0.1	5000	Fixa
D	$77 \times 77 \times 31$	0.3	1.09	1.24	0.05	5000	Fixa
E	$97 \times 97 \times 31$	0.6	1.06	1.21	0.1	5000	Fixa

Tabela 6.1: Características das simulações realizadas: número de nós da malha, espaçamento mínimo na direcção vertical, medido na zona do domínio em que o terreno é uniforme ($\Delta z_{\min}$), factores de expansão em cada uma das direcções Cartesianas (f_x , f_y e f_z), intervalo de tempo (Δt), tempo de desenvolvimento ($t_{\text{desenv.}}$) e tipo de condição de fronteira considerada na secção de entrada.

dição fixa no tempo e com a letra 'b', a simulação com condição variável, obtida conforme se descreve na secção 6.2.5.

Na tabela 6.1 encontram-se listadas as características de todas as simulações realizadas. Comparando os resultados das simulações A1a, B1, C, D e E era possível avaliar o efeito da resolução numérica, relacionada com o número de nós no plano horizontal ou com a altura do volume de controlo adjacente ao solo. A influência do tempo de desenvolvimento era determinada comparando A1a, A2, A3 e A4 ou B1, B2, B3 e B4; finalmente, comparando os resultados de A1a e A1b, pode-se verificar o efeito da condição de fronteira na secção de entrada.

6.2.4 Condições de Fronteira e Inicial

Em todas as simulações, excepto em A1b, considerámos na fronteira de entrada do domínio um perfil de velocidade logarítmico, dado pela expressão

$$u(z') = \frac{u^*}{\kappa} \ln \left(1 + \frac{z'}{z_0} \right), \quad (6.6)$$

em que u^* é a velocidade de fricção, calculada de modo a $u(10 \text{ m}) = 10 \text{ m/s}$; o comprimento característico da rugosidade foi $z_0 = 3 \text{ cm}$, de acordo com Taylor and Teunissen (1985). As outras componentes da velocidade (v e w) eram nulas. Na simulação A1b, considerámos um perfil resultante do desenvolvimento do escoamento sobre uma placa plana, obtido

usando uma malha idêntica à da simulação sobre o monte de Askervein. O procedimento usado é descrito na secção seguinte. Na secção de saída, usámos a condição convectiva $\partial\phi/\partial t + c\partial\phi/\partial x = 0$, em que c é a velocidade média e ϕ representa qualquer das componentes da velocidade (u , v e w). Na superfície superior e nas superfícies laterais, optámos por uma condição de escorregamento livre. Junto ao solo, considerámos que a componente tangencial da velocidade (v_t) satisfazia a expressão (6.6), a partir da qual obtínhamos a tensão tangencial:

$$\bar{\tau}_{\text{wall}} = \frac{\rho}{M^2} \|\bar{v}_t\| \bar{v}_t, \quad (6.7)$$

em que

$$M = \frac{1}{\kappa \Delta n} \left[(\Delta n + z_0) \ln \left(1 + \frac{\Delta n}{z_0} \right) - \Delta n \right]$$

e Δn é a altura do volume de controlo mais próximo do solo, medida na direcção normal. Esta condição é válida quando Δn é suficientemente pequeno, de modo à aceleração local ser reduzida, e a área do volume de controlo paralela à parede é suficientemente grande, para que ocorra uma tensão estatisticamente estacionária (Mason and Callen, 1986).

Quanto à pressão, considerámos que junto das superfícies de entrada, de saída, superior e laterais a sua variação na direcção normal era nula ($\partial p/\partial n = 0$), enquanto junto ao solo se considerou que era nula a sua variação na direcção vertical ($\partial p/\partial z = 0$).

No início das simulações, o campo de velocidade era inicializado utilizando a expressão (6.6) para o cálculo da componente u , considerando-se nulas as outras (v e w).

6.2.5 Condição de Entrada Variável

Para obter a condição de entrada para a simulação A1b, simulámos o escoamento sobre uma placa plana com uma rugosidade de comprimento característico $z_0 = 3$ cm, impulsionado por um gradiente de pressão. Utilizou-se uma malha com a mesma resolução horizontal e $\Delta z_{\min}$ da malha A, usada na simulação do escoamento em torno do monte de Askervein, e o mesmo passo temporal das simulações efectuadas com essa malha ($\Delta t = 0.2$ s).

As condições de fronteira também eram idênticas às utilizadas na simulação sobre o monte de Askervein, excepto na direcção longitudinal do escoamento, em que se usaram condições periódicas para todas as variáveis.

Como condição inicial, usou-se um campo de velocidade constituído pela soma do perfil logarítmico (6.6) com um campo v' obtido da forma seguinte: gerava-se um campo de velocidade v'^* , que não satisfazia a equação da continuidade, mas satisfazia as condições de fronteira do escoamento sobre a placa plana; além disso, a função densidade de probabilidade de $u_i'^*$ era Gaussiana e $\langle u_i'^{*2} \rangle = u^{*2}$. Este campo de velocidade era depois corrigido,

para satisfazer a equação da continuidade, de modo idêntico ao descrito no capítulo 5 para a correcção dos campos de velocidade iniciais, obtendo-se então o campo v' . A vantagem deste procedimento era acelerar o desenvolvimento do escoamento: testes prévios com outras malhas, que não as utilizadas aqui, mostraram que o escoamento convergia para o mesmo estado de uma simulação iniciada só com o perfil logarítmico, mas necessitava apenas de 70% do tempo de computação.

O escoamento iniciado deste modo evoluiu durante 25000 s, para que as flutuações da velocidade de fricção média estabilizassem (figura 6.2). Este tempo de desenvolvimento foi superior ao indicado por Mason and Callen (1986) para um canal. Posteriormente, guardavam-se as três componentes do vector velocidade e a viscosidade residual no centro do primeiro volume de controlo durante 8600 s, para depois serem introduzidos na secção de entrada da simulação do escoamento em torno do monte de Askervein.

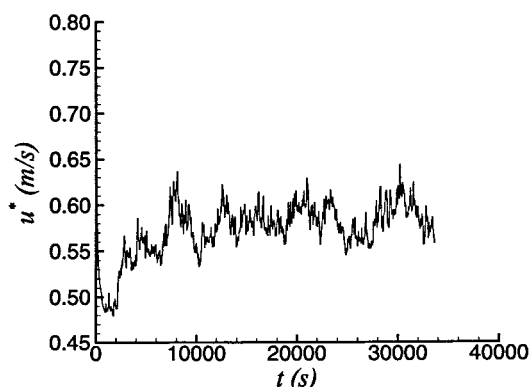


Figura 6.2: Evolução temporal da velocidade de fricção no escoamento sobre uma placa plana.

A condição de entrada obtida deste modo é mais próxima da de um escoamento real, pois inclui flutuações das grandes escalas causadas pela turbulência, mas exige recursos computacionais elevados: o escoamento sobre a superfície rugosa demorou um tempo considerável a desenvolver-se e foram necessários 5 Gb de espaço de armazenamento para guardar os campos.

6.3 Resultados e Discussão

O objectivo principal deste trabalho não foi estudar o escoamento em torno do monte de Askervein, mas sim testar a aplicação do programa desenvolvido, de simulação das grandes escalas da turbulência em coordenadas não-ortogonais, e verificar a influência de parâmetros numéricos como a resolução da malha, o tempo de desenvolvimento ou a condição de entrada. A opção de proceder deste modo foi tomada por nós, de acordo com o objectivo final da tese. Acresce ainda que o estudo numérico ou experimental de qualquer

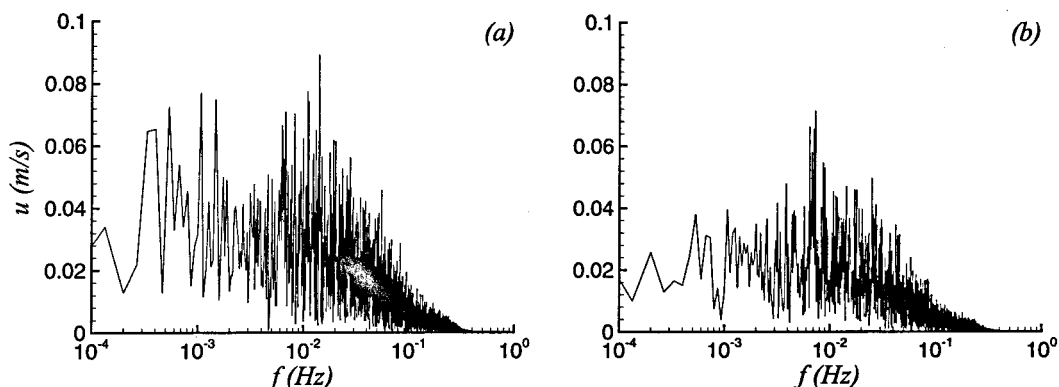


Figura 6.3: Espectros da componente u da velocidade nas simulações A4 (a) e B4 (b) (calculado entre $t=5000$ e 20000 s), no ponto CP, no nó adjacente ao solo.

escoamento deve ser sempre precedido da análise das limitações e da incerteza das técnicas utilizadas.

O espectro da componente u da velocidade nas simulações A4 e B4, no ponto CP, no nó adjacente ao solo (figura 6.3), permitiu identificar quais as frequências com mais energia e, por conseguinte, verificar se tanto o tempo de desenvolvimento como aquele durante o qual foram calculadas as médias era correcto. Em ambas as simulações a frequência com mais energia foi cerca de 10^{-2} Hz, sendo a energia das frequências maiores progressivamente menor. Tal está de acordo com Stull (1988), quando afirma que a turbulência atmosférica tem um período característico entre os 10 s e os 10 min. Porém, na simulação A4 (figura 6.3a), algumas frequências mais baixas (10^{-3} Hz, por exemplo) tinham também uma energia significativa; o mesmo não aconteceu na simulação B4 (figura 6.3b), em que o conteúdo energético dessas frequências era cerca de metade da frequência com mais energia. Embora os dois espectros não tenham sido calculados em pontos à mesma distância do solo (devido ao $\Delta z_{\min}$ diferente nas duas malhas usadas), é nossa opinião que a maior importância das frequências mais baixas na simulação A4 se deveu ao passo temporal (Δt) maior utilizado; se assim foi, o conteúdo energético das frequências menores nas simulações C, D e E será mais semelhante ao de B4 que ao de A4, uma vez que o passo temporal aí utilizado foi igual ou menor.

Dada a energia das frequências menores que 10^{-3} Hz na simulação B4, poder-se-ia concluir que o tanto o tempo de desenvolvimento de 5000 s como os 3600 s em que se calcularam as médias foram adequados para a malha B; o mesmo não se verificou na malha A e é provável que existisse alguma influência do tempo de desenvolvimento. Contudo, se é de esperar que o escoamento sobre o monte de Askervein se desenvolva globalmente mais depressa que o escoamento num canal, devido às tensões de corte maiores provocadas pela topografia, é importante referir que na esteira do escoamento o desenvolvimento pode ser mais lento, por existirem zonas de recirculação e a velocidade mais reduzida que aí se observa transportar os turbilhões mais lentamente. Deste modo, é possível que mesmo na

malha B se observe alguma influência do tempo de desenvolvimento na esteira do monte.

Os resultados que obtivemos foram comparados com os resultados experimentais disponíveis, provenientes de torres colocadas ao longo das linhas A, AA e B, com anemómetros à altura de 10 m, e de torres colocadas nos pontos RS, HT e CP' (CP' situa-se 28 m a Norte e 10 a Este de CP), com anemómetros a diversas alturas. Efectuaram-se também duas comparações com resultados numéricos, obtidos usando o método das médias de Reynolds e o modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997). Em cada caso procurámos identificar a influência dos parâmetros numéricos. Com vista a facilitar a comparação, em todos os pontos os resultados numéricos foram transformados para um referencial local, em que a direcção x se encontrava alinhada com a componente horizontal do escoamento médio e a direcção z coincidia com a vertical. Na comparação dos perfis verticais de velocidade nos pontos HT e CP', usámos o *speedup*,

$$\Delta S(u, y, z') = \frac{\bar{u}(x, y, z')}{\bar{u}_{RS}(z')} - 1,$$

quantidade que traduz a variação da velocidade relativamente à do escoamento incidente à mesma distância do solo. Quanto ao mais, tanto a velocidade como as tensões de Reynolds foram adimensionalizadas usando a velocidade em RS a 10 m do solo.

Em alguns casos, considerámos além das tensões de Reynolds resolvidas $(\overline{u'_i u'_j})$, as tensões totais, incluindo a contribuição do campo residual $(\overline{u'_i u'_j} + \tau_{ij}^r)$. Mason and Thomson (1992) sugerem que a dissipação da energia do campo residual é

$$\varepsilon = C_1 \frac{k_r^{3/2}}{\ell_s}, \quad (6.8)$$

em que k_r é a energia do campo residual e C_1 , uma constante que se estima ser $C_1 = 0.3^{3/2}$, assumindo a isotropia do campo residual e usando argumentos válidos para a gama inercial. Mason and Thomson (1992) chamam a atenção para o facto de não ser certo que este valor seja correcto próximo da parede, mas que não existe uma estimativa melhor. De acordo com o modelo de Smagorinsky, existe equilíbrio local entre a produção e a dissipação de energia do campo residual, de modo que $\varepsilon = \mu_r |\bar{\mathcal{S}}|^2$. Assim, a energia do campo residual foi obtida de

$$k_r = \left(\frac{\mu_r \ell_s |\bar{\mathcal{S}}|^2}{C_1} \right)^{2/3}, \quad (6.9)$$

utilizando-se a definição (2.17) para calcular as tensões residuais.

6.3.1 Ponto RS

O ponto RS encontra-se a 160 m apenas da secção de entrada do domínio e numa zona de menor resolução da malha (Δx entre 200 e 400 m), de modo que não é de esperar que

o escoamento seja bem resolvido. Para $z' < 50$ m, os perfis da componente horizontal da velocidade média ($\bar{u}$) das várias simulações eram quase coincidentes e mostraram uma boa concordância com os resultados experimentais (figura 6.4a); acima dessa altura, só a simulação E se manteve de acordo com o perfil logarítmico imposto na secção de entrada, pois as outras previram uma velocidade menor. Pelo contrário, as medições efectuadas com os balões *TALA Kite* prevêm uma velocidade maior, facto que deve estar relacionado com gradientes de temperatura existentes nessa zona. Não foi significativa a influência do tempo de desenvolvimento nas malhas A e B, nem da condição de entrada variável usada na simulação A1b. Os resultados foram apenas influenciados pela resolução da malha: as simulações que usaram as malhas com mais nós aproximaram melhor o perfil logarítmico, mas o aumento da resolução junto ao solo foi prejudicial na resolução do perfil para $z' > 100$ m, o que se compreende, visto que o aumento da resolução junto ao solo foi conseguido à custa de uma diminuição na parte superior do domínio.

Os resultados da tensão de Reynolds $\overline{u'u'}$ mostraram um andamento distinto dos valores medidos: enquanto nestes últimos os valores maiores estão mais próximos do solo, as simulações atingiam o máximo para $z' \approx 20$ m e decresciam continuamente em direcção ao solo. Além disso, observou-se uma dependência significativa da malha, pois o máximo da simulação A1a foi 30% menor que o maior valor medido, enquanto o da simulação E foi o dobro (figura 6.4a). Contudo, os resultados das simulações C e D foram muito semelhantes, o que nos faz crer que será mais importante a resolução no plano horizontal do que a distância do primeiro nó ao solo. Outro facto verificado foi a dependência da condição de entrada, com o máximo da simulação A1b a atingir um valor três vezes maior que o da simulação A1a (figura 6.5a). Quanto à contribuição do campo residual, ela só era significativa para $z' < 20$ m e fazia com que o valor da tensão em $z' = 1$ m geralmente duplicasse, embora seja discutível que o valor que utilizámos para a constante C_1 seja correcto tão próximo do solo. Nomeadamente, é provável que o campo residual não seja isotrópico. O tempo de desenvolvimento também afectou a tensão $\overline{u'u'}$, causando variações que atingiram os 40% na malha A e 30% na malha B (usando A1a e B1 como referência). Seria conveniente verificar se as diferenças se deveram só ao tempo de desenvolvimento ou se também a um tempo de cálculo das médias insuficiente. Em face dos dados disponíveis, concluímos que para melhorar a previsão desta tensão neste ponto era necessário utilizar uma malha com maior resolução e condições de entrada mais realistas, obtidas de outras simulações ou por qualquer outro processo que permitisse simular as variações causadas pela turbulência.

Os resultados das tensões $\overline{v'v'}$ e $\overline{w'w'}$ também se mostraram dependentes da malha, mas o facto mais significativo foi serem sempre bastante menores que os valores medidos: os máximos da simulação E correspondiam apenas a 20 e 10% dos maiores valores medidos (figuras 6.4b e c). A dependência da condição de entrada foi significativa, pois os valores de $\overline{v'v'}$ na simulação A1b eram geralmente três vezes maiores que na simulação A1a (figura 6.5b). A contribuição do campo residual era importante para $z' < 20$ m e tornava os valores a 1 m do solo idênticos aos medidos pelos anemómetros sónicos a 10 m (figuras 6.6a

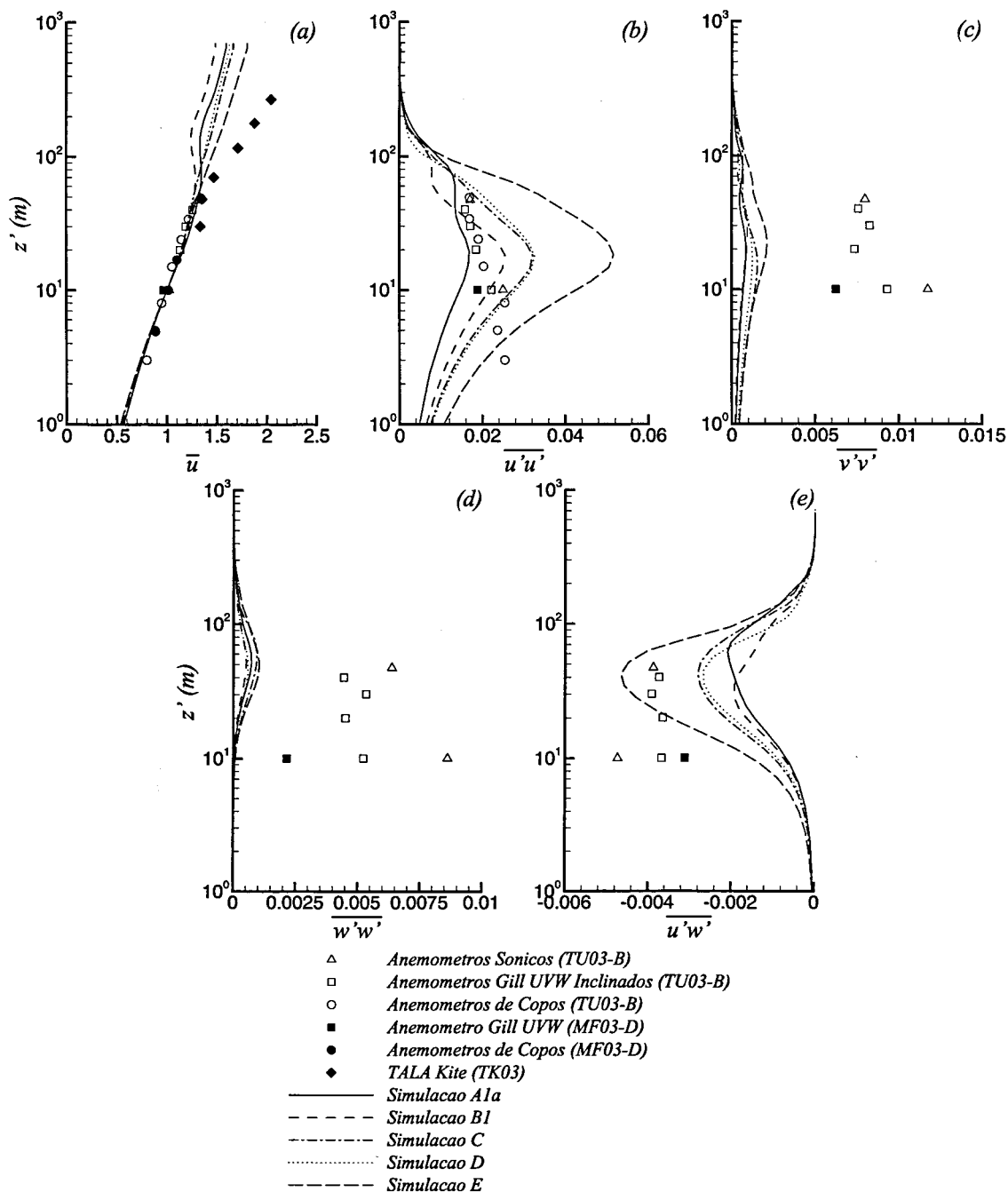


Figura 6.4: Perfis da componente horizontal da velocidade média e das tensões de Reynolds, no local de referência (ponto RS), obtidos de simulações com malhas diferentes.

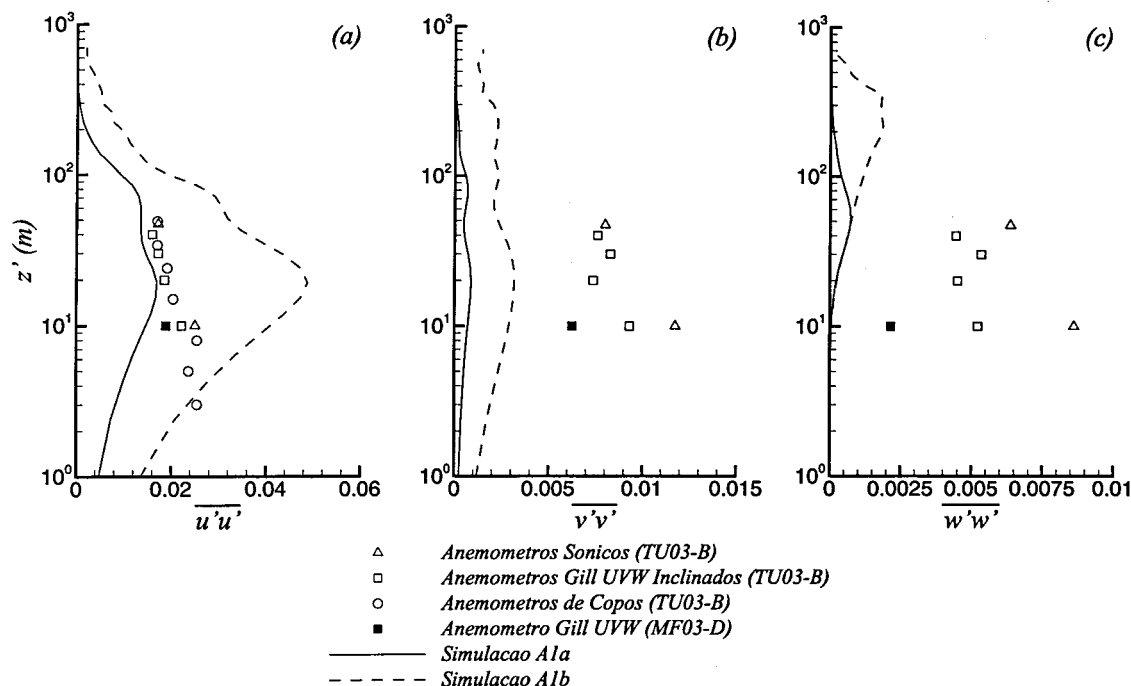


Figura 6.5: Perfis das tensões normais de Reynolds, no local de referência (ponto RS), obtidos de simulações com condições de fronteira na secção de entrada diferentes.

e b). Cabe aqui referir que é aceite por Taylor and Teunissen (1985) que os anemómetros *Gill UVW* podem subestimar a turbulência em 20%. Nestas tensões, ao contrário de $\overline{u'u'}$, o tempo de desenvolvimento não provocou alterações significativas.

Tal como aconteceu com $\overline{u'u'}$, o andamento da tensão $\overline{u'w'}$ não foi correctamente previsto: as medições dos anemómetros *Gill UVW* inclinados (anemómetros *Gill UVW* montados com o eixo 'vertical' inclinado 45°) mostram que a tensão $\overline{u'w'}$ é praticamente constante entre $z' = 10$ e 50 m, enquanto todas as simulações mostraram um máximo em $z' \approx 40$ m e uma diminuição significativa, tanto em direcção ao solo, como ao topo do domínio (figura 6.4e). Como exemplo, veja-se que o valor previsto pela simulação E em $z' = 40$ m era 25% maior que o medido pelos anemómetros *Gill UVW* inclinados e 60% menor em $z' = 10$ m. A contribuição do campo residual foi significativa para $z' < 10$ m e semelhante à observada nas tensões $\overline{v'v'}$ e $\overline{w'w'}$, pois tornou os valores a 1 m do solo idênticos aos medidos a 10 m (figura 6.6c). Apesar de significativa, a influência da condição de entrada foi menor que nas tensões normais, pois os valores aumentaram no máximo 60%. A dependência do tempo de desenvolvimento só foi visível nas simulações realizadas com a malha A, em que entre os 10 e os 200 m as variações podiam atingir 50%.

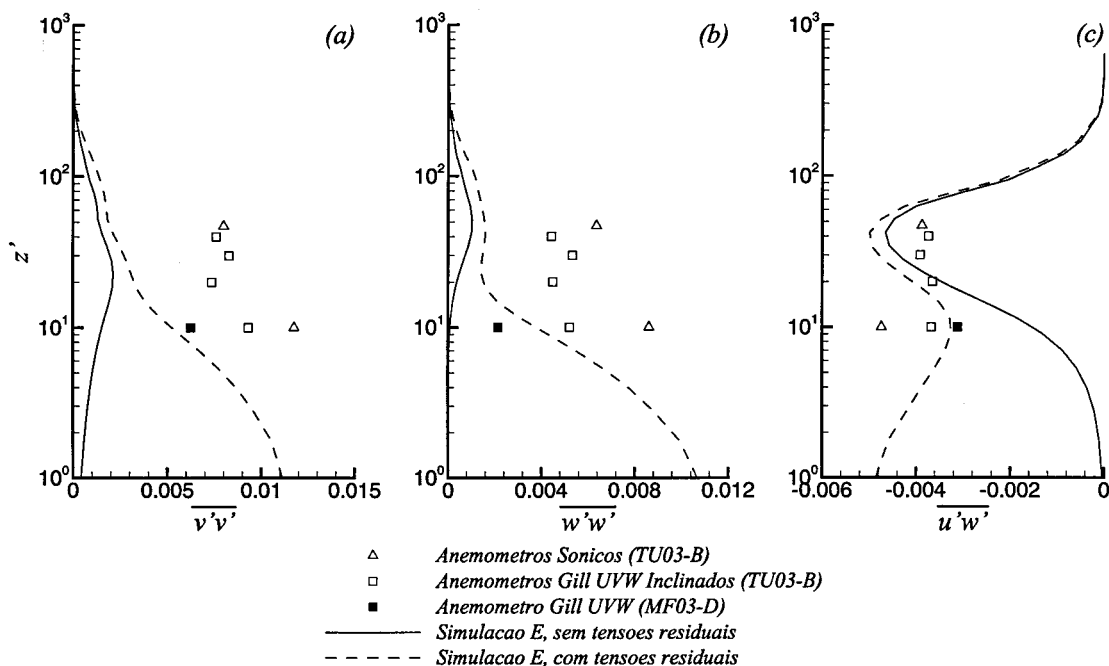


Figura 6.6: Perfis das tensões de Reynolds, resolvidas e totais, no local de referência (ponto RS), obtidos na simulação E.

6.3.2 Linha A

A direcção da linha A quase coincide com a do escoamento incidente, uma vez que formam um ângulo de apenas 13° . O andamento da magnitude da componente horizontal da velocidade média foi bem previsto por todas as simulações, embora tenham existido algumas oscilações a montante de HT (figura 6.7b), principalmente nas simulações A1a e B1, que atribuímos a uma resolução insuficiente da malha no plano horizontal; também é possível que desaparecessem usando um valor da constante de Smagorinsky mais elevado (Mason and Callen, 1986). As simulações A1a, B1 e D subestimaram sempre a velocidade, enquanto C e E a sobrestimaram em algumas zonas a jusante de HT. A velocidade máxima foi bem prevista pelas simulações C e E, apenas subestimada 2% por C e sobrestimada 5% por E. Reparámos também que, para a mesma resolução da malha no plano horizontal, a previsão era menor quando $\Delta z_{\min}$ era menor. Todas as simulações mostraram um mínimo aproximadamente 250 m a jusante de HT, de que não há confirmação experimental, associado à zona de recirculação que existia mais próximo do solo. Não se observou qualquer influência da secção de entrada e o tempo de desenvolvimento só teve influência nas simulações com a malha A, na zona de menor velocidade, o que é natural, pois é nessas zonas que o escoamento demora mais a desenvolver-se.

As previsões do ângulo $\Delta\phi$, entre o escoamento local e o escoamento incidente, foram todas praticamente coincidentes até 100 m a jusante de HT, zona onde nunca mostraram

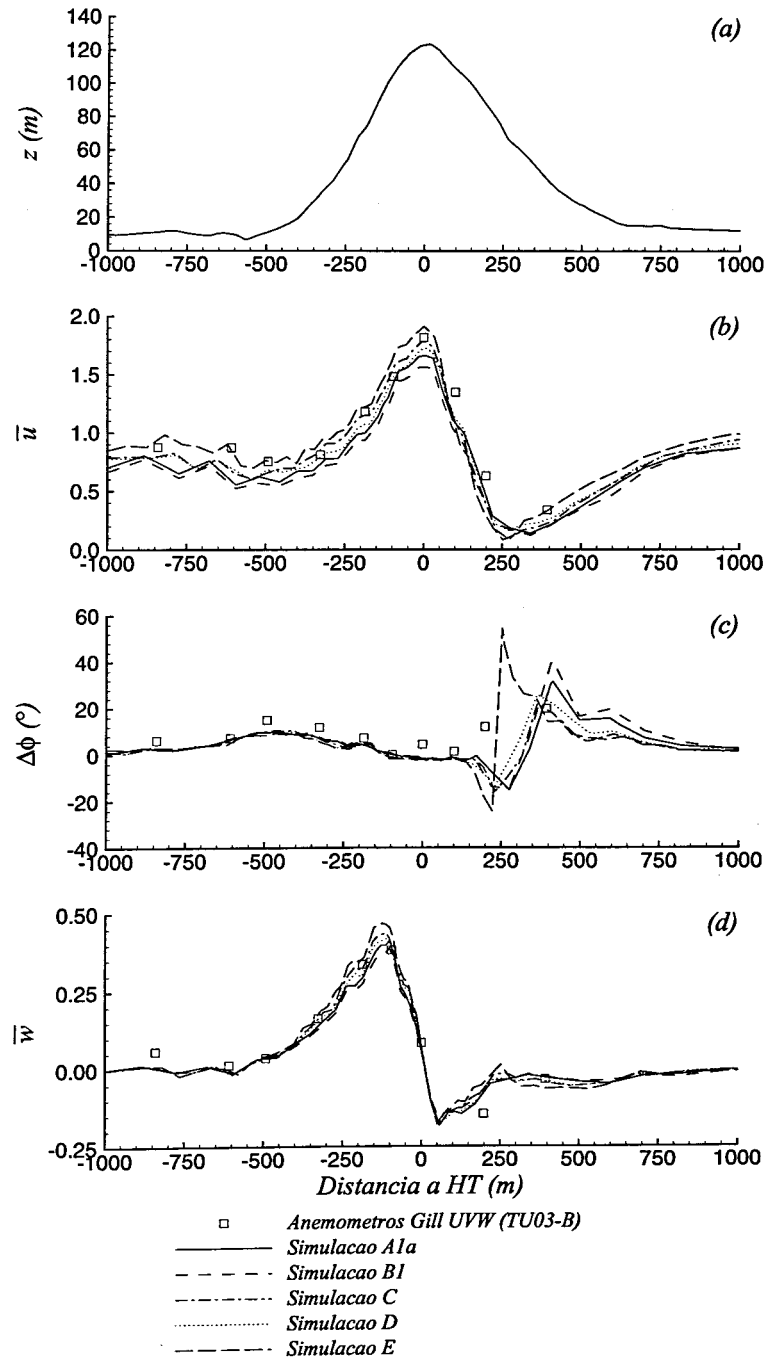


Figura 6.7: Perfis da topografia (a), da componente longitudinal da velocidade média (b), do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente (c) e da componente vertical da velocidade média (d), ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.

diferenças superiores a 8° relativamente às medições, embora fossem quase sempre por defeito; após esse ponto, as previsões foram influenciadas por todos os parâmetros testados. Por exemplo, comparando as simulações com resoluções diferentes da malha (figura 6.7c), viu-se que existia uma oscilação significativa do ângulo $\Delta\phi$ no espaço de 300 m, levando-o a atingir os valores de -18 e 55° na simulação E. A influência da resolução da malha no plano horizontal na amplitude desta oscilação não foi clara, pois a maior amplitude foi observada na simulação E, que utilizou a malha com mais resolução, e a menor em C e D, enquanto nas simulações com menor resolução (A1a e B1) foi intermédia. A influência da distância do primeiro nó ao solo foi menor do que a da resolução horizontal, pois as diferenças entre as simulações A1a e B1 e entre C e D foram reduzidas. Refira-se que na simulação A1b, com a condição de entrada variável, o primeiro pico (negativo) foi suprimido, mas o segundo (positivo) não foi influenciado. Já o tempo de desenvolvimento causou alterações nos dois, sendo a mais significativa a redução do segundo de 15° na malha B. É nossa opinião que estas diferenças se deveram à presença de uma zona de recirculação mais próximo do solo: a resolução da malha foi crítica para a sua previsão correcta, o seu tempo de desenvolvimento foi superior ao do restante escoamento e a influência da turbulência do escoamento incidente foi significativa, o que justifica as diferenças observadas. Será então necessário determinar o tempo de desenvolvimento da zona de recirculação, encontrar a malha que a permita resolver correctamente e usar a condição de entrada adequada. Além disso, convém verificar se a expressão (6.7) produz resultados aceitáveis nessa zona. A orientação da velocidade 400 m a jusante de HT foi bem prevista por todas as simulações, embora os resultados antes e depois desse ponto fossem diversos.

A componente vertical da velocidade média foi bem prevista, excepto em dois pontos: 850 m a montante de HT e 200 m a jusante (figura 6.7d); no entanto, mesmo nesses pontos, o sentido foi correctamente previsto. Além disso, à semelhança do que aconteceu com a componente horizontal, as previsões praticamente não foram afectadas pela condição de entrada e pelo tempo de desenvolvimento.

As previsões da tensão $\overline{u'u'}$ até ao ponto HT estavam de acordo com os valores reduzidos das medições, embora tenham apresentado variações significativas em função da malha utilizada: a simulação E previa valores quatro vezes maiores que as simulações A1a ou B1 (figura 6.8b). Também se observou uma dependência da condição de entrada, pois, por exemplo, 850 m a montante de HT a previsão da simulação A1a era 80% menor que o valor medido, enquanto a de A1b era 25% maior. Esta diferença atenuou-se na encosta ascendente do monte (após os 500 m a montante de HT), o que é natural, visto que na zona mais plana do terreno a turbulência era essencialmente transportada, enquanto sobre a topografia, por as tensões de corte serem maiores, a produção adquiria mais importância. As simulações mostraram um máximo 150 m a jusante de HT, cuja intensidade dependia bastante da malha utilizada, e que, no caso da simulação E, era quase quatro vezes maior que o valor medido. Acreditamos que tal estava associado à presença da zona de recirculação, confirmada por Taylor and Teunissen (1985), e ao seu tempo de desenvolvimento, pois notaram-se diferenças significativas em função deste parâmetro. Por exemplo: 150 m

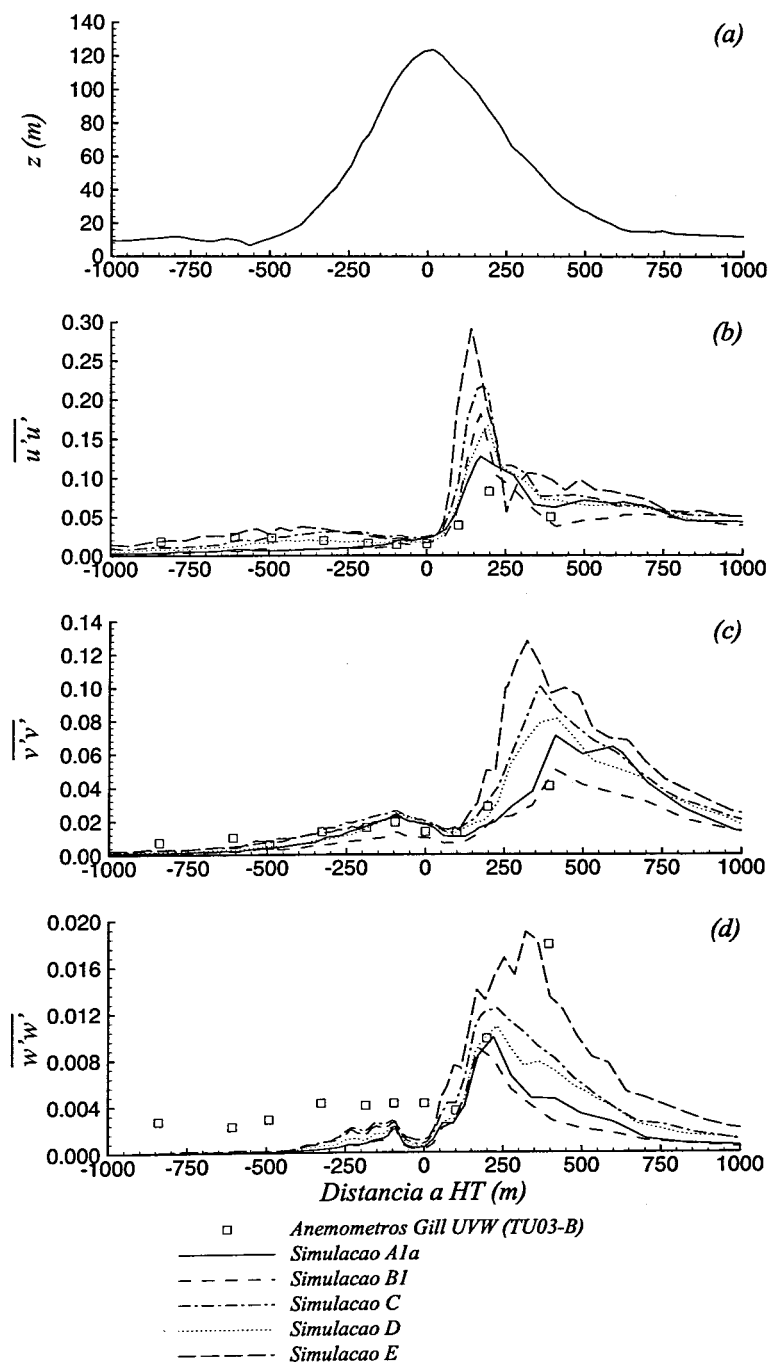


Figura 6.8: Perfis da topografia (a), das tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$ (b), $\overline{v'v'}$ (c) e $\overline{w'w'}$ (d), ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.

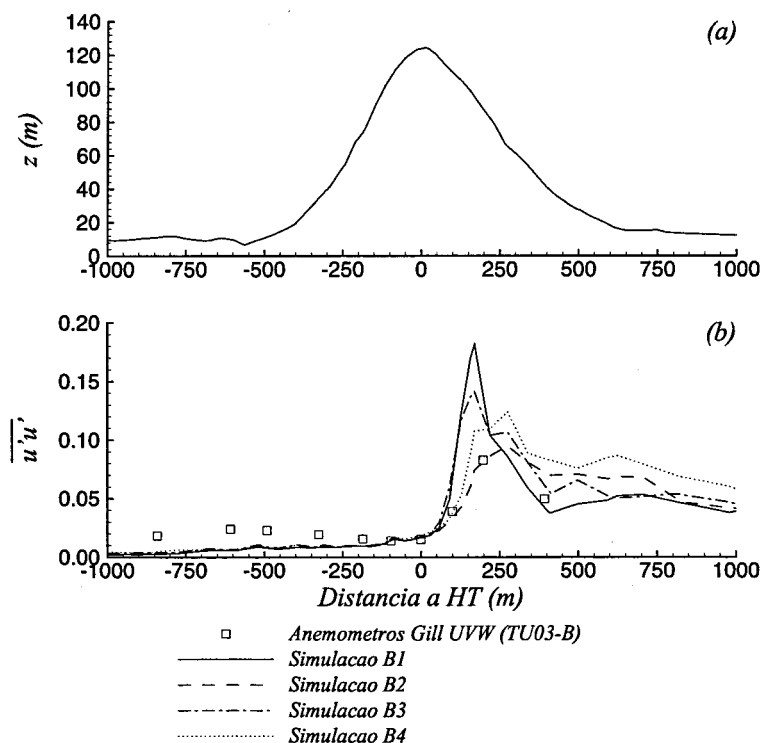


Figura 6.9: Perfis da topografia (a) e da tensão de Reynolds $\overline{u'u'}$ (b), ao longo da linha A, obtidos de simulações com a malha B e tempos de desenvolvimento diferentes.

a jusante de HT a simulação B2 previa um valor que era quase um terço do previsto por B1 (figura 6.9b). Além disso, é possível que também fosse necessário calcular as médias durante mais tempo. Por outro lado, em medições efectuadas no túnel de vento (Teunissen et al., 1987) verifica-se que a previsão da velocidade a jusante de HT depende bastante da rugosidade do modelo, com os modelos com rugosidade menor a preverem uma velocidade maior e quantidades turbulentas menores. Ora, no trabalho de Zeman and Jensen (1987) afirma-se que, devido à erosão, a rugosidade perto de HT será mais próxima de 1 cm do que dos 3 cm que considerámos, de modo que é possível que parte da discrepância entre os nossos resultados e os valores experimentais também se deva à variação da rugosidade ao longo do terreno.

As previsões da tensão $\overline{v'v'}$ apresentaram algumas características comuns com $\overline{u'u'}$: a montante de HT, todas as simulações previram os valores reduzidos medidos, enquanto a jusante os resultados dependiam bastante da resolução da malha utilizada (figura 6.8c). Se exceptuarmos a simulação B1, a dependência da malha até ao ponto HT foi reduzida; já na esteira do monte, as simulações que utilizaram as malhas mais finas mostraram valores mais elevados que os medidos. Os melhores resultados foram mesmo os da simulação B1, pois, por exemplo, 400 m a jusante de HT a simulação E previa um valor mais de duas vezes maior que o medido. Notou-se que para a mesma resolução da malha no plano horizontal,

a redução de $\Delta z_{\min}$ fez diminuir o valor da tensão na esteira. As influências da condição de entrada e do tempo de desenvolvimento foram reduzidas, pois as variações causadas foram sempre menores que 10%.

Ao contrário do que aconteceu com as tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$, ao longo da linha A uma parte significativa da tensão $\overline{w'w'}$ era contabilizada no campo residual (compare-se as figuras 6.8d e 6.10b). Aliás, a maior contribuição era da parte isotrópica, de modo que seria importante verificar se a estimativa da energia obtida da expressão (6.9) era correcta. Se considerarmos essa contribuição como acertada, verificamos que o comportamento dos resultados foi semelhante ao observado nas tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$, pois as simulações previram os valores reduzidos antes de HT e apresentaram variações significativas na esteira. Uma diferença relativamente às outras tensões normais foi o facto da tensão ser subestimada no ponto HT, com as simulações a preverem um valor cinco vezes menor que o medido. A situação inverteu-se 100 m adiante, pois a previsão foi pelo menos cinco vezes maior que a medição, um valor para o qual o campo resolvido contribuiu apenas com 20%. A tensão também foi sobrestimada 200 m a jusante de HT, onde os resultados eram mais de duas vezes maiores que o valor medido, mas foi bem prevista pela simulação E 400 m a jusante de HT, embora, por exemplo, a previsão de B1 seja quase três vezes menor. Um facto a salientar é os resultados obtidos de simulações com malhas com a mesma resolução no plano horizontal serem pouco influenciados pelo valor de $\Delta z_{\min}$, o que nos leva a crer que a resolução horizontal é mais crítica. Apesar das considerações que tecemos, é nossa opinião que um julgamento definitivo da qualidade das previsões desta tensão só deve ser feito dispondo de mais certeza quanto à estimativa da energia do campo residual. À semelhança do que vimos na tensão $\overline{v'v'}$, tanto a condição de entrada como o tempo de desenvolvimento não provocaram variações superiores a 10%.

Quanto à tensão $\overline{u'w'}$, os resultados das simulações mostraram valores positivos a montante de HT, o que não é confirmado por nenhum dos valores experimentais (figura 6.11b). Este aspecto não foi corrigido nem pela condição de entrada variável, nem por um tempo de desenvolvimento maior; a causa de tal poderá ser o facto de, próximo do solo, esta tensão ser contabilizada principalmente pelo modelo de tensões residuais (conforme se observa na figura 6.6c). À semelhança das tensões normais, os resultados a jusante de HT variaram bastante conforme a malha, tendo sido quase sempre menores (mais negativos) que os valores medidos. Por exemplo, a 200 m de HT as simulações previram valores mais de quatro vezes maiores que o medido. A única previsão correcta nessa zona foi da simulação B1, no ponto a 400 m de HT. Se o aumento da resolução no plano horizontal fez com que o mínimo previsto fosse menor (comparem-se os resultados das simulações B1, C e E), o efeito da diminuição de $\Delta z_{\min}$ foi contraditório: a simulação B1 usou um $\Delta z_{\min}$ menor que o da simulação A1a e previu um mínimo menor que ela; no entanto a simulação D também usou um $\Delta z_{\min}$ menor que a simulação C, mas o mínimo previsto foi maior. A simulação E foi a única a prever um máximo local 250 m a jusante de HT, enquanto nas outras não se notou qualquer alteração do andamento nessa zona. A condição de entrada variável não alterou significativamente esta tensão, enquanto o tempo de desenvolvimento diferente provocava

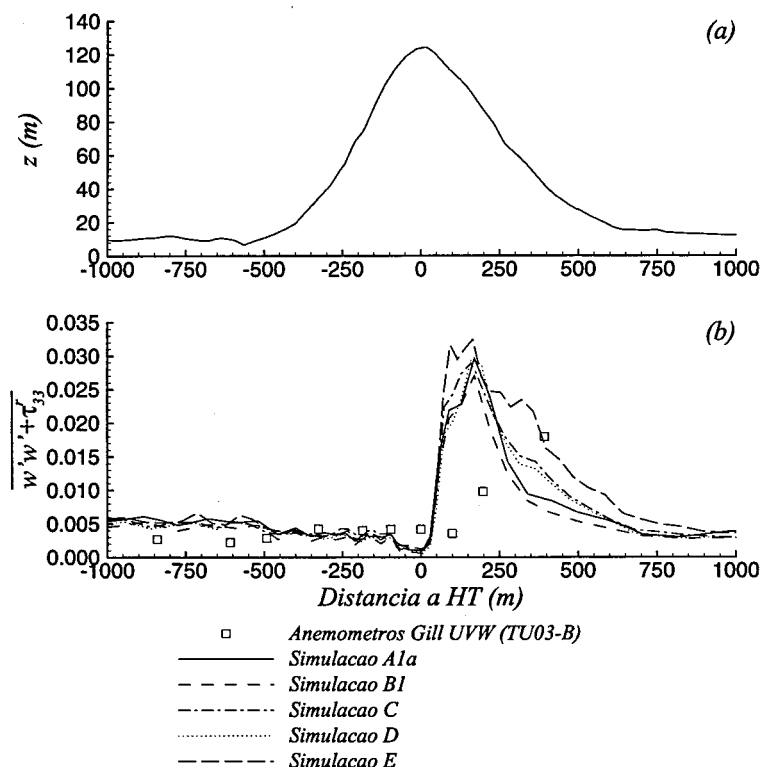


Figura 6.10: Perfis da topografia (a) e da tensão de Reynolds total $\overline{w'w'} + \tau_{33}^r$ (b), ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.

algumas alterações: a maior diferença foi entre os mínimos das simulações B1 e B2, pois o de B2 era 60% maior (menos negativo) que o de B1.

Comparámos também os resultados das tensões normais de Reynolds alcançados pela simulação D com os obtidos com o modelo $k-\varepsilon$ numa malha parecida (Castro, 1997), pois diferia apenas por estar centrada no ponto HT e abranger uma área de $4000 \text{ m} \times 4000 \text{ m}$. Ambos os métodos previram correctamente a tensão $\overline{u'u'}$ a montante do ponto HT (figura 6.12b), embora os resultados da simulação D sejam inferiores às medições até 500 m a montante, aspecto que foi corrigido usando uma malha com maior resolução horizontal (figura 6.8b). Na esteira do monte, as previsões do modelo $k-\varepsilon$ aumentam pouco relativamente à zona a montante, subestimando a tensão. Nessa zona os resultados do método das grandes escalas da turbulência dependiam bastante da malha utilizada; considerando apenas a simulação D, a tensão foi sempre sobrestimada, não se podendo considerar que os resultados tenham sido melhores que os do modelo $k-\varepsilon$, uma vez que as medições se situam aproximadamente a meio dos dois.

À semelhança do que acontece na tensão $\overline{u'u'}$, o modelo $k-\varepsilon$ prevê um valor praticamente constante para $\overline{v'v'}$ a montante do ponto HT ($\overline{v'v'} \approx 0.013$, figura 6.12c). No entanto, enquanto esse valor é correcto para $\overline{u'u'}$, no caso de $\overline{v'v'}$ é maior que as medições

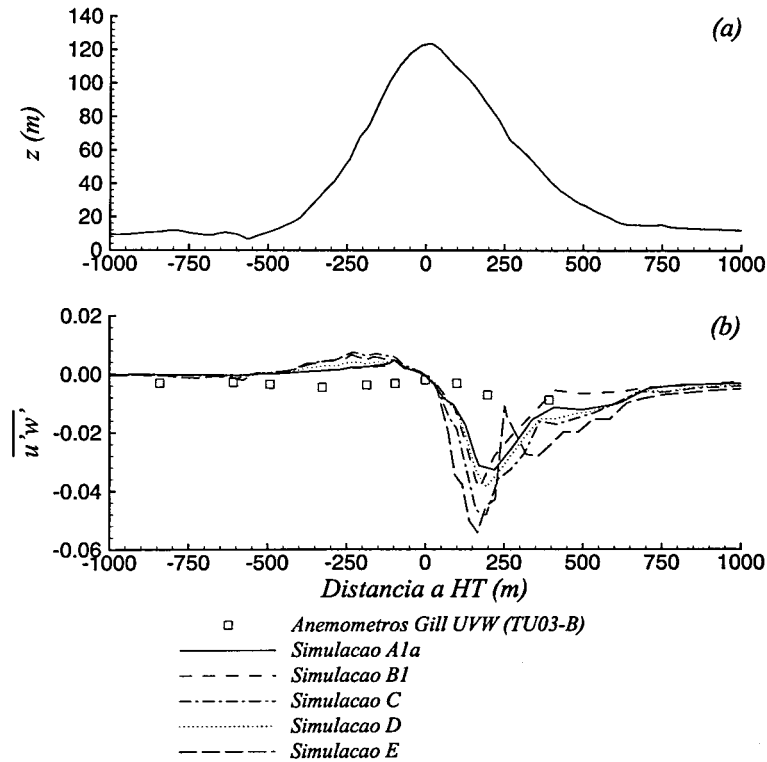


Figura 6.11: Perfis da topografia (a) e da tensão de Reynolds $\overline{u'w'}$ (b), ao longo da linha A, obtidos de simulações com malhas diferentes.

até 500 m a montante do ponto HT (o erro varia entre 30 e 120%). O mesmo não aconteceu com a simulação D, que previu correctamente valores menores para a tensão $\overline{v'v'}$, mas previu-os cerca de quatro vezes menores que as medições. Entre os 500 m a montante do ponto HT e os 200 m a jusante, a simulação D parece ter previsto melhor a tendência dos resultados experimentais (para aumentar ou para diminuir), mas o erro dos dois métodos foi semelhante. No único ponto onde existem mais medições, 400 m a jusante de HT, a simulação D previu um valor quase duas vezes maior que o medido, enquanto o modelo $k-\varepsilon$ subestimou a tensão, mas com um erro inferior a 40%.

Quanto à tensão $\overline{w'w'}$, a simulação D subestimou-a quase sempre, excepto 100 e 200 m a jusante do ponto HT, em que os valores foram correctos, enquanto o modelo $k-\varepsilon$ a sobrestimou sempre (figura 6.12d). No entanto, conforme já referimos, uma parte significativa desta tensão foi contabilizada no modelo de tensões residuais. Considerando essa contribuição, até 100 m a montante do ponto HT a tensão foi bem prevista pela simulação D (figura 6.10b), enquanto o modelo $k-\varepsilon$ prevê valores pelo menos quatro vezes maiores que os medidos. Também se verifica que até 300 m a montante, o valor previsto pelo modelo $k-\varepsilon$, aproximadamente 0.013, é semelhante ao das tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$. A simulação D subestimou a tensão no ponto HT e, incluindo a contribuição das tensões residuais, os valores previstos 100 e 200 m a jusante de HT foram idênticos aos do modelo $k-\varepsilon$. A

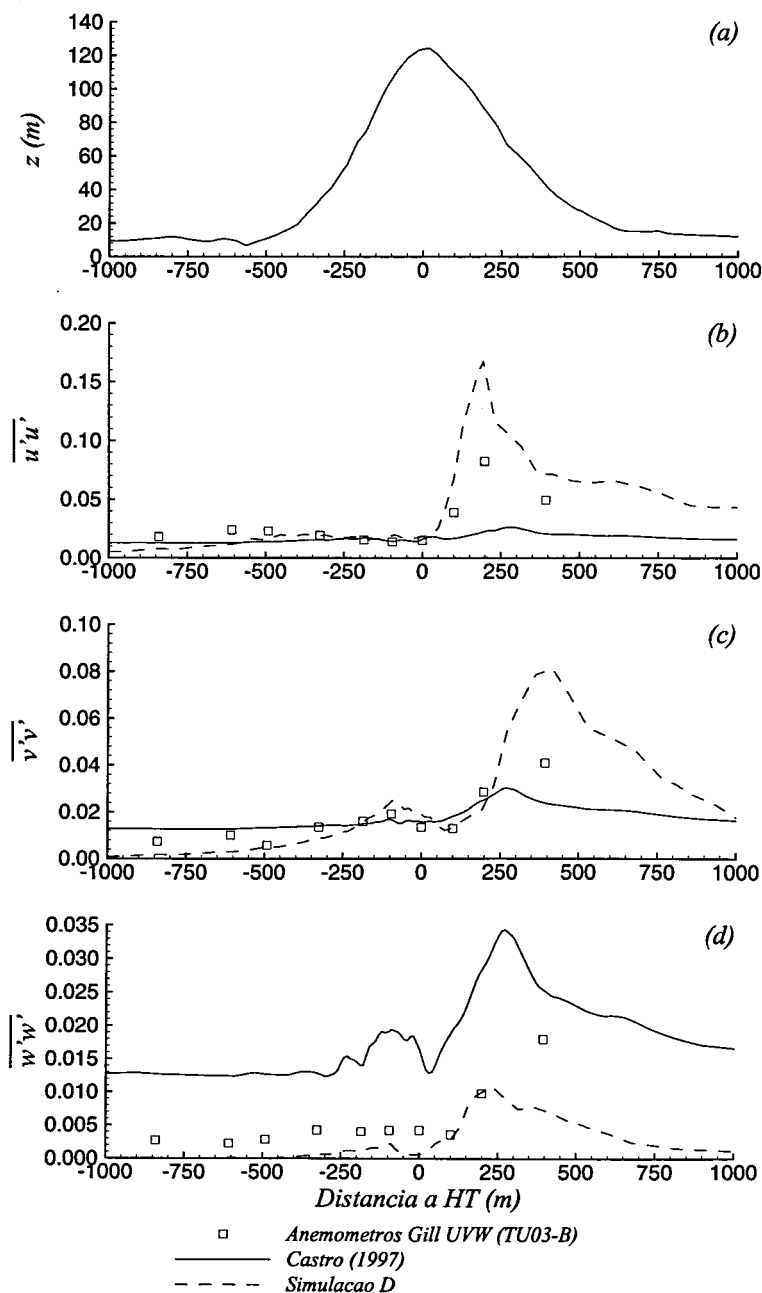


Figura 6.12: Perfis da topografia (a) e das tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$ (b), $\overline{v'v'}$ (c) e $\overline{w'w'}$ (d), ao longo da linha A, obtidos numa simulação com o modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997) e na simulação D.

melhor previsão do modelo $k-\varepsilon$ verifica-se no ponto 400 m a jusante de HT, com um erro de 40%, menor que o da simulação D. Contudo, foi nessa zona que os resultados do método das grandes escalas da turbulência dependeram mais da malha utilizada e, por exemplo, a previsão da simulação E foi mais correcta que a do modelo $k-\varepsilon$.

6.3.3 Linha AA

Exceptuando a magnitude da componente horizontal da velocidade média, só estão disponíveis valores experimentais ao longo da linha AA nos 500 m a montante de CP, o que limita as nossas conclusões, visto ser natural que, tal como aconteceu ao longo da linha A, a zona onde existam as maiores discrepâncias entre o escoamento real e as simulações seja na esteira do monte.

Os resultados da evolução da componente horizontal da velocidade média ao longo da linha AA mostraram algumas oscilações a montante de CP, maiores do que as que existiam ao longo da linha A, e que também considerámos serem devidas à falta de resolução da malha ou ao valor da constante de Smagorinsky (figura 6.13b); as oscilações foram visíveis nas simulações C, D e E até aos -500 m e em A1a e B1 após essa distância. Na esteira do monte, as simulações previram valores mínimos para a velocidade pelo menos 30% menores que o medido. Todavia, a partir dos 400 m a jusante de CP, o aumento da resolução horizontal da malha permitiu melhorar os resultados: por exemplo, a simulação E previu correctamente a velocidade a 600 m de CP, enquanto as simulações A1a e B1 apresentaram um erro de 30%. Também é possível que parte do erro seja devido à condição de entrada ou ao tempo de desenvolvimento, uma vez que a simulação A1b, com a condição de entrada variável, mostrou uma velocidade cerca de 20% maior que a da simulação A1a a partir do ponto 300 m a jusante de CP e os resultados das simulações com um tempo de desenvolvimento diferente mostraram variações de 25%, embora nem sempre no sentido da aproximação dos resultados experimentais.

Os valores do ângulo $\Delta\phi$ previstos pelas simulações pareceram correctos, atendendo à variação que existe entre os valores medidos com os anemómetros de copos e os *Gill UVW* (figura 6.13c), e a influência da condição de entrada e do tempo de desenvolvimento foram reduzidas. Existiram diferenças de 15° nos resultados das simulações cerca de 250 m a montante de CP, sendo de admitir que a previsão do ângulo máximo, cerca de 350 m a montante de CP, não tenha sido correcta, uma vez que foi nessa zona que se verificaram as maiores discrepâncias entre a magnitude da velocidade medida e os resultados das simulações.

Quanto à componente vertical da velocidade, as suas previsões foram correctas (figura 6.13d), tal como tinha acontecido ao longo da linha A, e a influência da condição de entrada e do tempo de desenvolvimento foi reduzida.

A tensão $\overline{u'u'}$ foi sempre sobreavaliada, particularmente no início da encosta do monte

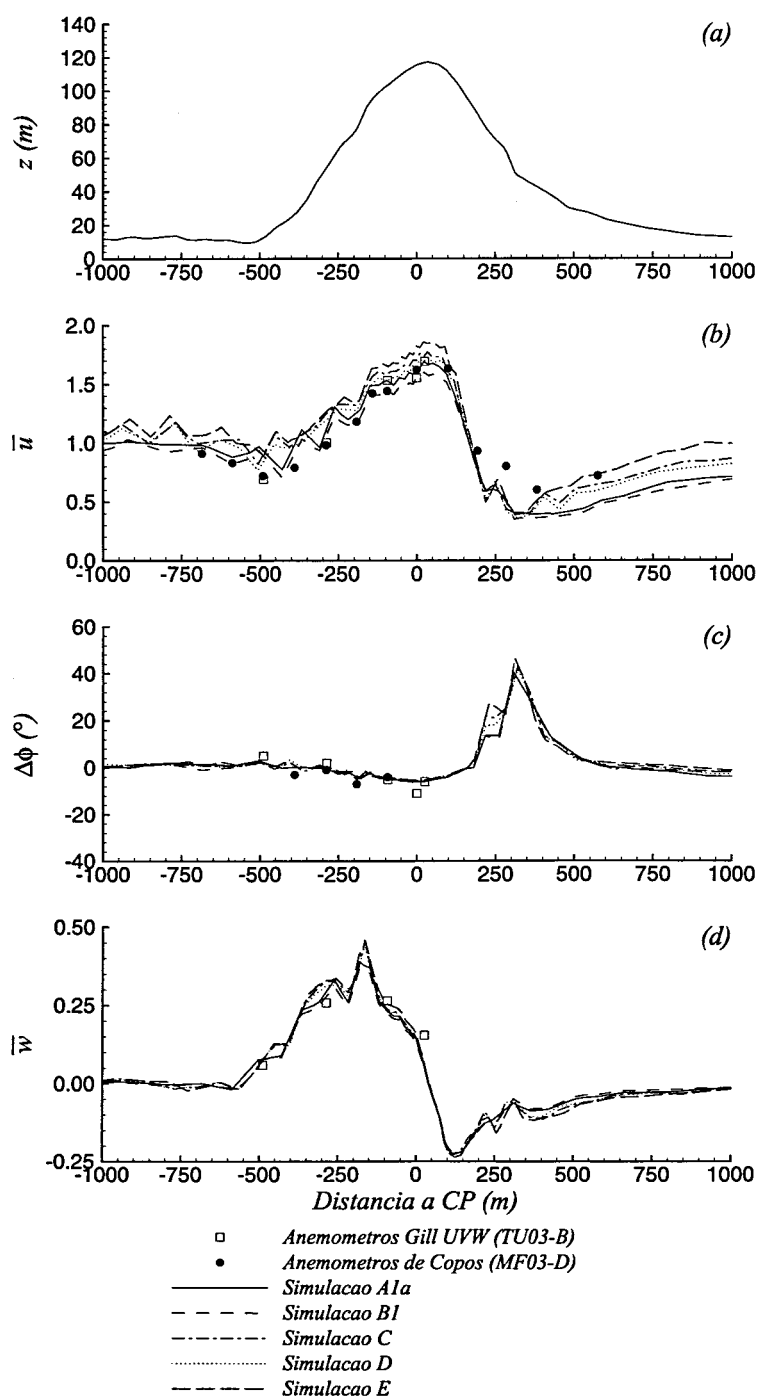


Figura 6.13: Perfis da topografia (a), da componente longitudinal da velocidade média (b), do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente (c) e da componente vertical da velocidade média (d), ao longo da linha AA, obtidos de simulações com malhas diferentes.

(500 m a montante de CP), que foi onde as simulações atingiram os valores máximos (figura 6.14b). Nesse ponto, a melhor previsão foi a da simulação B1, mas foi quase três vezes maior que o valor medido. A diminuição de $\Delta z_{\min}$ permitiu melhorar as estimativas, uma vez que o valor previsto por B1 foi 20% menor que o previsto por A1a, e a diferença entre C e D foi de 10%. Na esteira do monte, o tempo de desenvolvimento podia provocar variações de 40% nos resultados das simulações, mas aí não existem resultados experimentais para comparar. Já a condição de entrada variável não provocou alterações superiores a 10%.

Quanto à tensão $\overline{v'v'}$, as simulações também previram valores mais elevados do que os medidos, tipicamente o dobro (figura 6.14c). No entanto, ao contrário do observado em $\overline{u'u'}$, os valores previstos antes dos 500 m eram semelhantes aos das medições; apenas no início da encosta os resultados aumentaram, proporcionando as previsões por excesso. Foi também na encosta ascendente do monte que se verificaram as maiores diferenças entre as simulações com tempos de desenvolvimento diferente, que atingiram cerca de 20% no caso da malha A.

Apesar da contribuição do campo residual para a tensão $\overline{w'w'}$ ter sido significativa, tal como ao longo da linha A, nos pontos onde existiam medições experimentais isso só se verificou no que se encontra 500 m a montante de CP. Nos outros pontos, a tensão foi bem prevista pelo campo resolvido, apesar de terem existido grandes discrepâncias entre os resultados das simulações a jusante de CP, que não podemos comparar por falta de resultados experimentais (figura 6.14d). De resto, nessa zona, os resultados apresentam um comportamento idêntico ao visto na linha A: as simulações que utilizaram malhas com maior resolução no plano horizontal previram valores máximos mais elevados, enquanto a utilização de um $\Delta z_{\min}$ menor fez diminuir esses valores máximos.

A tensão $\overline{u'w'}$ apresentou, tal como no caso da linha A, uma zona de valores positivos ao longo dos 500 m a montante de CP, sem correspondência com as medições, que foram sempre negativas (figura 6.15b). Este resultado é, de alguma forma, inesperado, dado que as duas componentes da velocidade foram bem previstas nessa zona. Além disso, os resultados após 150 m a jusante de CP apresentaram variações significativas com a malha. Tanto o tempo de desenvolvimento como a condição de entrada variável não provocaram alterações significativas nesta tensão.

6.3.4 Linha B

Sobre a linha B, cuja direcção coincide praticamente com a direcção transversal do escoamento, o relatório de Taylor and Teunissen (1985) só inclui resultados do módulo da componente horizontal da velocidade média (excepto nos pontos HT e CP'). Até 750 m para sueste de HT, as medições estão quase sempre entre os resultados das simulações C e E (figura 6.16b); uma das excepções é o ponto a 300 m de HT, em que Raithby et al. (1987) aventam a hipótese de ter existido um erro de medição. Para lá dos 750 m, a velocidade foi sempre subestimada, com erros de cerca de 10%. É nossa opinião que, quando

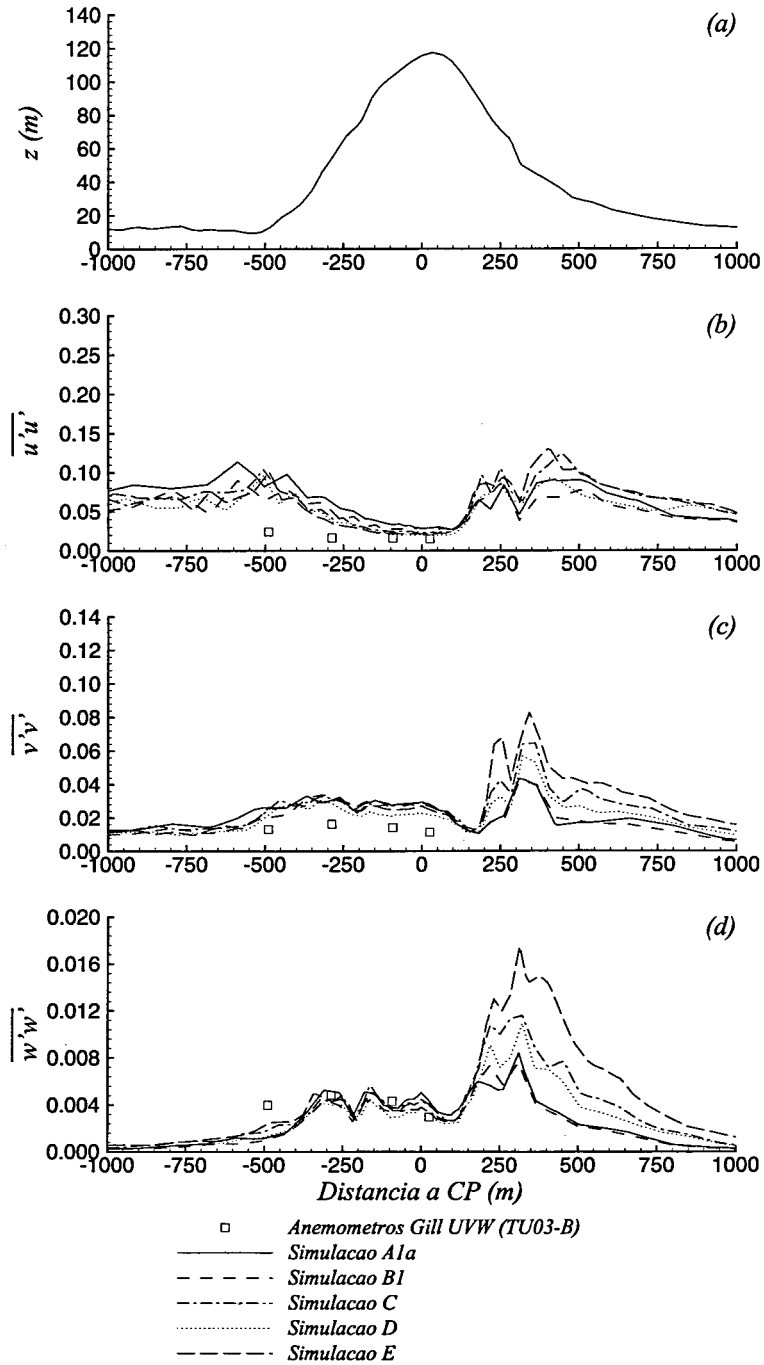


Figura 6.14: Perfis da topografia (a), das tensões de Reynolds $\overline{u'u'}$ (b), $\overline{v'v'}$ (c) e $\overline{w'w'}$ (d), ao longo da linha AA, obtidos de simulações com malhas diferentes.

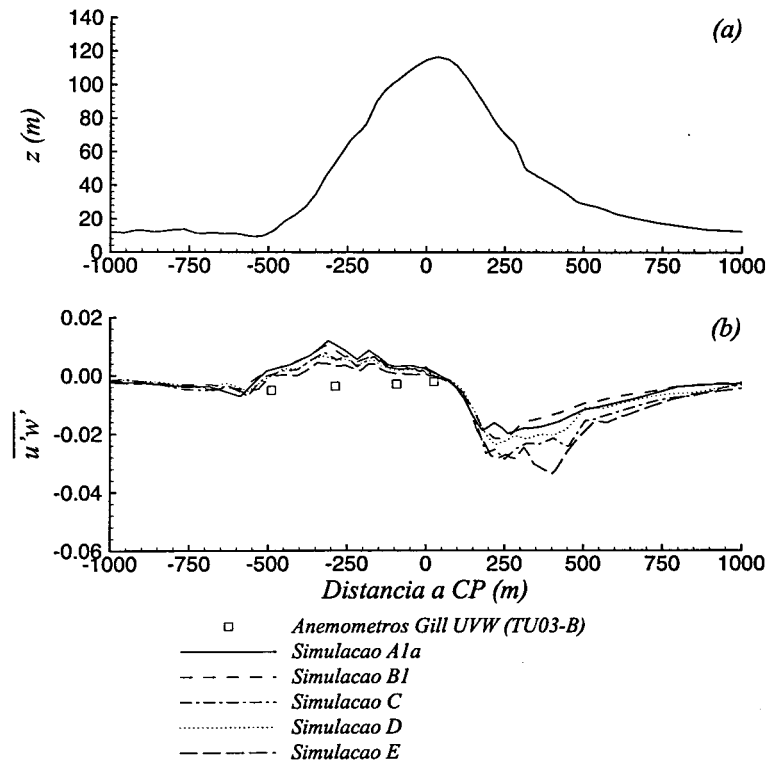


Figura 6.15: Perfis da topografia (a) e da tensão de Reynolds $\overline{u'w'}$ (b), ao longo da linha AA, obtidos de simulações com malhas diferentes.

a velocidade foi subestimada, tal se deveu a uma resolução insuficiente da malha no plano horizontal, porque o aumento de resolução no plano horizontal sempre causou um aumento da velocidade; no caso da simulação E, que sobrestimou a velocidade até 750 m a sudeste de HT, cremos que as suas previsões poderiam ser melhoradas diminuindo $\Delta z_{\min}$, visto que a diminuição de $\Delta z_{\min}$ causou a redução da velocidade. A condição de entrada variável e o tempo de desenvolvimento não provocaram alterações superiores a 10%.

6.3.5 Ponto HT

O que mais se salientou na comparação do perfil vertical do *speedup* no ponto HT foi as simulações preverem um valor constante a menos de 4 m do solo, enquanto o maior valor medido se encontra a 2 m do solo (figura 6.17a). Aliás, o maior erro das simulações verificou-se a essa altura e foi de cerca de 20% na simulação E. Acima dos 4 m, as medições situam-se quase sempre entre os resultados das simulações C e E. A resolução junto do solo da simulação A1a foi deficiente, pois notou-se uma variação brusca do *speedup* em $z' = 2$ m. Verificou-se também que o aumento da resolução no plano horizontal causou sempre um aumento do *speedup* (comparem-se os resultados das simulações A1a, C e E) e que a

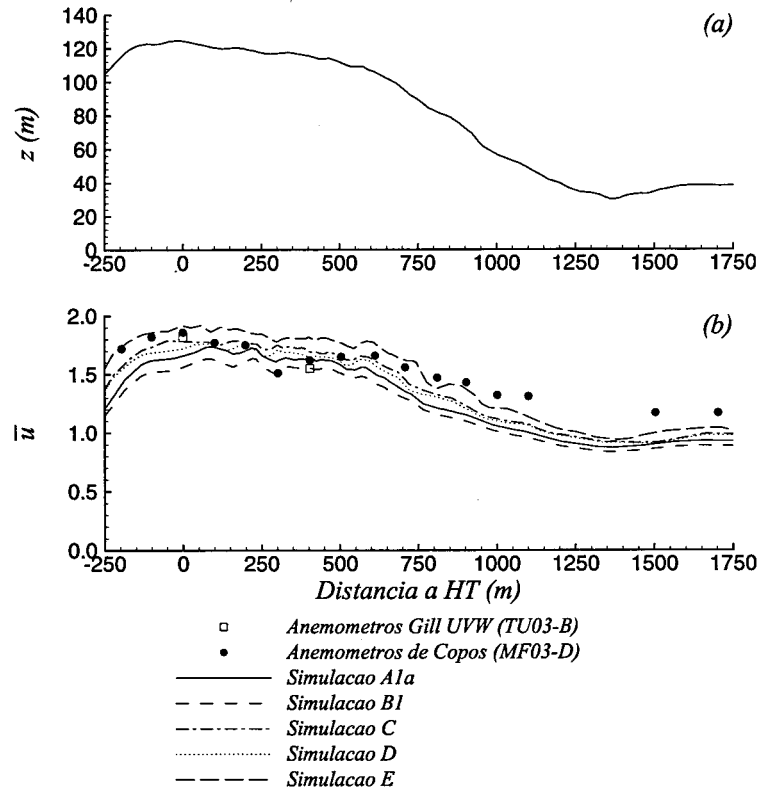


Figura 6.16: Perfis da topografia (a) e da componente longitudinal da velocidade média (b), ao longo da linha B, obtidos de simulações com malhas diferentes.

diminuição de $\Delta z_{\min}$ diminuiu o *speedup* (compare-se A1a com B1 e C com D). A condição de entrada variável, utilizada na simulação A1b, não provocou alterações significativas dos resultados, enquanto as provocadas pelo tempo de desenvolvimento não ultrapassaram os 20%, tendo sido maiores na malha B.

Os resultados das simulações previram uma variação reduzida da componente vertical da velocidade média no ponto HT, pois entre $z' = 1$ e 100 m os resultados situaram-se sempre entre $\bar{w} = 0.03$ e 0.07, ao passo que as medições mostram uma variação maior, entre $\bar{w} = -0.02$ e 0.1 (figura 6.17b). Destacamos o ponto a 4 m do solo, onde o erro foi maior e a velocidade medida tinha até o sentido contrário ao previsto pelas simulações. De resto, os resultados dividiram-se em dois grupos, em que os resultados eram idênticos: o das simulações cujas malhas tinham uma resolução de 57×57 nós no plano horizontal (A1a e B1) e o das restantes (C, D e E).

O que mais nos chamou a atenção nos resultados da tensão $\overline{u'u'}$ no ponto HT foi as simulações terem mostrado que a tensão diminuía abaixo de $z' = 6$ m, enquanto as medições aumentam sempre em direcção ao solo, embora exista alguma discrepância entre os anemómetros sónicos e os de copos (figura 6.17c). Na realidade, o que se verificou

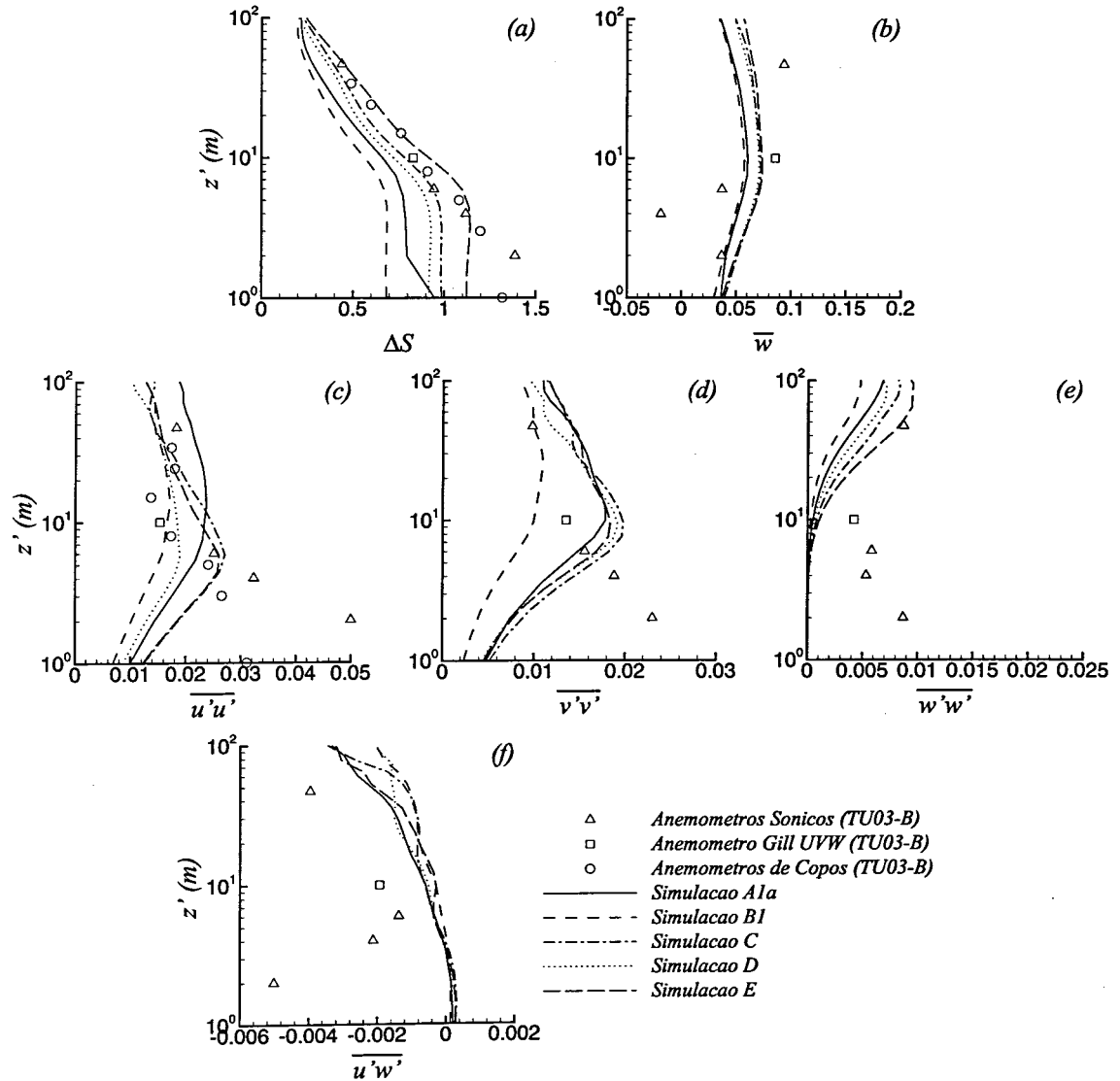


Figura 6.17: Perfis do *speedup*, da componente vertical da velocidade média e das tensões de Reynolds, no local mais alto do monte (ponto HT), obtidos de simulações com malhas diferentes.

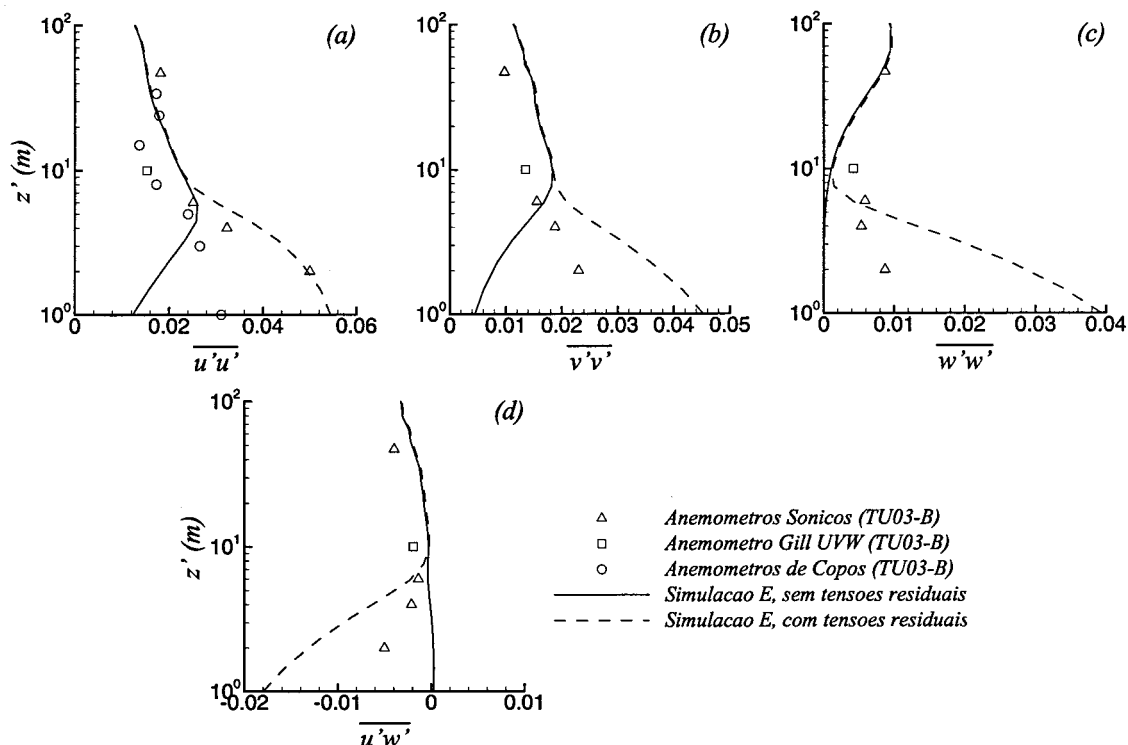


Figura 6.18: Perfis das tensões de Reynolds, resolvidas e totais, no local mais alto do monte (ponto HT), obtidos na simulação E.

foi que, abaixo de $z' \approx 10$ m, uma parte significativa das tensões de Reynolds (e não só de $\overline{u'u'}$) eram contabilizadas no campo residual, conforme se pode ver na figura 6.18, para o caso da simulação E. Deste modo, a qualidade dos resultados estará associada à precisão do modelo de tensões residuais. Incluindo a contribuição do campo residual, $\overline{u'u'} + \tau_{11}^r$ aumenta sempre que a distância ao solo decresce: a tensão a 4 m do solo foi mesmo 20% sobrestimada, enquanto a 2 m do solo foi bem prevista (figura 6.18a). Mason and Thomson (1992) identificam este mesmo problema na simulação da camada-limite planetária; segundo eles, a causa é o modelo de Smagorinsky não ser capaz de prever a transferência de energia das escalas residuais para as resolvidas (*backscatter*), fenómeno que consideram de muita importância na zona próxima da superfície em que as tensões residuais são significativas, mas o comprimento característico obtido de (6.1) é semelhante ao da filtragem ($C_s \Delta$). Para o resolver, propõem uma extensão ao modelo de Smagorinsky, baseada em argumentos físicos e dimensionais, que melhora consideravelmente os resultados das simulações que efectuam, não só os das tensões de Reynolds, mas também os da velocidade média. É possível que no nosso caso também exista este problema, não só nas tensões de Reynolds, mas também na velocidade média, que, como vimos, tinha um *speedup* menor que o medido próximo do solo.

Exceptuando os resultados da simulação B1, os das outras mostraram uma tensão $\overline{v'v'}$

semelhante (figura 6.17d). No entanto, o tempo de desenvolvimento tinha uma influência significativa nos resultados das simulações com a malha B, pois abaixo de $z' \approx 20$ m os resultados de B4 eram quase o dobro dos de B1. Já com a malha A, o tempo de desenvolvimento não provocou alterações superiores a 10%. Tal como referimos, uma parte significativa desta tensão estava incluída no campo residual; considerando a sua contribuição, a tensão foi sempre sobrestimada, com um erro crescente em direcção ao solo, que no caso da simulação E era superior a 60% em $z' = 2$ m (figura 6.18b).

Conforme referimos a propósito das evoluções ao longo das linhas A e AA, a tensão $\overline{w'w'}$ foi aquela em que a contribuição do campo residual foi mais significativa, devido ao reduzido valor da tensão resolvida. A 50 m do solo, a tensão foi bem prevista pelo campo resolvido da simulação E, enquanto a 10 m as simulações previram valores mais de três vezes menores que os medidos (figura 6.17e). Abaixo dessa cota, as tensões residuais tornavam-se significativas: a 6 m do solo a tensão ainda foi subestimada em 30%; contudo, a alturas inferiores, foi sempre sobrestimada, sendo que a 2 m foi quase quatro vezes maior que a medida (figura 6.18c).

Quanto à tensão $\overline{u'w'}$, os resultados das simulações efectuadas com as diferentes malhas praticamente só apresentaram diferenças entre eles acima de $z' \approx 20$ m (figura 6.17f). Um facto saliente das previsões foi terem mostrado valores positivos abaixo de $z' \approx 3$ m, quando todas as medições são negativas. No entanto, considerando a contribuição do campo residual, tal nunca acontece (figura 6.18d). À semelhança do que sucedeu com as tensões $\overline{v'v'}$ e $\overline{w'w'}$, a contribuição do campo residual junto do solo foi excessiva: a título de exemplo, na simulação E, a tensão a 2 m do solo foi quase três vezes maior que o valor medido. Acima de $z' = 10$ m, a contribuição do campo residual não era significativa e a tensão foi subestimada.

Comparando os resultados do *speedup* previsto pela simulação D com os do modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997), verifica-se que a previsão do modelo $k-\varepsilon$ é sempre melhor (figura 6.19). Até 6 m do solo, os resultados do modelo $k-\varepsilon$ coincidem praticamente com as medições; abaixo dessa altura, o modelo $k-\varepsilon$ também subestima o *speedup*, mas o erro é menor que o da simulação D. Para ter uma previsão semelhante nessa zona com o método das grandes escalas da turbulência, foi preciso usar a malha E.

6.3.6 Ponto CP'

No ponto CP', o *speedup* medido pelos anemómetros de copos é maior que o medido pelos anemómetros *Gill UVW*, uma discrepância para a qual Taylor and Teunissen (1985) não encontram explicação. Tal como no ponto HT, os resultados das simulações eram praticamente constantes até 4 m do solo; no entanto, no ponto CP', a simulação E só subestimou o *speedup* a 1.6 m do solo e o erro foi apenas de 10% (figura 6.20a). A influência da resolução da malha, da condição de entrada variável e do tempo de desenvolvimento foram idênticas ao visto no ponto HT, pelo que não se repetem aqui.

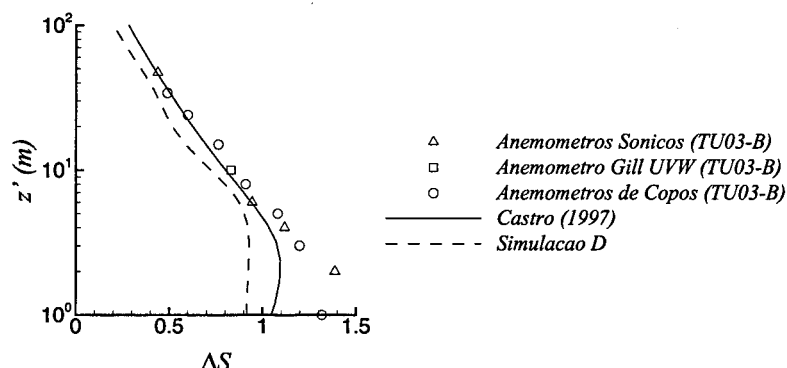


Figura 6.19: Perfis do *speedup*, no local mais alto do monte (ponto HT), obtidos numa simulação com o modelo $k-\varepsilon$ (Castro, 1997) e na simulação D.

Quanto ao ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente, a nossa opinião é que foi sempre bem previsto, uma vez que a maior diferença entre os valores medidos e os resultados das simulações foi apenas de 4° , no ponto a 5 m do solo (figura 6.20b).

Também de modo idêntico ao observado no ponto HT, os resultados das simulações mostraram uma variação reduzida da componente vertical da velocidade média, entre $\bar{w} = 0.02$ e 0.06 (figura 6.20c). As medições mostram sempre valores maiores, particularmente a 10 m do solo, em que as simulações previram uma velocidade cerca de três vezes menor que a medida. Todavia, conforme se pode verificar na figura 6.13(d), o erro deveu-se ao decréscimo acentuado da componente vertical da velocidade média nesta zona do escoamento; por exemplo, a magnitude prevista sobre a linha AA, 20 m a montante de CP', foi idêntica à medida em CP'.

A tensão $\overline{u'u'}$ foi sempre sobrestimada no ponto CP' (figura 6.20d). Os melhores resultados foram os da simulação D, mas apresentaram erros de pelo menos 25%. Geralmente, tanto o aumento da resolução no plano horizontal como a diminuição de $\Delta z_{\min}$ melhoravam as previsões; note-se, porém, que nesta zona a resolução no plano horizontal das várias malhas era semelhante, visto que todas estavam centradas no ponto CP, onde $\Delta x = \Delta y = 10$ m. Deste modo, o efeito da resolução horizontal seria devido aos factores de expansão f_x e f_y diferentes e não à resolução local. Apesar da contribuição do campo residual ter sido importante junto ao solo, tal como no ponto HT, no ponto mais baixo onde existem medições (5 m) ela era ainda muito reduzida. A condição de entrada variável não provocou alterações significativas, enquanto as causadas pelo tempo de desenvolvimento diferente podiam atingir os 15%.

Tal como a tensão $\overline{u'u'}$, $\overline{v'v'}$ foi sempre sobrestimada, particularmente a 10 m do solo, onde os valores previstos eram pelo menos duas vezes maiores que o medido (figura 6.20e). Também como aconteceu com a tensão $\overline{u'u'}$, os melhores resultados foram os da simulação D. Saliente-se que se em ambos os casos o $\Delta z_{\min}$ menor usado pela simulação D

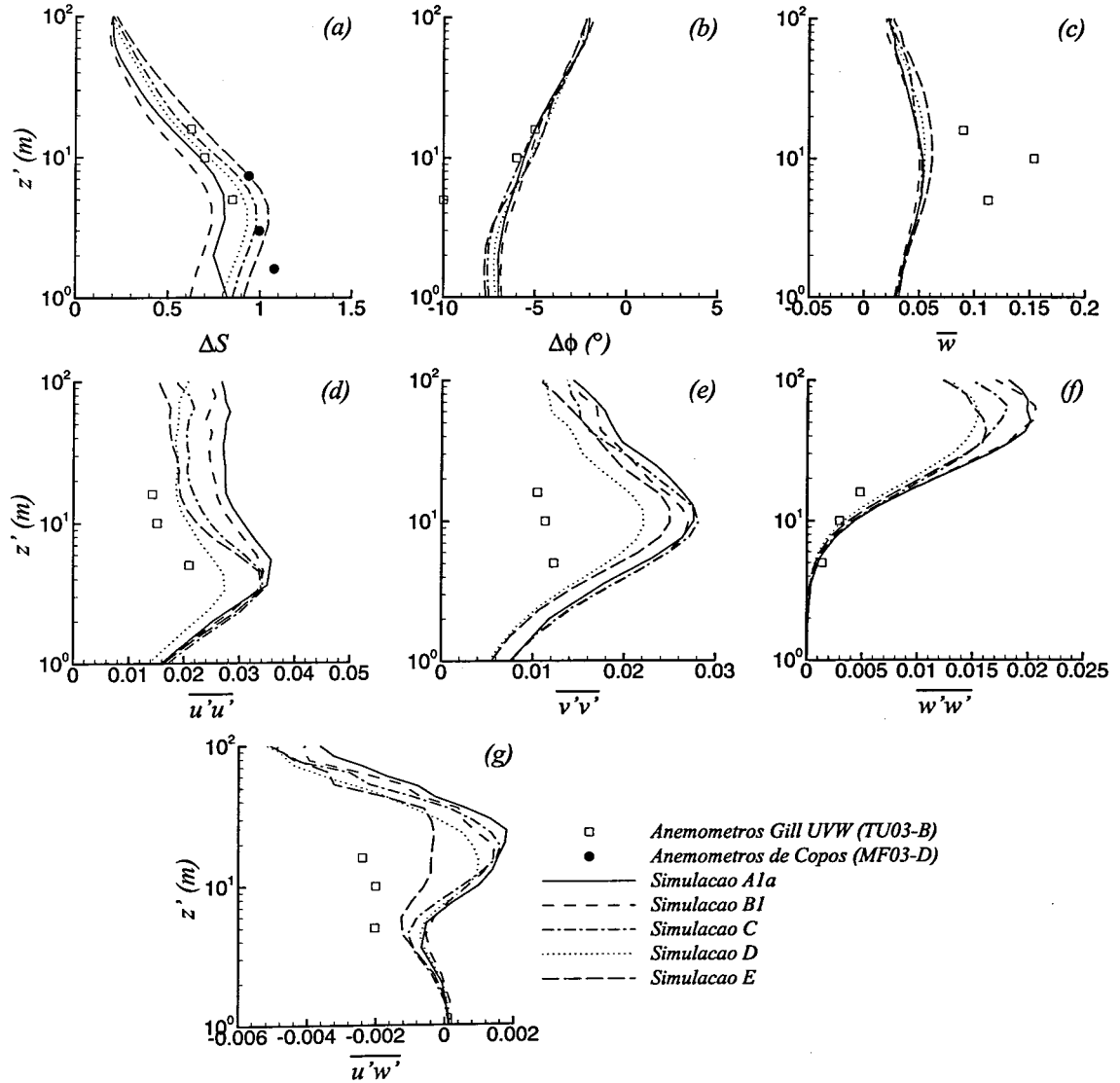


Figura 6.20: Perfis do *speedup*, do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente, da componente vertical da velocidade média e das tensões de Reynolds, no centro do monte (ponto CP'), obtidos de simulações com malhas diferentes.

relativamente à simulação C provocou uma redução significativa das tensões, o mesmo não sucedeu nas simulações A1a e B1, que também só diferem no valor de $\Delta z_{\min}$. Os resultados experimentais mostram um pequeno aumento em direcção ao solo que, considerando a contribuição do campo residual, os resultados das simulações não mostraram entre os 5 e os 10 m. O ponto a 5 m do solo é, aliás, daqueles em que há resultados experimentais, o único em que a contribuição do campo residual foi significativa, contudo sem ultrapassar os 15% do campo resolvido. O tempo de desenvolvimento teve alguma influência nesta tensão, mas nunca ultrapassou os 20%.

No ponto CP', a tensão $\overline{w'w'}$ foi sobrestimada tanto a 10 como a 20 m do solo (figura 6.20f). A 10 m do solo, o erro da simulação D foi de apenas 15%; já a 20 m, o erro ultrapassou os 50%. A 5 m do solo, a contribuição do campo residual era mais importante que a do campo resolvido, o que deu origem a que a tensão prevista fosse cerca do triplo da medida. Nesta tensão não houve influência significativa tanto da condição de entrada como do tempo de desenvolvimento.

Tal como no ponto HT, os resultados das simulações previram alguns valores positivos da tensão $\overline{u'w'}$, o que não é confirmado por nenhuma das medições (figura 6.20g). Aliás, no ponto CP', os valores positivos não se limitaram à zona mais próxima do solo: exceptuando a simulação E, todas as outras mostraram-nos também entre os 7 e os 40 m. Essa zona foi aquela, também, onde a influência da condição de entrada variável e do tempo de desenvolvimento foram maiores: em alguns pontos, a tensão prevista por A1b chegou a ser metade da prevista por A1a, enquanto na simulação B3 a tensão deixava de ser positiva acima de $z' = 20$ m. No entanto, não se verificou que com o aumento do tempo de desenvolvimento a zona de valores positivos tendesse a desaparecer: apenas se verificaram algumas oscilações, que tanto podiam fazer com que a tensão passasse a ser negativa, como podiam torná-la ainda mais positiva. Se nas tensões normais, particularmente $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$, a simulação D foi a que proporcionou os melhores resultados, nesta tensão os melhores resultados foram os da simulação E, por só mostrarem valores positivos abaixo de $z' = 2$ m. Todavia, considerando a contribuição do campo residual, a tensão prevista a 5 m do solo foi cerca de 50% maior que a medida.

6.4 Conclusões

No ponto RS, a velocidade média foi bem prevista na zona com mais interesse para a engenharia, até 100 m do solo; acima dessa altura, as medições desviavam-se do perfil logarítmico, que foi previsto pelas nossas simulações que utilizaram malhas com maior resolução. Como seria de esperar, dado as malhas utilizadas possuírem uma resolução limitada nesta zona (Δx entre 200 e 400 m), a distância à secção de entrada ser reduzida e aí ter sido usada uma condição fixa em quase todas as simulações, as previsões das tensões de Reynolds não foram correctas. No caso das tensões $\overline{v'v'}$, $\overline{w'w'}$ e $\overline{u'w'}$, próximo do solo, as tensões de Reynolds eram contabilizadas quase só no campo residual. As tensões normais foram maiores

nas simulações que usaram malhas mais finas, mas não necessariamente mais correctas: na simulação em que se usou a malha com mais resolução horizontal, foram previstos alguns valores para a tensão $\overline{u'u'}$ superiores ao dobro dos medidos. As maiores variações causadas pelo tempo de desenvolvimento foram de 50% e verificaram-se na tensão $\overline{u'w'}$. A influência da condição de entrada foi maior, pois fez que alguns valores das tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$ triplicassem. É nossa opinião que para obter resultados melhores seria necessário utilizar malhas com maior resolução nesta zona e condições de entrada que considerassem as flutuações das grandes escalas da turbulência; eventualmente, poderia ser necessário colocar a fronteira de entrada mais afastada.

Na maioria dos casos estudados, as simulações previram correctamente a magnitude das componentes horizontal e vertical da velocidade média ao longo das linhas A, AA e B. Os maiores erros observaram-se sobre a linha AA, a jusante do monte, em que a componente horizontal foi subestimada em cerca de 30%. No entanto, o uso de malhas com maior resolução no plano horizontal proporcionou previsões correctas da velocidade a partir de 400 m a jusante do monte. A previsão do ângulo entre o escoamento local e o escoamento incidente apresentou algumas discrepâncias, particularmente na esteira do monte. Nessa zona, sobre a linha A, as simulações apresentaram uma variação excessiva do ângulo $\Delta\phi$, mais acentuada nas malhas com maior resolução. Sobre a linha AA, não estão disponíveis resultados experimentais do ângulo $\Delta\phi$, mas os resultados das simulações não foram tão diferentes entre si como sobre a linha A, pois a maior diferença que mostraram foi de 15°.

Foi também na esteira do monte, ao longo das linhas A e AA, que os resultados das tensões de Reynolds obtidos de simulações com malhas diferentes mostraram as diferenças maiores. Geralmente os resultados dependiam mais da resolução da malha no plano horizontal do que da distância do primeiro nó ao solo, o que nos leva a pensar que trabalhos futuros devem incidir neste aspecto, verificando a influência de $\Delta x_{\min}$ e de $\Delta y_{\min}$. Contudo, o efeito da resolução acrescida foi quase sempre o de acentuar os valores extremos previstos pelas simulações, distanciando-os das medições no caso da linha A. Comparando os resultados de uma das nossas simulações com os obtidos com o modelo $k-\varepsilon$ numa malha idêntica (Castro, 1997), verificámos que, a montante do monte, as previsões das tensões do método das grandes escalas da turbulência eram mais correctas, pois o modelo $k-\varepsilon$ prevê valores semelhantes para as três tensões normais.

Os perfis verticais nos pontos HT e CP' mostraram que a velocidade era subestimada junto ao solo e que, para o perfil ser resolvido adequadamente, era necessário que $\Delta z_{\min}$ fosse menor que 1.5 m. O aumento da resolução horizontal da malha aumentou sempre a velocidade próximo do solo, aproximando-a das medições. Comparando o *speedup* previsto por uma das nossas simulações com os resultados do modelo $k-\varepsilon$, verificou-se que a previsão do modelo $k-\varepsilon$ é mais correcta, pois a velocidade é menos subestimada. Quanto às tensões de Reynolds, notou-se que para $z' < 10$ m uma parte significativa delas era contabilizada pelo campo residual e não pelo campo resolvido. Exceptuando a tensão $\overline{u'u'}$ no ponto HT, todas as outras tensões eram sobrestimadas junto ao solo, o que terá estado na origem da menor velocidade observada nessa zona. Por exemplo, no ponto HT, onde existem medições

a 2 m do solo, a tensão menos sobrestimada foi $\overline{v'v'}$; mesmo assim, o erro foi superior a 60%. É nossa opinião que estas previsões só podem ser melhoradas usando um modelo de tensões residuais capaz de representar a transferência inversa de energia, do campo residual para o campo resolvido

De todas as quantidades que comparámos, só não se observaram alterações significativas provocadas pelo tempo de desenvolvimento na componente vertical da velocidade média. A influência deste parâmetro foi maior na zona do escoamento próxima de uma zona de recirculação que existia junto do solo, dada a menor velocidade. Por isso, afigura-se-nos que este deve ser outro parâmetro a verificar, monitorizando a velocidade no interior da zona de recirculação, para determinar tanto o tempo de desenvolvimento como o tempo durante o qual devem ser calculadas as médias. É possível que os valores que utilizámos não tenham sido correctos para resolver o escoamento nessa zona, embora se tenham mostrado adequados quando observámos o espectro da velocidade em CP.

Efectuámos também uma simulação em que na secção de entrada do domínio se impuseram condições de fronteira obtidas do escoamento desenvolvido sobre uma placa plana. Como seria de esperar, o local onde os resultados foram mais influenciados pelas condições de fronteira foi o ponto RS, que dista apenas 160 m da secção de entrada, e onde as tensões $\overline{u'u'}$ e $\overline{v'v'}$ triplicaram. No entanto, geralmente as tensões de Reynolds não variavam mais do que 20%, sendo nosso entendimento que os trabalhos futuros devem incidir prioritariamente no modelo de tensões residuais.

Capítulo 7

Conclusões e Trabalho Futuro

7.1 Conclusões

Neste trabalho efectuaram-se simulações de alguns escoamentos, usando os métodos da simulação numérica directa (DNS), da simulação das grandes escalas da turbulência (LES) e das médias de Reynolds (RaNS).

O desempenho dos métodos das médias de Reynolds e da simulação das grandes escalas da turbulência foi comparado na simulação do escoamento em torno de um prisma de secção quadrada (capítulo 3). As simulações realizadas com o método das médias de Reynolds utilizaram o modelo $k-\epsilon$, na versão original e também em três variantes, duas das quais alteram o termo de produção da energia cinética da turbulência e outra, o termo de produção de dissipação. Com a utilização destas variantes tentou-se suprir uma deficiência do modelo original: a produção excessiva de energia cinética da turbulência junto da face frontal do prisma, quando experimentalmente se verifica que ela é reduzida ou mesmo negativa. O que mais se destacou nos resultados das simulações foi o comprimento da zona de recirculação ter sido sempre sobrestimado (o pior resultado foi o do modelo original, cerca de duas vezes maior), as tensões de Reynolds terem sido geralmente subestimadas, principalmente na zona de recirculação e na sua proximidade, e o coeficiente de arrasto ter sido também subestimado entre 3 e 15%.

As simulações do escoamento em torno do prisma realizadas com o método das grandes escalas da turbulência serviram também para comparar o desempenho de dois esquemas de discretização temporal: o esquema de Adams-Bashfort de segunda ordem e o de Runge-Kutta (4,3). O esquema de Runge-Kutta (4,3) foi o adoptado para efectuar outras simulações (descritas nos capítulos 5 e 6), porque proporcionou resultados idênticos aos do esquema de Adams-Bashfort, exigia um esforço computacional menor e é mais estável. Os resultados mostraram deficiências na modelação do escoamento junto das faces horizontais do prisma e na sua esteira, que julgamos serem devidas a uma resolução insuficiente da

malha; designadamente, patentearam uma velocidade $\bar{u}$ positiva em alguns pontos junto das faces horizontais (o que não é confirmado experimentalmente) e uma recuperação excessiva também da velocidade $\bar{u}$ na esteira. Os resultados relacionados com a componente longitudinal da velocidade (velocidade média $\bar{u}$, tensão de Reynolds $\overline{u'u'}$ e tensão periódica $\bar{u}\bar{u}$) denotaram uma concordância melhor com os resultados experimentais do que os relacionados com a componente transversal (velocidade média $\bar{v}$, tensão de Reynolds $\overline{v'v'}$ e tensão periódica $\bar{v}\bar{v}$). É sabido que o custo computacional deste método é elevado, o que confirmámos, visto as simulações terem demorado 200 vezes mais tempo e ocupado 30 vezes mais memória do que as realizadas com o método das médias de Reynolds. Por isso, é nossa opinião que embora os resultados obtidos tenham sido melhores do que os obtidos com o método das médias de Reynolds, este último continuará a ser o mais utilizado em aplicações de engenharia.

Simulámos também o escoamento bidimensional, laminar e estavelmente estratificado em torno de um cilindro, para números de Reynolds (Re) entre 20 e 500 e números de Froude interno (F_i) iguais ou superiores a quatro (capítulo 4). Concluímos que os efeitos da estratificação não se faziam sentir para $F_i \geq 100$, uma vez que os resultados que obtivemos na simulação de escoamentos com $F_i = 100$ eram idênticos aos dos escoamentos não estratificados ($F_i = \infty$), com número de Reynolds igual. O aumento da estratificação (diminuição do número de Froude interno) provocou sempre a diminuição do número de Strouhal (St) e a redução da oscilação dos coeficientes de arrasto e de sustentação (visível pela redução de $C_{d_{rms}}$ e de $C_{l_{rms}}$). A máxima velocidade negativa no interior da zona de recirculação também diminuiu com o aumento da estratificação (no caso do escoamento com $Re = 500$, chegou a ser 36% menor), mas o comprimento médio da zona de recirculação nunca se alterou mais de 5%, tal como a evolução temporal dos ângulos de estagnação e de separação, que também foi pouco afectada. Os vórtices que se desprendiam do cilindro diminuía de tamanho quando se afastavam, até desaparecerem, dado tenderem a criar zonas instáveis, com fluido mais pesado sobre fluido mais leve. No caso do escoamento com $Re = 50$, que ocorria em regime periódico quando $F_i \geq 10$, a estratificação também fez que passasse a verificar-se em regime estacionário quando $F_i \leq 5$. Devemos referir ainda que, usando o mesmo domínio computacional e zonas de amortecimento iguais (mesmo comprimento e mesma intensidade), não foi possível simular escoamentos com número de Froude interno inferior a quatro sem que a solução fosse afectada por reflexões das ondas gravíticas. cremos que a amplitude destas ondas foi aumentada pelo modelo bidimensional usado neste trabalho, que pode não ser representativo dos escoamentos reais.

Estudámos também o efeito da utilização de uma malha não-ortogonal e não-desfasada na simulação numérica directa do decaimento da turbulência isotrópica, usando a metodologia dos volumes finitos (capítulo 5). Considerámos quatro domínios, diferentes no ângulo entre a direcção Cartesiana z e a direcção computacional ζ , enquanto as outras duas direcções computacionais coincidiam com as direcções Cartesianas x e y . Em todos os domínios foram gerados campos iniciais de velocidade com o mesmo espectro de energia e de correlações; no entanto, devido ao modo como eram calculadas as derivadas

nas malhas não-ortogonais, o campo de vorticidade e o tensor das taxas de deformação eram diferentes. Por exemplo, as distribuições estatísticas das derivadas da velocidade e da vorticidade apresentavam caudas mais largas. Contudo, estas diferenças atenuaram-se durante o decaimento da turbulência e, após metade do *eddy turnover time*, não eram maiores que as observadas entre simulações iniciadas com campos de velocidade diferentes numa malha Cartesiana. O alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação principais, relevante para a transferência de energia da turbulência, nunca foi influenciado pela não-ortogonalidade da malha. Por tudo isto, considerou-se que era possível utilizar malhas não-ortogonais com os métodos da simulação numérica directa e das grandes escalas da turbulência.

Finalmente, o escoamento atmosférico sobre o monte de Askervein foi simulado usando o método das grandes escalas da turbulência (capítulo 6). Estas simulações destinaram-se a avaliar o desempenho do programa desenvolvido na simulação de um escoamento em que a turbulência era influenciada pela topografia. Compararam-se resultados obtidos com malhas, tempos de desenvolvimento (tempo simulado antes do início do cálculo das estatísticas) e condições de entrada diferentes. A maior influência sobre os resultados foi da malha: na esteira do monte, as simulações que usaram malhas com maior resolução no plano horizontal previram valores extremos maiores. O tempo de desenvolvimento também teve alguma influência sobre os resultados na esteira, visto que próximo do solo existia uma zona de recirculação, com um tempo de desenvolvimento superior ao do restante escoamento. Dos três parâmetros testados, o que teve menor influência foi a condição de entrada, pois as diferenças entre os resultados alcançados com uma condição de entrada obtida a partir da simulação do escoamento sobre uma placa plana e entre os conseguidos com um perfil logarítmico geralmente não excederam os 20%. Porém, o facto mais relevante foi as tensões de Reynolds próximo do solo serem excessivamente contabilizadas pelo modelo de Smagorinsky, em vez de serem consideradas no campo resolvido.

7.2 Trabalho Futuro

O desenvolvimento do trabalho apresentado pode levar-se a cabo sequer em três áreas: modelação física, desempenho computacional e precisão.

O aspecto que nos parece mais importante melhorar no programa desenvolvido relaciona-se com a modelação física, mais concretamente com a modelação dos escoamentos junto de superfícies sólidas, para o que propomos a substituição do modelo de tensões residuais. Na proximidade de uma parede a turbulência tem que ser resolvida pelo modelo de tensões residuais, uma vez que a sua escala é menor que a da filtragem. Além disso, o tamanho dos turbilhões que é necessário representar é menor e a sua quantidade é maior; a transferência inversa de energia (*backscatter*) também é mais importante que no interior do escoamento e a sua modelação mais difícil, pois a transferência ocorre para escalas responsáveis pela produção da turbulência, em vez de ocorrer para escalas inerciais. Por isso, a precisão do

modelo de tensões residuais é crítica. O modelo dinâmico de Germano et al. (1991) não é adequado para o fim que pretendemos, porque não é capaz de prever a transferência inversa de energia. As alternativas a considerar são, por exemplo, o modelo misto de Bardina et al. (1983), o modelo de Mason and Thomson (1992) ou o modelo dinâmico de Zhang et al. (1993). O conhecimento adquirido ao longo desta tese, sobre a influência dos parâmetros numéricos, permitirá avançar com mais segurança para a aplicação de outros modelos de tensões residuais em sistemas de coordenadas genéricos.

Para melhorar o desempenho computacional do programa, é de considerar a sua paralelização, de modo a utilizar eficientemente os mais recentes recursos computacionais, permitindo usar malhas com mais nós e dispor dos resultados mais rapidamente. Nesta hipótese não incluímos a paralelização dos ciclos do código, já utilizada neste trabalho (no capítulo 3, nas simulações com o método das grandes escalas da turbulência). São duas as hipóteses actuais de paralelização: actuar unicamente no algoritmo de resolução dos sistemas de equações ou decompor o domínio espacial. Para a paralelização do algoritmo de resolução dos sistemas de equações, é provável que um dos algoritmos do espaço de Krylov (Bi-CGSTAB, QMR ou GMRES) se mostre mais eficiente do que o utilizado na versão sequencial (SIP). No entanto, como o tempo gasto pelo programa sequencial na resolução do sistema de equações lineares é idêntico ao despendido no cálculo dos fluxos, as melhorias serão limitadas. Recorrendo à decomposição do domínio, é de esperar uma eficiência superior, mas mais dificuldades de implementação.

É possível que na simulação de escoamentos próximo de superfícies, com malhas mais finas, o passo temporal seja limitado pela estabilidade do esquema de discretização temporal (Runge-Kutta (4,3)) e não pela precisão pretendida. Neste caso, poder-se-á tratar os termos difusivos, e talvez também os convectivos, de forma implícita, para que seja possível usar passos temporais maiores. Caso se opte por um esquema completamente implícito, poder-se-á efectuar a paralelização recorrendo também à decomposição do domínio temporal. As vantagens deste procedimento são descritas por Seidl et al. (1997), designadamente.

A precisão da discretização espacial pode ser melhorada recorrendo a esquemas de discretização de ordem superior. A alternativa mais simples é utilizar um esquema com quarta ordem de precisão, mas existem outras possíveis, entre as quais, os esquemas essencialmente não-oscilatórios (ENO — *Essentially Non-Oscillatory*, Harten et al., 1987).

Registe-se, por último, que os modelos de tensões residuais, a paralelização de algoritmos em Mecânica de Fluidos Computacional ou de resolução de sistemas de equações lineares e os esquemas de discretização espacial são temas actuais de investigação, cujo desenvolvimento pode contribuir para a melhoria do programa de cálculo desenvolvido nesta tese.

Bibliografia

- S. S. Abarbanel, W. S. Don, D. Gottlieb, D. H. Rudy, and J. C. Townsend. Secondary frequencies in the wake of a circular cylinder with vortex shedding. *Journal of Fluid Mechanics*, 225:557–574, 1991.
- C. R. Anderson and M. B. Reider. A higher order explicit method for the computation of flow about a circular cylinder. *Journal of Computational Physics*, 125:207–224, 1996.
- J. Bardina, J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds. Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows. Technical Report TF-19, Stanford University, Thermosciences Division, Department of Mechanical Engineering, Stanford, California, USA, 1983.
- R. Barrett, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, Philadelphia, USA, 1994.
- D. L. Boyer, P. A. Davies, H. J. S. Fernando, and X. Z. Zhang. Linearly stratified flow past a horizontal circular cylinder. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 328(1601):501–528, 1989.
- M. Braza, P. Chassaing, and H. Ha Minh. Numerical study and physical analysis of the pressure and velocity fields in the near wake of a circular cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 165:79–130, 1986.
- M. Breuer and M. Pourquié. First experiences with LES of flows past bluff bodies. In W. Rodi and G. Bergeles, editors, *Proceedings of the Third International Symposium of Engineering Turbulence Modeling and Measurements*, volume 3 of *Engineering Turbulence Modeling and Experiments*, pages 177–186, Heraklion-Crete, Grece, May 27–29 1996. Assembly of the World Conferences on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Elsevier Science B. V.
- M. Breuer and W. Rodi. Large-eddy simulation of turbulent flow through a straight square duct and a 180° bend. In Voke et al. (1994), pages 273–285.
- X.-M. Cai and D. G. Steyn. The von Kármán constant determined by large-eddy simulation. *Boundary-Layer Meteorology*, 78:143–164, 1996.

- B. Cantwell and D. Coles. An experimental study of entrainment and transport in the turbulent near wake of a circular cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 136:321–374, 1983.
- C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer Series in Computational Physics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, 1988.
- D. Carati, S. Ghosal, and P. Moin. On the representation of backscatter in dynamic localization models. *Physics of Fluids*, 7:606–616, 1995.
- M. H. Carpenter and C. A. Kennedy. Fourth-order 2N-storage Runge-Kutta schemes. Technical Report NASA-TM-109112, NASA Langley Research Center, 1994.
- F. A. Castro. *Métodos Numéricos para a Simulação de Escoamentos Atmosféricos sobre Topografia Complexa*. PhD thesis, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 1997.
- I. P. Castro. Effects of stratification on separated wakes: Part 1, weak static stability. In Mobbs and King (1989), pages 323–346.
- I. P. Castro, W. H. Snyder, and P. G. Baines. Obstacle drag in stratified flow. *Proceedings of Royal Society of London, Series A*, 192:119–140, 1990.
- F. H. Champagne, C. A. Friehe, J. C. LaRue, and J. C. Wyngaard. Flux measurements, flux estimation techniques and fine-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 34:515–530, 1977.
- J. R. Chasnov. Simulation of the Kolmogorov inertial subrange using an improved subgrid model. *Physics of Fluids A*, 3:188–200, 1991.
- C. M. Cheng, P. C. Lu, and R. H. Cheng. Wind loads on square cylinders in homogeneous turbulent flows. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 41:739–749, 1992.
- J.-P. Chollet and M. Lesieur. Parameterization of small scales of three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 38:2747–2757, 1981.
- R. A. Clark, J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds. Evaluation of subgrid-scale models using an accurately simulated turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 91:1–16, 1979.
- G. N. Coleman, J. H. Ferziger, and P. R. Sparlat. A numerical study of the turbulent Ekman layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 213:313–348, 1990.
- P. A. Davies, D. L. Boyer, H. J. S. Fernando, and X. Z. Zhang. Wake flows in stratified fluids. In Mobbs and King (1989), pages 301–322.

- J. W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 41:453–480, 1970.
- J. A. Domaradzki and E. M. Saiki. A subgrid-scale model based on the estimation of unresolved scales of turbulence. *Physics of Fluids*, 9:2148–2164, 1997.
- D. F. G. Durão, M. V. Heitor, and J. C. F. Pereira. Measurements of turbulent and periodic flows around a square cross-section cylinder. *Experiments in Fluids*, 6:298–304, 1988.
- J. G. M. Eggels, S. J. Bekink, and T. M. M. Verheggen. LES in the petro-chemical industry: Applications and experience within Shell. In Geurts and Kuerten (1997), pages 112–121.
- G. Erlebacher and M. Y. Hussaini. Direct numerical simulation and large eddy simulation of compressible turbulence. In Galperin and Orszag (1993), pages 231–253.
- J. H. Ferziger. Direct and large eddy simulation: Applications to complex and stratified flows. In Geurts and Kuerten (1997), pages 162–174.
- J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, first edition, 1996.
- C. A. J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*, volume 1. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, second edition, 1991.
- R. Franke, W. Rodi, and B. Schonung. Analysis of experimental vortex-shedding data with respect to turbulence modelling. In *Proceedings of the Seventh Symposium on Turbulent Shear Flows*, pages 24.4.1–24.4.5, California, USA, August 21–23 1989. Stanford University.
- S. H. Frankel, V. Adumitroaie, C. K. Madnia, and P. Givi. Large eddy simulation of turbulent reacting flows by assumed PDF methods. In Ragab and Piomelli (1993), pages 81–101.
- B. Galperin and S. A. Orszag, editors. *Large Eddy Simulation of Complex Engineering and Geophysical Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 1993.
- M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A*, 3:1760–1765, 1991.
- T. Gerz and J. M. L. M. Palma. Sheared and stably stratified homogeneous turbulence: Comparison of DNS and LES. In Voke et al. (1994), pages 145–156.
- B. J. Geurts and J. G. M. Kuerten, editors. *DNS and LES of Complex Flows — Numerical and Modelling Aspects*, The Netherlands, July 9–11 1997. University of Twente.
- S. Ghosal. An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence. *Journal of Computational Physics*, 125:187–206, 1996.

- S. Ghosal, T. S. Lund, P. Moin, and K. Akselvoll. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 286:229–255, 1995.
- S. Ghosal and P. Moin. The basic equations for the large eddy simulation of turbulent flows in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 118:24–37, 1995.
- T. Goutorbe, D. Laurence, and V. Maupu. A priori test of a subgrid scale stress tensor including anisotropy and backscatter effects. In Voke et al. (1994), pages 121–131.
- H. Hanazaki. Drag coefficient and upstream influence in three-dimensional stratified flow of finite depth. *Fluid Dynamics Research*, 4:317–322, 1988a.
- H. Hanazaki. A numerical study of three-dimensional stratified flow past a sphere. *Journal of Fluid Mechanics*, 192:393–419, 1988b.
- C. Härtel and L. Kleiser. Energy transfer between large and small scales in wall-bounded turbulent flows. In Ragab and Piomelli (1993), pages 21–28.
- A. Harten, B. Engquist, and S. Osher. Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics*, 71:231–303, 1987.
- R. D. Henderson and D. Barkley. Secondary instability in the wake of a circular cylinder. *Physics of Fluids*, 8:1683–1685, 1996.
- J. R. Herring and O. Metais. Numerical experiments in forced stably stratified turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, pages 97–115, 1989.
- K. A. Hoffmann, S. T. Chiang, S. Siddiqui, and M. Papadakis. *Fundamental Equations of Fluid Mechanics*. Engineering Education System, Kansas, USA, first edition, 1996.
- H. Honji. Vortex motions in stratified wake flows. In *IUTAM Symposium on Fundamental Aspects of Fluid Motion*, pages 204–207, Tokyo, Japan, 1987.
- A. K. M. F. Hussain. Coherent structures — reality and myth. *Physics of Fluids*, 26: 2816–2850, 1983.
- J. Jiménez. An overview of LES validation. In AGARD Advisory Group for Aerospace Research & Development, editor, *A Selection of Test Cases for the Validation of Large-Eddy Simulations of Turbulent Flows*, pages 1–3. North Atlantic Treaty Organization, 1998.
- J. Jiménez and A. A. Wray. On the characteristics of vortex filaments in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 373:255–285, 1998.
- J. Jiménez, A. A. Wray, P. G. Saffman, and R. Rogallo. The structure of intense vorticity in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 255:65–90, 1993.

- G. Jin and M. Braza. Two-equation turbulence model for unsteady separated flows around airfoils. *AIAA Journal*, 32:2316–2320, 1994.
- H.-J. Kaltenbach. Cell aspect ratio dependence of anisotropy measures for resolved and subgrid scale stresses. *Journal of Computational Physics*, 136:399–410, 1997.
- H.-J. Kaltenbach, U. Schumann, and T. Gerz. Large-eddy simulation of turbulent diffusion in stably-stratified shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 280:1–40, 1994.
- M. Kato and B. E. Launder. The modelling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders. In *Proceedings of the Ninth Symposium on Turbulent Shear Flows*, page 10.4.1, Kyoto, Japan, August 16-18 1993. Kyoto University.
- R. M. Kerr. Higher-order derivative correlations and the alignment of small-scale structures in isotropic numerical turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 153:31–58, 1985.
- R. M. Kerr, J. A. Domaradzki, and G. Barbier. Small-scale properties of nonlinear interactions and subgrid-scale energy transfer in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 8: 197–208, 1996.
- P. K. Khosla and S. G. Rubin. A diagonally dominant second-order accurate implicit scheme. *Computers in Fluids*, 2:207–209, 1974.
- J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59:308–323, 1985.
- J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 177:133–166, 1987.
- J. B. Klemp and D. R. Durran. An upper boundary condition permitting internal gravity wave radiation in numerical mesoscale models. *Monthly Weather Review*, 111:430–444, 1983.
- S. J. Kline, B. J. Cantwell, and G. M. Lilley, editors. *The 1980-81 AFOSR-HTTM-Stanford Conference on Complex Turbulent Flows: Comparison of Computation and Experiment*, Stanford, California, USA, September 1980. Thermosciences Division, Mechanical Engineering Department, Stanford University.
- D. Knight, G. Zhou, N. Okong'o, and V. Shukl. Compressible large eddy simulation using unstructured grids. AIAA Paper 98-0535, 1998.
- P. M. Knupp and S. Steinberg. *Fundamentals of Grid Generation*. CRC Press, USA, 1994.
- R. H. Kraichnan. Eddy viscosity in two and three dimensions. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 33:1521–1536, 1976.
- A. G. Kravchenko and P. Moin. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 131:310–322, 1997.

- B. E. Launder, G. J. Reece, and W. Rodi. Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 68:537–566, 1975.
- B. E. Launder and D. B. Spalding. *Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, London, United Kingdom, 1972.
- B. E. Launder and D. B. Spalding. The numerical computation of turbulent flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3:269–289, 1974.
- B. E. Lee. The effect of turbulence on the surface pressure field of a square prism. *Journal of Fluid Mechanics*, 69:263–282, 1975.
- C. E. Leith. Stochastic backscatter in a subgrid-scale model: Plane shear mixing layer. *Physics of Fluids A*, 2:297–300, 1990.
- A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Advanced Geophysics*, 18A:237–248, 1974.
- B. P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 19: 59–98, 1979.
- M. A. Leschziner and W. Rodi. Calculation of annular and twin parallel jets using various discretization schemes and turbulence-model variations. *Journal of Fluids Engineering*, 103:352–360, 1981.
- M. Lesieur and O. Métais. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28:45–82, 1996.
- D. K. Lilly. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In *Proceedings of the Tenth IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences*, pages 195–210. Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, USA, 1967.
- D. K. Lilly. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure model. *Physics of Fluids A*, 4:633–635, 1992.
- S. Liu, C. Meneveau, and J. Katz. On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 275:83–119, 1994.
- D. A. Lyn, S. Einav, W. Rodi, and J.-H. Park. A laser-Doppler velocimetry study of ensemble-averaged characteristics of the turbulent near wake of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 304:285–319, 1995.
- D. A. Lyn and W. Rodi. The flapping shear layer formed by flow separation from the forward corner of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 267:353–376, 1994.

- P. J. Mason and A. R. Brown. The sensitivity of large-eddy simulations of turbulent shear flow to subgrid models. *Boundary Layer Meteorology*, 70:133–150, 1994.
- P. J. Mason and N. S. Callen. On the magnitude of the subgrid-scale eddy coefficient in large-eddy simulations of turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 162:439–462, 1986.
- P. J. Mason and D. J. Thomson. Stochastic backscatter in large-eddy simulations of boundary layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 242:51–78, 1992.
- I. McLean and I. Gartshore. Spanwise correlations of pressure on a rigid square cylinder. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 41:779–808, 1992.
- O. Métais and M. Lesieur. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 239:157–194, 1992.
- T. F. Miller and F. W. Schmidt. Use of a pressure-weighted interpolation method for the solution of the incompressible Navier-Stokes equations on a nonstaggered grid system. *Numerical Heat Transfer*, 14:212–233, 1988.
- R. Mittal and S. Balachandar. Direct numerical simulation of flow past elliptic cylinders. *Journal of Computational Physics*, 124:351–367, 1996.
- S. D. Mobbs and J. C. King, editors. *Waves and Turbulence in Stably Stratified Flows*, New Series, United Kingdom, December 1989. The Institute of Mathematics and its Applications, Oxford University Press, Oxford, United Kingdom.
- C.-H. Moeng. A large-eddy simulation model for the study of planetary boundary-layer turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41:2052–2062, 1984.
- P. Moin and J. Kim. Numerical investigation of turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 118:341–377, 1982.
- P. Moin and J. Kim. Tackling turbulence with supercomputers. *Scientific American*, pages 46–52, January 1997.
- R. H. Monroe and C. C. Mei. The shape of two-dimensional turbulent wakes in density stratified fluids. Technical Report 110, MIT Hydrodynamics Laboratory, 1968.
- S. A. Orszag and G. S. Patterson. Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Physical Review Letters*, 28:76–79, 1972.
- Y. H. Pao, M. E. Callahan, and G. K. Timm. Vortex streets in stably stratified fluids. Technical Report D1-82-0736, Boeing Sci. Res. Lab. Doc., 1968.
- S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, New York, USA, 1980.

- S. V. Patankar and D. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:1787–1806, 1972.
- M. Perić. Efficient semi-implicit solving algorithm for nine-diagonal coefficient matrix. *Numerical Heat Transfer*, 11:251–279, 1987.
- M. Persillon and M. Braza. Physical analysis of the transition to turbulence in the wake of a circular cylinder by three-dimensional Navier-Stokes simulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 365:23–88, 1998.
- U. Piomelli. Applications of large eddy simulations in engineering: An overview. In Galperin and Orszag (1993), pages 119–137.
- U. Piomelli, W. H. Cabot, P. Moin, and S. Lee. Subgrid-scale backscatter in turbulent and transitional flows. *Physics of Fluids A*, 3:2133–2142, 1991.
- U. Piomelli, J. H. Ferziger, and P. Moin. Models for large eddy simulation of turbulent channel flows including transpiration. Technical Report TF-32, Stanford University, Thermosciences Division, Department of Mechanical Engineering, Stanford, California, USA, 1988.
- W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling. *Numerical Recipes in FORTRAN*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, second edition, 1993.
- M. J. Rabbitt. Some validation of standard, modified and non-linear $k-\varepsilon$ turbulence models. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24:965–986, 1997.
- S. A. Ragab and U. Piomelli, editors. *Engineering Applications of Large Eddy Simulations — 1993*, volume 162 of *FED*, Washington, D.C., USA, June 20–24 1993. The Fluids Engineering Conference, American Society of Mechanical Engineers, USA.
- M. M. Rai and P. Moin. Direct simulation of turbulent flow using finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 96:15–53, 1991.
- G. D. Raithby, G. D. Stubble, and P. A. Taylor. The Askervein hill project: A finite control volume prediction on three-dimensional flows over the hill. *Boundary-Layer Meteorology*, 39:107–132, 1987.
- O. Reynolds. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A*, 186:123, 1895.
- W. C. Reynolds. The potential and limitations of direct and large eddy simulations. In J. L. Lumley, editor, *Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads*, pages 313–343, Ithaca, New York, USA, March 22–24 1989. Cornell University, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany.

- C. M. Rhie and W. L. Chow. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21:1525–1532, 1983.
- P. J. Roache. *Verification and Validation in Computational Science and Engineering*. Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico, USA, first edition, 1998.
- W. Rodi. On the simulation of turbulent flow past bluff bodies. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 46/47:3–19, 1993.
- W. Rodi, J. H. Ferziger, M. Breuer, and M. Pourquié. Status of large eddy simulation: Results of a workshop. *Journal of Fluids Engineering*, 119:248–262, 1997.
- H. Schimdt and U. Schumann. Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. *Journal of Fluid Mechanics*, 200:511–562, 1989.
- H. Schlichting. *Boundary-Layer Theory*. McGraw-Hill series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, New York, USA, sixth edition, 1968.
- G. E. Schneider and M. Zedan. A modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems. *Numerical Heat Transfer*, 4:1–19, 1981.
- U. Schumann. Algorithms for direct numerical simulation of shear-periodic turbulence. In Soubbaramayer and J. P. Boujot, editors, *Proceedings of the Ninth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, pages 492–496. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, 1985.
- U. Schumann. Large eddy simulation of turbulent convection over flat and wavy surfaces. In Galperin and Orszag (1993), pages 399–421.
- U. Schumann. Stochastic backscatter of turbulence energy and scalar variance by random subgrid-scale fluxes. *Proceedings of Royal Society of London, Series A*, 451:293–318, 1995.
- V. Seidl, S. Muzaferija, and M. Perić. Parallel DNS with local grid refinement. In Geurts and Kuerten (1997), pages 223–228.
- E. D. Siggia. Numerical study of small-scale intermittency in three-dimensional turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 107:375–406, 1981.
- J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. I: the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91:99–165, 1963.
- A. Sohankar, C. Norberg, and L. Davidson. Simulation of three-dimensional flow around a square cylinder at moderate Reynolds numbers. *Physics of Fluids*, 11:288–306, 1999.
- D. B. Spalding. A novel finite-difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 4:551–559, 1972.

- C. G. Speziale. On nonlinear $k-l$ and $k-\varepsilon$ models of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 178:459–475, 1987.
- M. A. Stadtherr. High performance computing: Are we just getting wrong answers faster? In *CAST Division Awards Banquet*, November 17 1998.
- H. L. Stone. Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 5:530–558, 1968.
- R. B. Stull. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Atmospheric Sciences Library. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1988.
- P. A. Taylor and H. W. Teunissen. Askervein '82: Report on the September/October 1982 experiment to study boundary layer flow over Askervein, South Uist. Technical Report MSRS-83-8, Meteorological Services Research Branch, Atmospheric Environment Service, Downsview, Ontario, Canada, November 1983.
- P. A. Taylor and H. W. Teunissen. The Askervein hill project: Report on the September/October 1983, main field experiment. Technical Report MSRS-84-6, Meteorological Services Research Branch, Atmospheric Environment Service, Downsview, Ontario, Canada, December 1985.
- H. W. Teunissen, M. E. Shokr, A. J. Bowen, C. J. Wood, and D. W. R. Green. The Askervein hill project: Wind tunnel simulations at three length scales. *Boundary-Layer Meteorology*, 40:1–29, 1987.
- D. J. Tritton. *Physical Fluid Dynamics*. Oxford Science Publications, Oxford, United Kingdom, second edition, 1988.
- J. S. Turner. *Buoyancy Effects in Fluids*. Cambridge Monographs on Mechanics and Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, first edition, 1973.
- E. R. van Driest. On the turbulent flow near a wall. *Journal of Aeronautical Science*, 23: 1007–1011, 1956.
- B. J. Vickery. Flutuating lift and drag on a long cylinder of square cross-section in a smooth and in a turbulent stream. *Journal of Fluid Mechanics*, 25:481–494, 1966.
- A. Vincent and M. Meneguzzi. The spatial structure and statistical properties of homogeneous turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 225:1–20, 1991.
- P. R. Voke. Flow past a square cylinder: test case LES2. In J.-P. Chollet, P. R. Voke, and L. Kleiser, editors, *Direct and Large-Eddy Simulation II*, Grenoble, France, September 16–20 1996. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.

- P. R. Voke, L. Kleiser, and J.-P. Chollet, editors. *Direct and Large-Eddy Simulation I: Selected Papers from the First ERCOFTAC Workshop on Direct and Large-Eddy Simulation*, Guilford, United Kingdom, March 27–30 1994. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.
- H. Werner and H. Wengle. Large-eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel. In F. Durst, R. Friedrich, B. E. Launder, F. W. Schmidt, U. Schumann, and J. H. Whitelaw, editors, *Proceedings of the Eighth Symposium on Turbulent Shear Flows*, pages 19.4.1–19.4.6, Germany, September 9–11 1991. Technical University of Munich.
- C. H. K. Williamson. The existence of two stages in the transition to three-dimensionality of a cylinder wake. *Physics of Fluids*, 31:3165–3168, 1988.
- C. H. K. Williamson. Three-dimensional wake transition. *Journal of Fluid Mechanics*, 328: 345–407, 1996.
- J. H. Williamson. Low-storage Runge-Kutta schemes. *Journal of Computational Physics*, 35:48–56, 1980.
- V. C. Wong and D. K. Lilly. A comparison of two dynamic closure methods for turbulent thermal convection. *Physics of Fluids A*, 6:1016–1023, 1994.
- Y. Xu, H. J. S. Fernando, and D. L. Boyer. Turbulent wakes of stratified flow past a cylinder. *Physics of Fluids*, 7:2243–2255, 1995.
- M. M. Zdravkovich. *Flow Around Circular Cylinders*. Oxford University Press, Oxford, United Kingdom, 1996.
- O. Zeman and N. O. Jensen. Modification of turbulence characteristics in flow over hills. *Boundary-Layer Meteorology*, 113:55–80, 1987.
- H.-Q. Zhang, U. Fey, and B. R. Noack. On the transition of the cylinder wake. *Physics of Fluids*, 7:779–794, 1995.
- Y. Zhang, R. L. Street, and J. R. Koseff. A dynamic mixed subgrid scale-model and its application to turbulent recirculating flows. *Physics of Fluids A*, 5:3186–3196, 1993.

