



SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE CONVECÇÃO NATURAL  
TURBULENTA EM CAVIDADES COM GERAÇÃO DE CALOR  
VOLUMÉTRICA

Camila Braga Vieira

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientador: Su Jian

Rio de Janeiro  
Março de 2014

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE CONVECÇÃO NATURAL  
TURBULENTA EM CAVIDADES COM GERAÇÃO DE CALOR  
VOLUMÉTRICA

Camila Braga Vieira

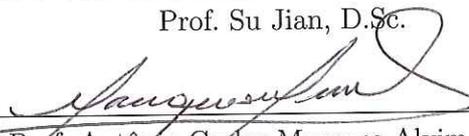
TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ  
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)  
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR  
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:



---

Prof. Su Jian, D.Sc.



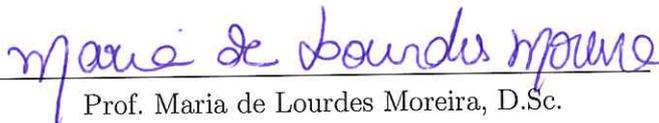
---

Prof. Antônio Carlos Marques Alvim, Ph.D.



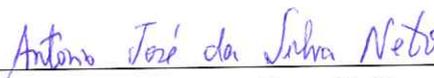
---

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.



---

Prof. Maria de Lourdes Moreira, D.Sc.



---

Prof. Antônio José da Silva Neto, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
MARÇO DE 2014

Braga Vieira, Camila

Simulação Computacional de Convecção Natural Turbulenta em Cavidades com Geração de Calor Volumétrica /Camila Braga Vieira. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XXIII, 171 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Su Jian

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 143-154.

1. Acidente severo. 2. Convecção natural. 3. Turbulência. I. Su, Jian. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*À minha família.*

# Agradecimentos

Primeiramente agradeço ao meu supervisor, pela orientação, atenção, paciência e oportunidades que me foram indicadas.

Agradeço ao CNPq e ao INCT pelo apoio financeiro. Aos professores e funcionários do PEN/COPPE/UFRJ, pela dedicação e atenção.

Agradeço muito à toda equipe LASME, em especial à Pamela e Felipe, pela disposição em me ajudar todos os momentos em que precisei, assim como também agradeço pela ajuda técnica do grupo de alunos do LTFD.

Agradeço à equipe do Paul Scherrer Institut (PSI), local em que trabalhei por um ano, pela receptividade e conhecimento transmitido por cada um dessa equipe. Agradeço especialmente ao Dr Brian pela amizade, confiança e grande contribuição não apenas para minha tese, mas também para minha carreira profissional. Também agradeço à sua esposa Mila, pela amizade, a qual foi muito importante durante o período em que estive na Suíça.

Agradeço ao Dr Bojan, pela orientação durante o período em que estive no PSI e também após meu retorno ao Brasil. Agradeço a ele por ter aceitado me receber no seu grupo, pelo apoio e lições que levarei por toda vida.

Tenho uma especial admiração e gratidão pelo casal Betty e Rien, o qual me ajudou em muitos sentidos e que sempre me transmitiram força e coragem. Agradeço à minha amiga e quase-mãe Victória e também aos meus amigos de Goiânia, Déborah, Vitor, Lorena e Dani, pelo suporte emocional.

Por fim, agradeço à minha família, que sempre foi meu suporte, minha fonte de força e superação, também à minha avó Lourdes pelas orações. Essa tese é dedicada aos meus pais Iracema e Sebastião, e irmã Carolina, os quais com certeza são minha maior motivação de vida e a quem eu devo tudo que sou e tenho recebido.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (DSc.)

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE CONVECÇÃO NATURAL  
TURBULENTA EM CAVIDADES COM GERAÇÃO DE CALOR  
VOLUMÉTRICA

Camila Braga Vieira

Março/2014

Orientador: Su Jian

Programa: Engenharia Nuclear

O objetivo principal do trabalho foi a investigação da convecção natural turbulenta em fluidos com geração de calor volumétrica. Simulações foram realizadas em cavidades quadrada, 1/4 de círculo e semiesférica, com fluidos com números de Prandtl variando de 0.6 a 8.52 e número de Rayleigh interno na faixa de  $10^6 - 10^{16}$ . Fazendo-se uso do código aberto de CFD OpenFOAM, quatro modelos de turbulência baseados nas equações médias de Reynolds Navier-Stokes (RANS) foram analisados, tais como o  $k-\varepsilon$ , baixo número de Reynolds  $k-\varepsilon$  (modelo Launder-Sharma), SST e V2-f. A implementação do modelo V2-f baseada nas modificações sugeridas por Davidson et al. (2003) foi realizada na versão 1.7.1 do OpenFOAM e validada em simulações em canal de escoamento. A análise de modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos como o modelo algébrico AFM proposto por Kenjereš et al. (2005) e GGDH proposto por Daly e Harlow (1970) também foi realizada por esse trabalho de tese. Tais modelos foram implementados em solvers aplicados para escoamentos com empuxo e validados com os resultados experimentais fornecidos por Cheesewright e King (1990) e numéricos de Kenjereš (1998). O desempenho do modelo V2-f, assim como dos modelos anisotrópicos AFM e GGDH, foi avaliado em simulações em cavidade representativa do experimento BALI, o qual foi realizado em condições similares às condições de um acidente severo.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

COMPUTATIONAL SIMULATION OF TURBULENT NATURAL  
CONVECTION IN CAVITIES WITH VOLUMETRIC HEAT GENERATION

Camila Braga Vieira

March/2014

Advisor: Su Jian

Department: Nuclear Engineering

The main objective of this work was the analysis of the turbulent natural convection in fluids with volumetric heat source. Simulations were performed in square, 1/4 of circle and hemisphere cavities containing fluids with Prandtl numbers ranging from 0.6 to 8.52 and internal Rayleigh numbers in the range of  $10^6 - 10^{16}$ . Making use of the open source CFD software OpenFOAM, four turbulence models based on RANS equations were assessed:  $k-\varepsilon$ , low-Reynolds  $k-\varepsilon$  (Launder-Sharma model), SST  $\varepsilon$  V2-f. The implementation of the V2-f, based on the modifications suggested by Davidson et al. (2003), was done in OpenFOAM-1.7.1 and validated by means of simulations in a channel flow. The investigation of anisotropic models for the turbulent heat fluxes calculation, such as the algebraic heat flux AFM proposed by Kenjereš et al. (2005) and the GGDH given by Daly e Harlow (1970) was also done. Both AFM and GGDH models were implemented in solvers applied for buoyant fluids and validated with the experimental data provided by Cheesewright e King (1990) and numerical ones given by Kenjereš (1998). The performance of V2-f and the anisotropic models AFM and GGDH, was carried out in simulations done in the same geometry of the BALI experiment, which was performed under similar conditions of a severe accident.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>vi</b>
<b>Abstract</b>	<b>vii</b>
<b>Índice de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Índice de Tabelas</b>	<b>xviii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xx</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Descrição fenomenológica de acidente severo em uma usina do tipo PWR . . . . .	1
1.2 Estratégia de gerenciamento de acidente severo - retenção do núcleo derretido no interior do vaso de pressão (IVMR) . . . . .	6
1.3 Convecção natural gerada por fonte interna de calor . . . . .	7
1.4 Simulação computacional por meio dos métodos de CFD . . . . .	9
1.4.1 OpenFOAM . . . . .	12
1.5 Motivação . . . . .	14
1.6 Objetivos . . . . .	15
1.7 Organização do texto . . . . .	16
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>18</b>
2.1 Trabalhos experimentais . . . . .	18
2.2 Modelos de turbulência . . . . .	25
2.3 Trabalhos numéricos . . . . .	29

<b>3</b>	<b>Metodologia</b>	<b>35</b>
3.1	Equações governantes . . . . .	35
3.1.1	Equações de Navier-Stokes tridimensionais com fluido incompressível . . . . .	35
3.2	As equações de médias de Reynolds - RANS . . . . .	40
3.2.1	As equações do modelo $k-\varepsilon$ . . . . .	43
3.2.2	As equações do modelo SST . . . . .	46
3.2.3	Modelo de baixo número de Reynolds - Launder-Sharma (Launder e Sharma, 1974) . . . . .	47
3.2.4	Modelo de baixo número de Reynolds - V2-f . . . . .	48
3.2.5	Abordagens de tratamento dos fluxos turbulentos de calor $\overline{\theta u'_j}$ . . . . .	51
3.3	Métodos numéricos no OpenFOAM . . . . .	53
<b>4</b>	<b>Validação do modelo V2-f</b>	<b>59</b>
<b>5</b>	<b>Validação dos modelos anisotrópicos para os fluxos de calor turbulentos</b>	<b>67</b>
<b>6</b>	<b>Análise de modelos de turbulência RANS em uma cavidade quadrada com fonte interna de calor uniforme.</b>	<b>79</b>
6.1	Performance dos modelos de turbulência $k-\varepsilon$ , baixo-número de Reynolds $k-\varepsilon$ (Launder e Sharma (1974) model), V2-f e SST com o modelo SGDh para o cálculo de $\overline{\theta u'_i}$ . . . . .	79
6.2	Aplicação de modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos. . . . .	109
<b>7</b>	<b>Simulações de validação em geometria representativa do experimento BALI</b>	<b>113</b>
<b>8</b>	<b>Análises tridimensionais em uma cavidade semi-esférica</b>	<b>130</b>
<b>9</b>	<b>Conclusões e Sugestões para Futuros trabalhos</b>	<b>139</b>
9.1	Conclusões . . . . .	139
9.2	Sugestões para futuros trabalhos . . . . .	142

<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>143</b>
<b>A Implementações realizadas no OpenFOAM</b>	<b>155</b>
A.1 Modelo de turbulência V2-f . . . . .	155
A.2 Condição de contorno para $\varepsilon$ , requerida pelo modelo V2-f . . . . .	164
A.3 Modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos	
- AFM e GGDH . . . . .	168

# Lista de Figuras

1.1	Esquema do estado final do núcleo do reator após o acidente na TMI-2 (Rempe et al., 2008). . . . .	3
1.2	(a) Estratificação convencional e (b) estratificação inversa do corium no plenum inferior (Vieira et al., 2014). . . . .	5
3.1	Variação da densidade da água em função da variação da temperatura ocorrida no experimento BALI. . . . .	37
4.1	Esquema do canal de escoamento . . . . .	59
4.2	Esquema representativo do balanço de forças em um canal de escoamento . . . . .	60
4.3	Velocidade adimensional ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005). . . . .	63
4.4	Valores adimensionais de $k$ ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005). . . . .	64
4.5	Taxa de dissipação adimensional da energia cinética turbulenta $\varepsilon$ ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005). . . . .	65

4.6	Valores adimensionais de $v^2$ ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005). . . . .	66
5.1	Esquema de uma cavidade retangular com paredes diferencialmente aquecidas, utilizada nas simulações com $Pr = 0,71$ e $Ra_e = 5 \times 10^8$ (Vieira et al., 2013) . . . . .	68
5.2	Perfis do (a) componente vertical da velocidade ( $V$ ) em $m/s$ , (b) componente vertical do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta v}$ ) e (c) componente horizontal do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta u}$ ), ambos em $Km/s$ , ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5$ ), fornecidos por simulações com o modelo de turbulência V2-f e os modelos SGDh, GGDh e AFM. . . . .	71
5.3	Perfis do componente vertical da velocidade ( $V$ ) em $m/s$ , (b) componente vertical do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta v}$ ) e (c) componente horizontal do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta u}$ ), ambos em $Km/s$ , ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5$ ), fornecidos por simulações com o modelo de turbulência SST e os modelos SGDh, GGDh e AFM. . . . .	72
5.4	Convergência de malha: perfis da velocidade ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5m$ ) fornecidos por (a) V2-f com AFM, (b) SST com AFM, e perfis de $\overline{\theta v}$ ao longo de $y/H = 0,5m$ fornecidos por (c) V2-f com AFM e (d) SST com AFM. . . . .	73
5.5	Convergência de malha: perfis de $\overline{\theta u}$ ao longo de $y/H = 0,5m$ fornecidos por (c) V2-f com AFM e (d) SST com AFM. . . . .	74
5.6	Convergência de malha: perfis de $\overline{\theta u}$ ao longo de $y/H = 0,5m$ fornecidos por (c) V2-f com GGDh e (d) SST com GGDh. . . . .	74
5.7	Convergência de malha: perfis da velocidade ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5m$ ) fornecidos por (a) V2-f com GGDh, (b) SST com GGDh, e perfis de $\overline{\theta v}$ ao longo de $y/H = 0,5m$ fornecidos por (c) V2-f com GGDh e (d) SST com GGDh. . . . .	75
5.8	Simulação realizada com V2-f e SGDh, para $Ra_i = 5 \times 10^8$ e $Pr = 0,71$ . . . . .	76

5.9	Simulação realizada com V2-f e GGDH, para $Ra_i = 5 \times 10^8$ e $Pr = 0,71$ .	77
5.10	Simulação realizada com V2-f e AFM, para $Ra_i = 5 \times 10^8$ e $Pr = 0,71$ .	78
6.1	Esquema da cavidade quadrada utilizada nas simulações para análise dos modelos de turbulência. . . . .	81
6.2	Análise de convergência de malha do modelo V2-f, para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ : distribuição local da média temporal de Nusselt $\overline{Nu}_{dn}$ ao longo da parede do fundo da cavidade. . . . .	83
6.3	Extrapolação de Richardson (Roache, 1998). . . . .	85
6.4	Histórico temporal dos valores de média espacial de $\overline{Nu}$ ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação laminar com $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^6$ . . . . .	88
6.5	Histórico temporal dos valores de média espacial de $\overline{Nu}$ ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo k- $\varepsilon$ , para (a) $Ra_i = 10^9$ e (b) $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	89
6.6	Histórico temporal dos valores de média espacial de $\overline{Nu}$ ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo LS, para (a) $Ra_i = 10^9$ e (b) $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	90
6.7	Histórico temporal dos valores de média espacial de $\overline{Nu}$ ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo SST, para (a) $Ra_i = 10^9$ e (b) $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	91
6.8	Histórico temporal dos valores de média espacial de $\overline{Nu}$ ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo V2-f, para (a) $Ra_i = 10^9$ e (b) $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	92
6.9	Campo de temperatura computado com o modelo SST para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação. . . . .	93
6.10	Componente vertical da velocidade computado com o modelo SST para para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação. . . . .	94

6.11	Campo de temperatura computado com o modelo LS para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação. . . . .	95
6.12	Componente vertical da velocidade computado com o modelo LS para para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação. . . . .	96
6.13	Campo de temperatura computado com o modelo V2f para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação. . . . .	97
6.14	Componente vertical da velocidade computado com o modelo V2f para para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação. . . . .	98
6.15	Campo de temperatura computado com o modelo SST para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação. . . . .	99
6.16	Componente vertical da velocidade computado com o modelo SST para para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação. . . . .	100
6.17	Campo de temperatura computado com o modelo LS para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação. . . . .	101
6.18	Componente vertical da velocidade computado com o modelo SST para para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação. . . . .	102
6.19	Campo de temperatura computado com o modelo V2-f para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação. . . . .	103
6.20	Componente vertical da velocidade computado com o modelo V2-f para para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação. . . . .	104

6.21	Valores da média espacial e temporal dos números de Nusselt ao longo da parede do topo da cavidade quadrada em função dos números de Rayleigh para $Pr = 0,6$ . . . . .	106
6.22	Valores da média espacial e temporal dos números de Nusselt ao longo da parede lateral da cavidade quadrada em função dos números de Rayleigh para $Pr = 0,6$ . . . . .	107
6.23	Valores da média espacial e temporal dos números de Nusselt ao longo da parede do fundo da cavidade quadrada em função dos números de Rayleigh para $Pr = 0,6$ . . . . .	108
6.24	Históricos temporais dos valores de $\overline{Nu}_t$ fornecidos pelo modelo de turbulência V2-f com os modelos GGDH e SGDH, para $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^9$ em uma cavidade quadrada com paredes isotérmicas e fonte volumétrica de calor. . . . .	110
6.25	Distribuição local da média temporal do componente horizontal dos fluxos de calor turbulentos ( $\overline{\theta u}$ ) ao longo de uma linha horizontal central. . . . .	111
6.26	Distribuição local da média temporal do componente vertical dos fluxos de calor turbulentos ( $\overline{\theta v}$ ) ao longo de uma linha vertical central. . . . .	112
7.1	Esboço do experimento BALI (Bernaz et al., 2001). . . . .	114
7.2	Esquemas das geometrias representativas do experimento BALI (Vieira et al., 2013). . . . .	114
7.3	Distribuição de $\overline{Nu}_{dn}$ ao longo do fundo da cavidade BALI-2, para $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{12}$ , fornecido pelo modelo V2-f com SGDH. . . . .	116
7.4	Direção da abscissa curvilínea (Vieira et al., 2013). . . . .	117
7.5	Desenvolvimento da camada limite térmica ao longo da abscissa curvilínea nas geometrias BALI1 e BALI2, para $Ra_i = 10^{10}$ e $10^{12}$ . . . . .	118
7.6	(a) Espessura da camada limite térmica em função de $Ra_i$ e (b) distribuição de $\overline{Nu}_{dn}$ ao longo da parede do fundo da cavidade BALI-2, na faixa de $Ra_i = 10^8 - 10^{12}$ . . . . .	119

7.7	(a) Espessura da camada limite térmica e (b) distribuição local dos valores $\overline{Nu}_{dn}$ ao longo da superfície do fundo da cavidade BALI-2, fornecidas por simulações com o modelo V2-f-SGDH e V2-f-GGDH, para $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{12}$ . . . . .	121
7.8	Histórico temporal da média espacial do número de Nusselt ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) ao longo da parede do fundo da cavidade: BALI-2 com (a) $Ra_i = 10^{14}$ , BALI-1 com (b) $Ra_i = 10^{15}$ e (c) $Ra_i = 10^{16}$ . . . . .	123
7.9	Número de Nusselt ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) global em função do número de Rayleigh interno ( $Ra_i$ ): (a) BALI-1 e (b) BALI-2. . . . .	124
7.10	Distribuição axial da temperatura ao longo da profundidade para $Pr = 7,4$ e $Ra_i = 10^{14}$ . . . . .	125
7.11	Campos adimensionais de temperatura fornecidos por simulação laminar com $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^8$ , após (a) 1000s, (b) 6000s (c) 16000s e (d) 20000s de simulação. . . . .	126
7.12	Campos adimensionais de temperatura fornecidos por simulação laminar com $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{10}$ , após (a) 12000s, (b) 3000s, (c) 37000s e (d) 60000s de simulação. . . . .	127
7.13	Campos adimensionais de temperatura fornecidos pelo modelo V2-f-SGDH com $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{14}$ , após (a) 200s, (b) 520s (c) 620s e (d) 720s. . . . .	128
7.14	Campos adimensionais de velocidade fornecidos pelo modelo V2-f-SGDH com $Pr = 7,0$ e $Ra = 10^{14}$ , após (a) 200s, (b) 520s (c) 620s e (d) 720s de simulação. . . . .	129
8.1	Geometria semiesférica com todas as paredes isotérmicas e fonte volumétrica de calor, utilizada nas simulações tridimensionais. . . . .	131
8.2	Histórico temporal dos valores médios de Nusselt ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) ao longo da parede do fundo da cavidade hemisférica contendo fluido com $Pr = 8,52$ e (a) $Ra_i = 10^8$ , (b) $Ra_i = 10^{11}$ e (c) $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ . . . . .	132

8.3	Histórico temporal dos valores médios de Nusselt ( $\overline{Nu}_t$ ) ao longo da parede do topo da cavidade hemisférica contendo fluido com $Pr = 8,52$ e (a) $Ra_i = 10^8$ , (b) $Ra_i = 10^{11}$ e (c) $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ . . . . .	133
8.4	Distribuição global do número de Nusselt em função do ângulo. . . . .	134
8.5	Contornos dos fluxos de calor distribuídos nas paredes do fundo da cavidade hemisférica fornecidos pelas simulações com (a) $Ra_i = 10^8$ e (b) $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ . . . . .	135
8.6	Campos de temperatura obtidos por simulações turbulentas com o modelo de turbulência V2-f, para fluido com $Pr = 8,52$ e $Ra_i = 10^8$ , nos instantes (a) 1000s e (b) 1420s. . . . .	136
8.7	(a) Campos de temperatura e (b) velocidade obtidos por simulações turbulentas com o modelo de turbulência V2-f para o caso de $Pr = 8,52$ e $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ . . . . .	136
8.8	Campos de velocidade nas regiões próximas ao topo: (a) canto esquerdo e (b) canto direito, obtidos por simulações turbulentas com o modelo de turbulência V2-f para o caso de $Pr = 8,52$ e $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ . . . . .	137
8.9	Valores da média temporal e espacial dos números de Nusselt em função de $Ra_i$ : (a) ao longo da parede do fundo ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) e (b) ao longo da parede da parede do topo ( $\overline{Nu}_t$ ), fornecidos pelo modelo V2-f com SGDh. . . . .	138

# Lista de Tabelas

2.1	Correlações de transferência de calor em camada de fluido e cavidade retangular. . . . .	23
2.2	Correlações de transferência de calor em cavidade semicircular e semi-esférica. . . . .	24
3.1	Constantes e funções de amortecimento do modelo proposto por Launder e Sharma (1974). . . . .	48
4.1	Dados estatísticos da malhas utilizadas nas simulações de análise de convergência. . . . .	60
5.1	Coefficientes utilizados nas equações dos modelos anisotrópicos GGDH e AFM, proposto por Kenjereš et al. (2005) . . . . .	69
6.1	Análise de sensibilidade de malha realizada com o modelo de turbulência V2-f em uma cavidade quadrada bidimensional contendo fluido com $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	82
6.2	Análise de sensibilidade de malha: valores de $\overline{Nu}_{dn}$ fornecidos pelas malhas normalizadas pelo espaçamento da malha mais fina. . . . .	84
6.3	Sumário dos critérios avaliados na análise de sensibilidade de malha com o modelo V2-f, na cavidade quadrada contendo fluido com $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	86
6.4	Valores médios de $y^+$ fornecidos pelos modelos de turbulência SST, k- $\epsilon$ , LS e V2-f, em simulações com $Pr = 0,6$ e $Ra_i = 10^{11}$ . . . . .	86

6.5	Correlações para números de Nusselt em função do número de Rayleigh para as diferentes paredes da cavidade, fornecidas pelos modelos turbulência k- $\varepsilon$ , LS, SST e V2-f . . . . .	106
7.1	Sensibilidade de malha com o modelo V2-f e SGDH, na cavidade BALI-2 contendo fluido com $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{12}$ : dados das malhas e valores globais de $\overline{Nu}_{dn}$ . . . . .	115
7.2	Sumário dos critérios avaliados na análise de sensibilidade de malha com o modelo V2-f e SGDH, na cavidade BALI-2 contendo fluido com $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{12}$ . . . . .	115
7.3	Análise da razão de aspecto: $\overline{Nu}_{dn}$ fornecidos pelas simulações nas geometrias BALI-1 e BALI-2, com o modelo V2-f e SGDH, na faixa de $Ra_i$ de $10^{10}$ à $10^{14}$ . . . . .	118
7.4	Comparação dos resultados de $\overline{Nu}_{dn}$ fornecidos pelo modelo V2-f-SGDH e V2-f-GGDH, em simulações na geometria BALI-2, com $Pr = 7,0$ e $Ra_i = 10^{11}$ e $10^{12}$ . . . . .	120

# Lista de Símbolos

$A$	Área [m <sup>2</sup> ]
$c_p$	Calor específico [J/Kg K]
$Gr$	Número de Grashof ( $Ra/Pr$ )
$g$	Aceleração gravitacional [m/s <sup>2</sup> ]
$H$	Altura da cavidade [m]
$h$	Coefficiente de transferência de calor [W/m <sup>2</sup> K]
$k$	Energia cinética turbulenta [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$\overline{Nu}$	Fluxo térmico adimensional na parede ( $\overline{q}_w/q_v H$ )
$P$	Pressão adimensional
$p$	Pressão [Pa]
$Pr$	Número de Prandtl ( $= \mu C_p/k = \nu/\alpha$ )
$q_w$	Fluxo de calor na parede [W/m <sup>2</sup> ]
$q_v$	Taxa volumétrica de geração de calor [W/m <sup>3</sup> ]
$R$	Raio [m]
$Ra_i$	Número de Rayleigh interno ( $q_v \beta g H^5 / \alpha \nu k$ )
$T$	Temperatura [K]
$t$	Tempo [s]

<b>U</b>	Vetor velocidade [m/s]
<i>U</i>	Componente da velocidade adimensional na direção horizontal
<i>u</i>	Componente da velocidade na direção horizontal [m/s]
<i>V</i>	Componente da velocidade adimensional na direção vertical
<i>v</i>	Componente da velocidade na direção vertical [m/s]
<i>X</i>	Coordenada espacial adimensional na direção horizontal
<i>x</i>	Coordenada espacial na direção horizontal [m]
<i>Y</i>	Coordenada espacial adimensional na direção vertical
<i>y</i>	Coordenada espacial na direção vertical [m]
<i>z</i>	Coordenada espacial na direção transversal da cavidade [m]
<i>Z</i>	Coordenada espacial adimensional na direção transversal

## Letras gregas

$\alpha$	Difusividade térmica [m <sup>2</sup> /s]
$\beta$	Expansividade Térmica [K <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta [m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\lambda$	Condutividade térmica [W/m K]
$\theta$	Temperatura adimensional e temperatura flutuante.
$\mu$	Viscosidade dinâmica [Pa.s]
$\nu_t$	Viscosidade turbulenta [m <sup>2</sup> /s]
$\nu$	Viscosidade cinemática [m <sup>2</sup> /s]
$\rho$	Massa específica do fluido [kg/m <sup>3</sup> ]

$\tau$	Tempo adimensional
$\omega$	Taxa de dissipação turbulenta específica [1/s]

## Subscritos

<i>ave</i>	Média
<i>buoy</i>	Empuxo
<i>d</i>	Dinâmica
<i>e</i>	Externo
<i>i</i>	Interno
<i>l</i>	Esquerda
<i>max</i>	Máxima
<i>ref</i>	Referência
<i>r</i>	Direita
<i>sd</i>	Lateral
<i>v</i>	Volumétrico
<i>w</i>	Parede
<i>b, dn</i>	Fundo
<i>t, up</i>	Topo

## Siglas

AFM	Algebraic Flux Model
CFD	Computational Fluid Dynamics

FOAM	Field Operation and Manipulation
GGDH	General Gradient Diffusion Hypothesis
PWR	Pressurized Water Reactor
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SGDH	Simple Gradient Diffusion Hypothesis

# Capítulo 1

## Introdução

Este capítulo aborda a motivação da realização deste trabalho, a qual trata-se da possibilidade de ocorrência de acidente severo em usinas nucleares que, por sua vez, culmina na degradação do núcleo do reator e conseqüente convecção natural devido ao calor de decaimento no material derretido deslocado para a região inferior do vaso de pressão (plenum inferior).

São detalhadas as características de acidente severo, assim como a importância do estudo de convecção natural para a garantia de manutenção da integridade física do vaso de pressão e coibição de conseqüências mais severas após esse tipo de acidente, além de uma breve abordagem sobre simulações de CFD e principais características da ferramenta de simulação utilizada nesse trabalho, o OpenFOAM.

### **1.1 Descrição fenomenológica de acidente severo em uma usina do tipo PWR**

Reatores nucleares são suscetíveis à ocorrência de acidentes severos, os quais são caracterizados por serem acidentes que culminam em, no mínimo, uma deformação inicial do núcleo do reator (IAEA, 2009). De acordo com o relatório Rasmussen apresentado em 1978, a probabilidade de acidentes severos ocorrerem seria em média de um a cada 40 anos (Petrangeli, 2006), sendo reforçado pelo acidente na unidade 2 da Three Mile Island (TMI-2) em 28 de março de 1979, quase um ano após a

publicação do relatório.

A fim de entender com mais clareza o que vem a ser um acidente severo, é necessário portanto ter conhecimento a respeito do que se trata um acidente de base de projeto (DBA).

Acidentes de base de projeto são os acidentes propostos com ajuda de considerações probabilísticas durante o projeto de uma usina, ou seja, acidentes de possível ocorrência durante o funcionamento da mesma, visando principalmente o desenvolvimento de um sistema de segurança da viável para o tratamento de tais acidentes (Petrangeli, 2006). O aumento de reatividade em virtude da perda de moderador é um exemplo de acidente de possível ocorrência em atividades normais de um reator. Outros exemplos de problemas que podem ocorrer em uma usina nuclear em funcionamento são:

- falha na válvula de segurança do pressurizador,
- perda instantânea de potência das bombas de refrigeração em virtude de panes elétricas,
- mal funcionamento das varetas de controle,
- perda de refrigerante do reator (LOCA).

Um acidente na proporção de acidente severo é ocasionado pela falha de sistemas designados à evitarem a exposição do núcleo, ou seja, tanto sistemas de refrigeração quanto sistemas de emergência. Se eventualmente, um vazamento de fluido refrigerante (LOCA - “loss of coolant accident”) no circuito primário ocorrer e, por erro humano ou mal funcionamento das válvulas, o sistema de emergência não seja capaz de refrigerar o núcleo, o mesmo pode conseqüentemente ser exposto e superaquecido, com possibilidade de derretimento parcial ou total.

No caso de LOCA, há uma despressurização no sistema primário, onde ocorre a geração de calor por reações de fissão no núcleo do reator e transferência do mesmo para o fluido refrigerante. Após a despressurização, o reator é automaticamente desligado e o sistema de segurança de injeção de água é atuado. Se um ou mais

desses sistemas de segurança falhar após uma LOCA, ocasionalmente a sequência do acidente leva ao derretimento do núcleo.

Esse tipo de acidente envolve um grande número de fenômenos, que pode ser estendido por períodos de tempo que variam de menos de 10 minutos até períodos de 6 – 10 h, após uma exposição inicial do núcleo (Rempe et al., 2008).

O acidente na TMI-2 e mais recentemente o acidente na usina nuclear em Fukushima em 11 de março de 2011 são alguns exemplos de casos com derretimento do núcleo. A Figura 1.1 mostra um esquema do estado final do núcleo do reator após o acidente na usina de TMI-2, o qual resultou em derretimento parcial do núcleo e recolamento de porções de núcleo derretidas (denominada “corium”) no plenum inferior do vaso de pressão.

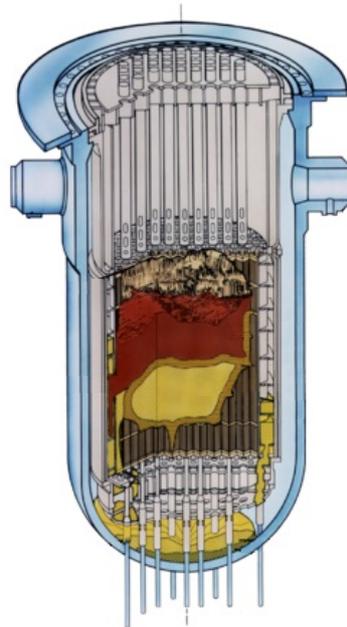


Figura 1.1: Esquema do estado final do núcleo do reator após o acidente na TMI-2 (Rempe et al., 2008).

Segundo Hofmann (1999), os eventos que ocorrem no núcleo de um PWR em situação de acidente severo são definidos de acordo com o aumento de temperatura e seguem a seguinte sequência:

- $800^{\circ}\text{C}$  - derretimento da liga metálica de Ag,In,Cd,
- $1200^{\circ}\text{C}$  - início da oxidação do Zircaloy (Zr) pela água,

- $1760^{\circ}\text{C}$  - derretimento do Zr-4 e início da dissolução do  $\text{UO}_2$  pelo Zr,
- $2690^{\circ}\text{C}$  - derretimento do  $\text{ZrO}_2$ ,
- $2850^{\circ}\text{C}$  - derretimento do  $\text{UO}_2$ .

Assim que o revestimento de Zircaloy começa a fundir ( $> 1760^{\circ}\text{C}$ ), a pastilha de  $\text{UO}_2$  pode ser quimicamente dissolvida e então liquefeita em uma temperatura de cerca de  $1800^{\circ}\text{C}$ . Em temperaturas acima de  $2850^{\circ}\text{C}$ , todos os componentes do núcleo do reator, incluindo o material de maior ponto de fusão,  $\text{UO}_2$ , assim como misturas eutéticas, que se formam no decorrer do acidente, são fundidos.

Após o derretimento inicial do núcleo, o corium reloca para o plenum inferior e pode ser estratificado em uma camada metálica, composta principalmente pelo refletor, aço, ferro e zircaloy, localizada acima de uma piscina de material óxido, formado basicamente por  $\text{ZrO}_2$  e  $\text{UO}_2$ , conforme mostrado na Figura 1.2-a. Alguns materiais óxidos podem ser reduzidos e transferidos para a camada metálica, aumentando a densidade da mesma e culminando em um conseqüente deslocamento de parte de materiais metálicos embaixo da camada óxida, conforme mostrado na Figura 1.2-b.

Uma importante questão é se a integridade física do vaso de pressão pode ser mantida sujeita à elevadas cargas térmicas referentes ao calor de decaimento liberado pelos produtos de fissão presentes no núcleo derretido (cerca de 3000K na camada óxida e 1800K na camada metálica), as quais podem ser maximizadas quando o estado térmico estacionário é alcançado (Theofanous et al., 1997a).

De acordo com Seiler et al. (2007), quanto mais fina for a camada metálica no topo do corium, maior é o risco do fluxo de calor focar nas paredes do vaso, excedendo o fluxo de calor crítico e culminando em uma conseqüente deformação das paredes do vaso. O efeito de foco (“focusing effect”), nome dado ao aumento e concentração do fluxo de calor, é favorável quando a configuração do corium está de acordo com a Figura 1.2-b, a qual contém presença de materiais metálicos no fundo do plenum inferior.

Durante o processo de acidente severo, muitas substâncias podem se tornar miscíveis e formar misturas eutéticas, as quais são constituídas em uma proporção

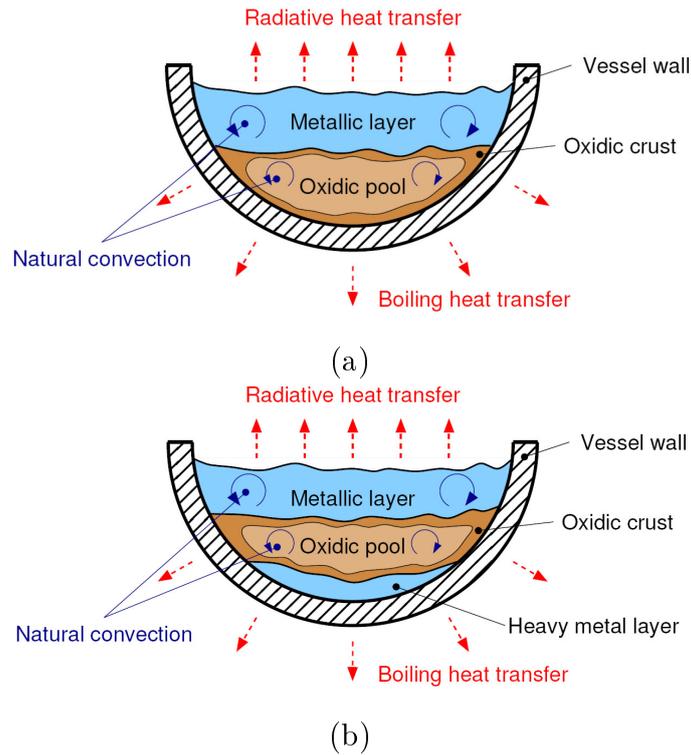


Figura 1.2: (a) Estratificação convencional e (b) estratificação inversa do corium no plenum inferior (Vieira et al., 2014).

cujo o ponto de fusão (ponto eutético) é inferior à temperatura de fusão de cada material individual. Se durante o derretimento do núcleo houver a formação de misturas eutéticas, há um favorecimento para o deslocamento do mesmo para o plenum inferior. Caso, não haja detritos sólidos de parte do núcleo no plenum inferior e o material líquido cair diretamente na parede inferior do vaso de pressão por meio de jatos de colisão (“impinges jets”), o mesmo sofre maior chance de fratura (Rempe et al., 2008).

Dessa forma, é importante entender os processos que ocorrem dentro do vaso de pressão e propor medidas de segurança nessa etapa do acidente a fim de evitar que o núcleo derretido seja transferido para o prédio de contenção. A próxima seção tratará justamente sobre essa medida de gerenciamento de acidente, a retenção do material derretido no vaso.

## 1.2 Estratégia de gerenciamento de acidente severo - retenção do núcleo derretido no interior do vaso de pressão (IVMR)

A estabilização e finalização de um acidente severo por meio de refrigeração do núcleo derretido, submergindo completamente o vaso de pressão ou somente o plenum inferior, é uma das estratégias de gerenciamento de acidente severo, o qual denomina-se de retenção do material derretido dentro do vaso (IVMR- “in-vessel melt retention”).

O progresso de formação do núcleo derretido fornece uma importante entrada para questões relacionadas com falhas no vaso de pressão do reator e também no prédio de contenção. Dessa forma, uma melhor compreensão dos fenômenos dentro do vaso de pressão gerados pelo núcleo degradado é uma etapa importante para a proposta de medidas de gerenciamento de acidente, cálculos para riscos e projetos de reatores com sistemas de segurança melhorados (Hofmann, 1999).

De acordo com Hofmann (1999), o período de um início de acidente para uma descoberta total do núcleo varia de menos de 10 minutos à períodos de 6 a 10 horas. A ausência de fluido refrigerante no núcleo ocasiona uma inicial geração de vapor e escoamento de vapor dentro do núcleo. A taxa de transferência de calor do elemento combustível para o vapor é baixa comparada com o calor de decaimento, favorecendo por consequência, ao aumento da temperatura. A fase de aquecimento do núcleo se estende até o ponto em que os limites da estrutura do núcleo são alcançados. Dessa forma, reações químicas complexas ocorrem, derretimento e liquefação aparecem e o acidente procede até a fusão do núcleo e a fase de relocação do mesmo no plenum inferior.

Um outro fenômeno observado é a formação de cascalhos, os quais se originam de colapsos de materiais sólidos, que podem se depositar em partes intactas do reator ou nas grades espaçadoras. O contínuo aquecimento das camadas de detritos pode ocasionar o derretimento das mesmas em crostas sólidas, que atuam como cadinhos e culminam em um retardo na relocação de partes do núcleo derretido para o plenum

inferior.

As fases líquidas são formadas em diferentes temperaturas durante o progresso de derretimento do núcleo e envolvem tanto variações espaciais quanto temporais. Por consequência dessa distribuição não uniforme de material derretido, nota-se que, em locais diferentes do núcleo pode ocorrer a solidificação da fase líquida e portanto a formação de bloqueios que impedem o deslocamento do material líquido para o fundo do vaso.

A IVMR requer a descrição de como o núcleo derretido se move para a região inferior do vaso de pressão e a determinação da possibilidade de uma falha no vaso de pressão devido ao ataque do jarro de material derretido e explosão de vapor gerada pela inserção do corium na água contida no plenum inferior. Essa estratégia de retenção do núcleo derretido também requer a determinação da configuração do corium, conforme abordado na seção anterior, assim como a descrição do processo de convecção natural no corium, a fim de determinar a magnitude e a distribuição do ângulo polar do fluxo de calor ao longo da parede do fundo do vaso.

### 1.3 Convecção natural gerada por fonte interna de calor

A carga térmica total nas paredes do vaso de pressão é determinada pela transferência de calor por convecção natural no corium. Esta, por sua vez, é caracterizada por forte empuxo resultante de fonte volumétrica de calor (calor de decaimento dos produtos de fissão). A convecção natural gerada por fonte interna de calor é adequadamente analisada em termos dos números adimensionais Rayleigh interno ( $Ra_i$ ) ou Grashof ( $Gr = Ra/Pr$ ) e Prandtl ( $Pr$ ), definidos respectivamente por,

$$Ra = \frac{q_v g \beta H^5}{\alpha \nu \lambda} \quad \text{and} \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha}$$

em que  $q_v$  é a fonte interna de calor,  $\beta$  o coeficiente de expansividade térmica,  $\alpha$  a difusividade térmica,  $\nu$  a viscosidade cinemática,  $\lambda$  a condutividade térmica e  $H$  a altura da cavidade.

Muitas pesquisas sobre convecção natural investigam esse fenômeno ocasionado pela diferença de temperatura ( $\Delta T$ ) entre as paredes da cavidade em que se encontra o fluido, aplicando o conceito de número de Rayleigh proporcional ao  $\Delta T$ , comumente denominado de Rayleigh externo.

Mesmo que em menor proporção, o estudo da convecção natural regida por fonte interna de calor é de grande relevância. Na engenharia nuclear, por exemplo, tem-se o interesse na investigação da convecção natural com fonte volumétrica de calor, visto que, em um reator nuclear sob condição de acidente severo, a presença da convecção natural é decorrente do calor de decaimento dos produtos de fissão presentes no núcleo derretido.

A convecção natural em cavidades é um fenômeno que depende fortemente da geometria, condições de contorno e propriedades termofísicas do fluido. A variação espacial e temporal do fluxo de calor nas paredes do sistema em que se encontra a convecção natural dependem do padrão de escoamento, o qual, dependendo da combinação de  $Ra$  e  $Pr$ , pode ser laminar ou turbulento, cujas características de transferência de calor são completamente diferentes.

Dessa forma, as análises de convecção natural tanto experimental quanto numérica buscam obter correlações que definem a taxa de transferência de calor, representada pelo número de Nusselt ( $Nu$ , número adimensional que relaciona a transferência de calor por condução e por convecção, conforme mostrado pela Equação 1.2) em função dos números de  $Ra_i$  e  $Pr$ , de acordo com a Equação 1.2.

$$Nu = \frac{hH}{\lambda} \quad (1.1)$$

sendo,  $h$  o coeficiente de transferência de calor por convecção e  $H$  a altura da cavidade em que o fluido se encontra.

$$Nu = f(Ra, Pr) = C_a Ra_i^{C_b} Pr^{C_c} \quad (1.2)$$

sendo  $C_a$ ,  $C_b$ ,  $C_c$  constantes obtidas experimentalmente, em que a segunda pode assumir valores de aproximadamente 1/4 para escoamentos laminares e 1/3 para escoamentos turbulentos (Bernaz et al., 2001).

A próxima seção apresenta uma abordagem sobre a metodologia de CFD, a qual é bastante utilizada para o estudo de convecção natural em cavidades, aplicada para a obtenção de números de  $Nu$  e análises do comportamento do fluido em diferentes faixas de  $Ra_i$ .

## 1.4 Simulação computacional por meio dos métodos de CFD

Em virtude das limitações de realização de experimentos com condições de acidente severo, muitos trabalhos de simulação numérica têm sido desenvolvidos com o intuito de fornecer o máximo de informações a respeito dos parâmetros e comportamento de fluidos em convecção natural à elevadas cargas térmicas.

Sabe-se que uma das principais características do fluido em convecção natural no plenum inferior do vaso de pressão após um acidente severo é elevado número de Rayleigh que, por sua vez, favorece a ocorrência de escoamentos altamente turbulentos.

Dessa forma, na tentativa de favorecer uma visão mais detalhada a respeito do comportamento da transferência de calor em fluidos sob convecção natural turbulenta, assim como uma compreensão acerca das propriedades de escoamento, como o campo de velocidade e dissipação de energia cinética, por exemplo, entram em ação as técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD). A CFD é uma ferramenta de simulação numérica de fluidos, com a capacidade de obter os campos de concentração, velocidade, pressão e temperatura, tanto espacial quanto temporal, por meio de modelos microscópicos baseados nos princípios de conservação de massa, da energia e da quantidade de movimento (Anderson et al., 2013).

Pode-se considerar a CFD como uma forma de tornar as equações diferenciais governantes em números que, por sua vez, são tratados tanto no espaço quanto no tempo a fim de que uma descrição numérica possa ser obtida para o escoamento de interesse (Anderson et al., 2013).

O primeiro exemplo de maior visibilidade sobre a aplicação da fluidodinâmica computacional pode ser considerado o trabalho de Kopal (1947) que, apesar de não

ter feito uso de computadores adequados para simulações de CFD, conseguiu compilar tabelas de escoamento supersônico ao redor de cones pontiagudos resolvendo-se as equações diferenciais numericamente.

Todavia, a primeira grande geração de soluções computacionais de fluidodinâmica surgiu durante os anos 50 e 60, estimulados pelo avanço de computadores mais eficientes, com maior capacidade de armazenamento e velocidade de execução dos dados. Exemplos dessa geração são os trabalhos desenvolvidos por Fay e Ridell (1958), acerca de camadas limites e Hall et al. (1962), sobre escoamentos invíscidos.

A partir dos anos 60, houve uma grande aplicabilidade de simulações de CFD em indústrias aeroespaciais (Versteeg e Malalasekera, 2007). Atualmente é grande o número de aplicações de simulações de fluidodinâmica computacional, as quais abrangem projetos de reatores nucleares, incluindo falhas de componentes, escoamentos multifásicos e também acidentes severos em usinas nucleares (Anderson et al., 2013).

A utilização dos métodos de CFD apresentam inúmeras vantagens, dentre as quais destacam-se a capacidade de investigar condições mais extremas como as observadas em acidentes com derretimento do núcleo em reator nuclear, em que altas cargas térmicas são encontradas, além da capacidade de considerável redução no tempo de obtenção de dados e custos de projetos.

Baseado em tais vantagens e nas características de escoamentos turbulentos, os quais incluem tridimensionalidade, natureza randômica e ampla faixa de escalas de comprimento, é notável o número de trabalhos referentes à aplicação da CFD ao estudo da turbulência (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Em escoamentos turbulentos, altamente complexos, a resolução das equações governantes requer a utilização de modelos que facilitem o tratamento das mesmas sem a necessidade de elevado esforço computacional. De acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), em virtude da ampla faixa de escalas de comprimento dos vórtices presentes na turbulência, a primeira abordagem levada em consideração pelos modelos de turbulência é justamente o tratamento numérico dessas escalas e, por conseguinte, o cálculo das propriedades de interesse.

A principal dificuldade na modelagem de turbulência advém justamente dessa

ampla faixa de escalas tanto de comprimento dos vórtices quanto de tempo. Dessa forma, os modelos podem ser classificados de acordo com o tratamento numérico de tais escalas.

Os métodos de cálculo de escoamentos em regime turbulento podem ser agrupados em três grupos (Versteeg e Malalasekera, 2007):

- Modelos de turbulência para as equações de médias de Reynolds Navier-Stokes (RANS): Apresentam como foco principal os efeitos da turbulência nas propriedades médias, visto que as variáveis envolvidas nas equações são definidas pelo componente médio e o componente flutuante. A aplicação dessa consideração leva à geração do termo de tensões de Reynolds, o qual pode ser modelado de diferentes maneiras, de acordo com cada modelo. De forma geral, esses modelos podem ser divididos em três categorias:
  - modelos lineares de viscosidade turbulenta: as tensões de Reynolds são resolvidas por meio de uma relação constitutiva linear, também denominada de hipótese de Boussinesq, na qual a taxa de deformação e as tensões de Reynolds são proporcionais por meio da viscosidade turbulenta. Dentre esses modelos encontram-se o  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$ , baixo número de Reynolds- $k-\varepsilon$  e *SST (Shear Stress Transport)*.
  - modelos não lineares de viscosidade turbulenta: diferem-se dos modelos lineares por utilizarem de uma relação não linear entre o campo médio turbulento e o campo médio de velocidades, apresentando uma função dependente da tensão média e vorticidade ou mesmo de outras variáveis turbulentas.
  - modelos de tensões de Reynolds (RSM): usualmente denominado de modelos de segunda ordem de fechamento, são mais elaborados uma vez que tratam diretamente os tensores de tensões de Reynolds, por meio de equações de transporte para tal variável. Exemplos de modelos RSM são o LRR (Launder et al., 1975) e o SGS (Speziale et al., 1991).
- Simulação de grandes escalas (LES): Filtra espacialmente as equações não-estacionárias de Navier-Stokes, modelando as pequenas escalas por meio de

modelos de sub-malhas. Envolve maior esforço computacional em relação às simulações RANS, visto que as equações são resolvidas para os vórtices de maiores escalas.

- Simulação numérica direta (DNS): Resolve diretamente todas as escalas de comprimento dos vórtices de turbulência. As equações de Navier-Stokes são resolvidas por meio da discretização espacial do domínio em uma malha fina suficiente para resolver as escalas de comprimento de Kolmogorov, ou seja, as menores escalas em que a transmissão de energia cinética não é destruída pela viscosidade. Dessa forma, essa técnica de simulação da turbulência é a que mais requer esforço computacional, sendo portanto, menos aplicada à problemas de fins industriais.

O principal objetivo dos modelos de turbulência é justamente o fechamento do conjunto das equações de Navier-Stokes, por meio de equações explícitas ou diferenciais para os tensores de Reynolds e fluxos de calor turbulentos, os quais são melhor discutidos no Capítulo de Equações Governantes.

Diversos programas são baseados na simulação numérica de fluidodinâmica computacional, dentre os quais se destacam os pacotes comerciais da ANSYS, como FLUENT e CFX (ANSYS® Academic Research), e também o código aberto OpenFOAM (“Open Field Operation and Manipulation”), o qual trata-se da ferramenta de simulação utilizada por esse trabalho. A próxima seção apresenta uma breve noção sobre principais características e estrutura do OpenFOAM (a qual encontra-se bem mais detalhada nos manuais *User’s Guide* e *Programmer’s Guide*).

### 1.4.1 OpenFOAM

O OpenFOAM foi originalmente desenvolvido, com o nome de FOAM, no início dos anos 90 no Imperial College, por dois alunos de doutorado na época, Henry Weller e Hrvoje Jasak. Todavia somente em 2004 tornou-se domínio público por meio da licença GPL (*Gnu Public License*) e desde então, várias versões com melhorias no código foram desenvolvidas (Silva, 2008).

Assim como todos os programas de CFD, o OpenFOAM é estruturado em três principais elementos: o pré-processamento, o qual inclui a geração de geometria, malha e definição do problema físico, solução do problema e pós-processamento.

O OpenFOAM, é escrito na linguagem de C++ e apresenta uma abordagem numérica baseada no método de volumes finitos, cujo sistema de equações governantes é segregado em matrizes resolvidas em uma sequência iterativa, em que a solução é definida no centro das células.

Assim como todos os programas de CFD, o OpenFOAM também está estruturado em três principais etapas: o pré-processamento, a solução das equações que regem o problema físico abordado e o pós-processamento dos resultados gerados.

Os módulos de C++ do OpenFOAM são baseados em executáveis conhecidos como aplicações, as quais podem ser definidas em utilidades e solvers. Os solvers são aplicações designados à resolver as equações governantes de um determinado problema físico. O OpenFOAM inclui mais de 80 solvers que abrangem problemas mais complexos como combustão e transferência de calor turbulento à problemas simples de escoamentos laminares estacionários. Já as utilidades, mais de 170, são destinadas à manipulação dos dados de simulação, as quais incluem ferramentas de pré-processamento, geração de malha, pós-processamento e visualização.

A geração de geometria e malha podem ser feitas no próprio programa, por meio do dicionário próprio para tal finalidade como o *blockMeshDict*, localizado no subdiretório *constant* dentro do diretório do caso de simulação, ou importadas de programas comerciais como o ICEM-CFD da ANSYS por meio do comando de tela *fluentMeshToFoam*.

Sendo um código aberto, o OpenFOAM oferece uma excelente escolha para os usuários de ferramentas de CFD e dentre algumas vantagens que levam à preferência da utilização desse programa encontram-se:

- Total liberdade em criar e modificar um solver.
- Apresenta todas as aplicações de simulação com CFD, como pré e pós processamento e geração de malhas.
- Algoritmos de soluções transparentes os quais podem ser visualizadas pelo

usuário, favorecendo uma melhor compreensão das características físicas do problema.

A escolha do OpenFOAM como ferramenta de simulação para o trabalho desenvolvido por essa tese baseou-se nas vantagens apresentadas acima, dentre as quais, o fato de ser um código aberto foi o que mais contribuiu para a utilização do mesmo. Devido à possibilidade de visualizar o código e modificá-lo, o OpenFOAM mostrou-se uma viável ferramenta para a implementação e modificação de modelos de turbulência, etapas que foram necessárias para a realização desse trabalho.

## 1.5 Motivação

É notório, nas últimas décadas, o avanço de estudos e pesquisas na área de controle e prevenção de acidentes em centrais nucleares. Todavia, falhas no sistema de refrigeração que venham a comprometer a integridade física do núcleo, isto é, acidentes severos, são possibilidades, mesmo que remotas, de ocorrerem em qualquer usina nuclear. Exemplos bem conhecidos são o acidente de 28 de março de 1979, na unidade-2 da Three Mile Island (TMI-2) na Pensilvânia-Estados Unidos, e o recente na usina de Fukushima no Japão, em março de 2011. Dessa forma, todo esforço é válido no que diz respeito à tentativa de melhorar a compreensão desse tipo de acidente e as consequências do mesmo.

Sabe-se que o número de fenômenos presentes no corium é enorme. O número de  $Ra_i$  em um sistema sob condição de acidente severo pode atingir ordem de  $10^{17}$ . O fluido é uma mistura não homogênea, com reações químicas levando a formação de misturas eutéticas, compostas por elementos em proporções que favorecem a redução do ponto de fusão de cada elemento separadamente, geração de produtos de fissão voláteis, complexidade de interações ocorrendo a temperaturas superiores à  $2500^{\circ}C$  entre materias com mudança de fase, formação de crosta óxida, degradação da parede, entre vários outros fenômenos que poderiam ser citados.

A compreensão científica de todos os fenômenos no corium ainda não é possível. Então, a pesquisa exerce uma importante função na implementação de projetos de gerenciamento de acidentes.

Tendo em mente a complexidade do problema decorrente após um acidente severo e o papel da pesquisa para uma melhor visão sobre os acontecimentos em um núcleo derretido, esse trabalho teve por motivação a importância do estudo da convecção natural no favorecimento da integridade física do vaso de pressão e coibição de severas consequências. O trabalho abordou a aplicação de simulações numéricas por meio da metodologia de fluidodinâmica computacional (CFD) na investigação da convecção natural turbulenta, fazendo uso de modelos de turbulência e levando em consideração o desafio de modelagem para os modelos de turbulência devido a fatores como, a presença de fluidos não-estacionários, tratamento especial de escoamentos próximos da parede, visto que as camadas limites estão em constante transição, e o cuidado apropriado da produção de energia cinética devido ao empuxo.

## 1.6 Objetivos

Os objetivos desse trabalho estão relacionados com a possibilidade de aprimorar a investigação da convecção natural turbulenta em cavidades fechadas, visando a aplicação de métodos numéricos da fluidodinâmica computacional (CFD) como ferramenta para o estudo desse problema de transferência de calor nas paredes de um vaso de pressão após um acidente severo.

O foco do trabalho foi a análise do comportamento da convecção natural em regime turbulento em fluidos com características de núcleo derretido à elevadas cargas térmicas. Três etapas portanto são apresentadas: a análise de modelos RANS ( $k - \varepsilon$ , baixo número de Reynolds- $k - \varepsilon$  e V2-f, modelo implementado na versão do OpenFOAM utilizado nas simulações - versão 1.7.1 - e SST) em uma cavidade quadrada, para a escolha do modelo com melhor acurácia; validação do modelo V2-f em simulações à elevados números de  $Ra_i$  ( $10^{16}$ ), em cavidade de mesma geometria da instalação do experimento BALI, realizado no instituto de pesquisa CEA em Grenoble - França e, por fim, simulações tridimensionais em geometria hemisférica, similar à geometria de um plenum inferior do vaso de pressão de um reator PWR.

Uma vez que o interesse desse trabalho encontra-se na modelagem da turbulência, termos como o de empuxo nas equações de transporte da energia cinética

turbulenta e dissipação da energia cinética turbulenta, assim como os fluxos de calor turbulento na equação de conservação de energia também foram investigados, objetivando-se uma melhor compreensão da influência de tais termos no cálculo numérico de convecção natural com fonte interna de calor.

## 1.7 Organização do texto

Essa tese foi baseada no estudo da convecção natural turbulenta em fluidos representativos de material nuclear derretido por meio de técnicas de CFD, utilizando-se como ferramenta de simulação o OpenFOAM-1.7.1. Portanto, nesse primeiro capítulo foram tratados de forma geral os assuntos relacionados à acidente severo, convecção natural e também simulações de CFD, com ênfase no OpenFOAM.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica sobre trabalhos experimentais realizados no intuito de investigar e gerar dados de validação de convecção natural em fluidos representativos do corium, confinados em cavidades. Também apresenta uma abordagem sobre modelagem de turbulência, focando nos modelos que foram utilizados por esse trabalho de tese, assim como uma revisão sobre outros trabalhos numéricos, destacando-se os modelos de turbulência que foram utilizados e principais observações de cada trabalho.

O Capítulo 3 trata da metodologia utilizada para obtenção dos resultados. As equações governantes, assim como as equações de cada modelo de turbulência analisado por essa tese e os métodos numéricos utilizados nos cálculos, assim como o motivo de escolha de cada modelo, são apresentados com mais detalhes.

Os Capítulos 4, 5, 6, 7 e 8 tratam-se de capítulos de resultados. Cada um desses capítulos apresenta detalhes das simulações realizadas, como malha, dados de controle da simulação, como o passo de tempo, e os principais resultados gerados em cada etapa desse trabalho. O primeiro capítulo de resultados (Capítulo 4) mostra as simulações de validação do modelo de turbulência V2-f implementado no OpenFOAM, em um canal de escoamento. O capítulo seguinte apresenta os resultados de validação dos solvers com os modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos, aplicados com o modelo de turbulência V2-f e SST, em uma

geometria retangular com paredes verticais diferentemente aquecidas.

O Capítulo 6 mostra a aplicação de quatro modelos RANS, incluindo o modelo implementado V2-f, em uma geometria quadrada. Também são apresentadas algumas características de cada modelo observadas durante as simulações, discussão sobre os modelos mais robustos e acuratos para análise do problema físico em questão, além da performance do modelo mais robusto nas análises dos modelos RANS com modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos.

O Capítulo 7 mostra a aplicação do modelo V2-f tanto com modelo isotrópico e anisotrópico para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos, em uma situação mais semelhante à uma situação de acidente severo, em termos de geometria (a mesma do experimento BALI, o qual trata-se de um 1/4 de círculo) e condições de contorno utilizadas (paredes isotérmicas, representando uma camada de material óxido ao redor do corium, e números de  $Ra_i$  na faixa de  $10^{15} - 10^{16}$ ). Por fim, o Capítulo 8 mostra resultados de simulações tridimensionais em uma semiesfera fornecidos pelo modelo V2-f, cujos resultados foram validados com dados experimentais obtidos em geometria, condições e fluido similares aos das simulações realizadas.

O último capítulo apresenta as principais conclusões da tese e sugestões para trabalhos futuros relacionados à convecção natural turbulenta. Os detalhes do modelo V2-f, assim como condição de contorno e os solvers implementados no OpenFOAM são apresentados no Anexo A, após as referências bibliográficas.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Este capítulo aborda os trabalhos realizados tanto experimentalmente quanto numericamente em relação às análises de convecção natural em cavidades. Uma visão a respeito dos principais programas experimentais que tiveram por finalidade o estudo do comportamento do núcleo derretido no plenum inferior de um vaso de pressão, assim como trabalhos que geraram correlações empíricas são discutidos na primeira seção deste capítulo. Na seção seguinte, um histórico sobre a modelagem de turbulência, focando nos modelos que foram avaliados nessa tese é apresentado e por fim, na última seção desse capítulo são discutidos alguns trabalhos numéricos sobre convecção natural em cavidades, visando fornecer uma noção sobre a aplicação de diferentes modelos de turbulência na faixa de  $Ra_i$  e  $Pr$  analisada por essa tese.

### 2.1 Trabalhos experimentais

A formação de um núcleo derretido, o desenvolvimento de uma piscina de corium no plenum inferior do vaso de pressão, assim como o comportamento dos mesmos são assuntos críticos para a aplicação de medidas de gerenciamento de acidente severo em usinas nucleares. Dessa forma, muito esforço tem sido feito com a finalidade de melhorar a compreensão dos fenômenos que ocorrem durante o processo de derretimento do núcleo até seu deslocamento para a parte inferior do vaso de pressão.

Mayinger et al. (1976) foram os primeiros a relatar dados experimentais e computacionais a respeito de convecção natural em cavidades semicirculares com fonte interna de calor. Nas últimas décadas, todavia, um número considerável de programas experimentais foi alcançado.

Em institutos de pesquisa localizados em diferentes continentes, experimentos foram conduzidos com a finalidade de reforçar a estratégia de retenção do núcleo na região interna do vaso de pressão, resultando em uma estratégia já aprovada como parte de medidas de controle de acidente severo na usina Loviisa-Finlândia e no projeto AP-6000 da Westinghouse (Kretzschmar e Fluhrer, 2008). Os experimentos COPO I, COPO II-Lo e COPO II-AP (Finlândia e França), BALI (França), SIMECO (Suécia), ACOPO (USA), RASPLAV (Rússia) e LIVE (Alemanha) são, por exemplo, alguns dos principais realizados com o intuito de investigar o comportamento do núcleo derretido no plenum inferior.

A maioria dos programas experimentais mais recentes (a partir dos anos 90) foi conduzida tanto em cavidades hemisféricas tais como o experimento UCLA (Asfia e Dhir, 1996, Asfia et al., 1996), ACOPO (Theofanous et al., 1997a), FOREVER (Sehgal et al., 2006) e LIVE (Buck et al., 2010), quanto em geometrias bidimensionais semicirculares, como o experimento BALI (Bonnet, 1999), COPO II-AP (Halle et al., 1999), RASPLAV (Asmolov et al., 2001), SIMECO (Gubaidullin, 2002) e SIGMA SC (Lee e Suh, 2003). Os experimentos COPO I e II-Lo foram realizados em geometrias similares à cavidade toro esférica do plenum inferior do reator VVER-440, em Loviisa-Finlândia (Kymalainen et al., 1994, 1997).

Asfia e Dhir (1996) realizaram experimentos com o material freon  $R - 113$  ( $Pr = 8,52$ ), na instalação UCLA. Os números de Rayleigh em que as análises experimentais foram feitas variaram de  $10^{10}$  a  $10^{14}$ . Foi observado que o coeficiente de transferência de calor máximo ocorreu na região ligeiramente abaixo da superfície superior da cavidade semiesférica e os resultados de  $Nu$  ao longo da parede do fundo apresentaram boa concordância com a correlação fornecida por Kulacki e Nagle (1975).

Theofanous et al. (1997a) reportaram os primeiros resultados do experimento ACOPO, o qual foi realizado em uma cavidade hemisférica na faixa de números

de Rayleigh de  $10^{15} - 10^{16}$ . A principal limitação do experimento foi o fato do aquecimento volumétrico do fluido (água) ter sido reproduzido por pré-aquecimento do mesmo à altas temperaturas antes da sua introdução na cavidade do vaso, culminando conseqüentemente, em números inferiores de Nusselt em relação a outros experimentos, visto que a perda de calor pelas paredes não pôde ser suprida por uma fonte interna de calor. Nos experimentos LIVE, essa limitação foi superada visto que o fluido continha uma grade interna de aquecimento elétrico o qual o mantinha aquecido durante todo o experimento (Buck et al., 2010).

Em uma cavidade bidimensional com paredes isotérmicas da instalação COPO II-Lo, experimentos foram conduzidos com a finalidade de investigar a transferência de calor por convecção natural em uma solução de  $H_2O - ZnSO_4$ , para uma faixa de número de  $Ra_i$  de  $10^{12}$  à  $10^{13}$  (Kymalainen et al., 1997). Já os experimentos realizados pelo programa COPO I concluíram pelas análises térmicas que a usina nuclear de Loviisa-Finlândia, cujo conceito foi primeiramente proposto por Theofanous (1989), pode ser eficientemente refrigerado externamente como uma medida de retenção do material de núcleo derretido no interior do vaso.

Um dos experimentos mais conhecidos, cujo projeto teve como finalidade a investigação termohidráulica do corium tanto dentro quanto fora do vaso de pressão foram realizados na instalação BALI, localizada na CEA (Grenoble-França). Os experimentos conduzidos em uma cavidade, cuja geometria era metade de um semi-círculo, forneceram base de dados de transferência de calor para números de  $Ra_i$  na faixa de  $10^{15}$  à  $10^{16}$ . Bonnet (1999) apresentaram os resultados experimentais nessa cavidade, cuja razão de aspecto ( $H/R$ ) foi de 1 : 1, a cerca da distribuição da temperatura axial e fluxo de calor ao longo das paredes da piscina contendo água como fluido simulante do material óxido do corium, sendo os primeiros dados obtidos para número de Rayleigh superior à  $10^{16}$  ( $Ra_i \approx 10^{17}$ ).

O programa experimental BALI também avaliou o efeito de concentração do fluxo de calor na camada metálica estratificada, à cima de uma camada de material óxido, em uma cavidade retangular. O fluido simulante também foi água e a cavidade foi aquecida no fundo e refrigerada no topo. Bernaz et al. (1998) apresentaram os resultados da distribuição do fluxo de calor na parede lateral em função da razão de

aspecto, considerando-se o topo tanto adiabático quanto isotérmico, assim como a distribuição radial da temperatura ao longo da distância da superfície adiabática.

Bernaz et al. (2001) estudaram o transporte turbulento de calor para a superfície refrigerada na cavidade retangular do experimento BALI. Diferentes correlações de  $Nu$  em função do número de  $Ra$  para transição entre regimes (denominados de turbulência “macia” e “dura”, e regime assintótico), que ocorrem em convecção do tipo Rayleigh-Bernard foram obtidas, assim como informações a respeito do tamanho das plumas de fluido formadas na parede superior da cavidade e as distâncias características entre elas.

Sehgal et al. (2006) mostraram por meio dos resultados fornecidos pelo experimento EC-FOREVER, conduzido em uma cavidade de formato de uma semiesfera contendo uma mistura de  $CaCO + Ba_2O_3$ , que o resfriamento por uma lacuna com água, em uma piscina completamente preenchida de material de núcleo derretido, torna-se uma estratégia efetiva para reduzir a temperatura da parede do vaso de pressão, caso a quantidade de material seja inferior a 20 toneladas, como observado no TMI.

Dentre os poucos experimentos em cavidade quadrada, além do experimento BALI, um outro experimento que se destaca é o experimento SIGMA RP. Lee et al. (2007) apresentaram resultados desse experimento acerca da influência do efeito do número de Prandtl para  $Ra_i$  variando de  $10^9$  à  $10^{14}$ . Variando-se o  $Pr$  de 4 a 8, diferentes condições de contorno foram analisadas e comportamentos diferentes de transferência de calor foram notados para cada  $Pr$ . No caso de parede superior isotérmica e inferior adiabática, os resultados mostraram baixa dependência de  $Pr$  para os valores de  $Nu$  ao longo da parede do topo ( $\overline{Nu}_{up}$ ), enquanto que para paredes superior e inferior isotérmicas, os valores baixos de  $Pr$  levaram ao aumento na transferência de calor na parede do fundo ( $\overline{Nu}_{dn}$ ).

Lee e Suh (2003) apresentaram resultados do experimento na cavidade semicircular da instalação Mini-Sigma (“Simulation of Internal Gravity-driven Melt Accumulation”), o qual teve por objetivo investigar a distribuição angular do fluxo de calor e temperatura em água demineralizada para  $Ra$  até  $10^{10}$ . Foi obtida uma boa concordância da distribuição de  $Nu$  ao longo da parede superior da cavidade

com os resultados BALI e correlações empíricas e numéricas, respectivamente, geradas pelas análises feitas por Mayinger et al. (1976) e Steinberner e Reineke (1978). Notou-se também que o valor mais baixo do fluxo de calor ocorreu no fundo da cavidade, enquanto que o maior foi verificado no canto superior da mesma.

Sabendo-se que a retenção do núcleo derretido no interior do vaso de pressão é garantida se a carga térmica total do corium for inferior ao fluxo crítico de calor (CHF) na parte externa da parede do vaso, o experimento ULPU-200 teve por finalidade investigar a distribuição do CHF ao longo da parede do fundo de uma cavidade bidimensional em forma de metade da região curva do plenum inferior do reator AP-600 (Sehgal et al., 2003, Theofanous et al., 2002).

O experimento MASCA abordou a determinação da composição e densidade das camadas do corium, o qual forneceu a informação de massa de aço derretido que leva à inversão da densidade do núcleo derretido no plenum inferior (Seiler et al., 2007).

Buck et al. (2010) apresentaram os resultados do experimento LIVE, o qual foi realizado em uma cavidade hemisférica com a parede do fundo isotérmica e a do topo adiabática, contendo como fluidos simulantes a solução não-eutética  $KNO_3 - NaNO_3$  e água. Tais resultados têm sido utilizados para o desenvolvimento e validação de modelos para a descrição do comportamento de uma piscina de material de núcleo derretido. As informações obtidas pelo experimento LIVE abrangiram a evolução da temperatura em diferentes estágios, distribuição do fluxo de calor na parede do vaso tanto em regimes estacionários quanto transientes, assim como o perfil da espessura da crosta formada ao longo da parede do vaso e a composição da mesma.

Muitos experimentos obtiveram dados a respeito da transferência de calor em fluidos com convecção natural gerada por fonte interna de calor. Mesmo que em condições reais a temperatura no corium alcance proporções de  $\approx 3000^\circ C$ , a maioria dos experimentos utilizaram água, ar ou mesmo gases a base de clorofluorcarbonos (como o freon 113), os quais são capazes de reproduzir o comportamento do fluido à elevado número de  $Ra_i$ , sem que a temperatura do material em questão torne-se superior à  $400^\circ C$ , tornando mais acessível a coleta de dados sem a danificação dos equipamentos responsáveis para tal finalidade. Ao longo de quarenta décadas, muitas

correlações empíricas envolvendo números de  $Nu$  e  $Ra_i$  foram obtidas, as quais até hoje são utilizadas em comparação com dados experimentais ou numéricos. As tabelas 2.1 e 2.2 apresentam algumas das principais correlações obtidas em diferentes sistemas com geração interna de calor e que, até atualmente, são utilizadas em análises de validação de resultados numéricos.

Tabela 2.1: Correlações de transferência de calor em camada de fluido e cavidade retangular.

Camada de fluido			
Referência	Correlação	$Pr$	$Ra_i$
Jahn e Reineke (1974)	$Nu_{up} = 0,345Ra_i^{0,233}$ $Nu_{dn} = 1,389Ra_i^{0,095}$	7,0	$6,4 \times 10^4 -$ $3,2 \times 10^4$
Ralf e Roberts (1974)	$Nu_{up} = 0,381Ra_i^{0,25}$	$\approx 6$	$2,3 \times 10^5 -$ $6 \times 10^9$
Kulacki e Nagle (1975)	$Nu_{up} = 0,254Ra_i^{0,25}$	6,21 – 6,64	$1,5 \times 10^5 -$ $2,5 \times 10^9$
Mayinger et al. (1976)	$Nu_{up} = 0,405Ra_i^{0,233}$ $Nu_{dn} = 1,484Ra_i^{0,095}$	$\approx 7$	$4 \times 10^4 -$ $5 \times 10^{10}$
Cavidade retangular			
Referência	Correlação	$Pr$	$Ra_i$
Steinberner e Reineke (1978)	$Nu_{up} = 0,345Ra_i^{0,233}$ $Nu_{dn} = 1,389Ra_i^{0,095}$	$\approx 7,0$	$10^{10} - 10^{13}$ $10^7 - 10^{10}$
Lee et al. (2007)	$Nu_{up} = 0,14Ra_i^{0,263}$ $Nu_{up} = 0,089Ra_i^{0,226}Pr^{0,104}$ $Nu_{dn} = 0,056Ra_i^{0,142}Pr^{-0,191}$	0,7 e 4 – 8	$10^9 - 10^{14}$

Tabela 2.2: Correlações de transferência de calor em cavidade semicircular e semi-esférica.

Cavidade semicircular			
Referência	Correlação	$Pr$	$Ra_i$
Garon e Goldstein (1973)	$Nu_{up} = 0,130Ra_i^{0,293}$	$\approx 6$	$1,3 \times 10^7 - 3,3 \times 10^9$
Jahn e Reineke (1974)	$Nu_{dn} = 0,54Ra_i^{0,18}$	$\approx 7$	$10^7 - 5 \times 10^{11}$
Mayinger et al. (1976)	$Nu_{up} = 0,36Ra_i^{0,23}$ $Nu_{dn} = 0,54Ra_i^{0,18}(H/R)^{0,26}$	$\approx 7$	$10^7 - 5 \times 10^{10}$
Goldstein e Tokuda (1980)	$Nu_{up} = 0,0556Ra_i^{0,333}$	$\approx 6,5$	$10^8 - 2,26 \times 10^{11}$
Bonnet (1999)	$Nu_{up} = 0,383Ra_i^{0,233}$ $Nu_{dn} = 0,116Ra_i^{0,25}(H/R)^{0,32}$	$\approx 7$	$10^{13} - 10^{17}$
Cavidade semi-esférica			
Referência	Correlação	$Pr$	$Ra_i$
Gabor et al. (1980)	$Nu_{dn} = 0,55Ra_i^{0,15}(H/R)^{1,1}$	$\approx 3$	$2 \times 10^{10} - 2 \times 10^{11}$
Frantz e Dhir (1992)	$Nu_{dn} = 0,55Ra_i^{0,2}(H/R)^{0,25}$	$\approx 8$	$10^{10} - 10^{13}$
Asfia e Dhir (1994)	$Nu_{dn} = 0,545Ra_i^{0,2}(H/R)^{0,25}$	$\approx 8$	$10^{11} - 10^{14}$
Asfia e Dhir (1996)	$Nu_{dn} = 0,54Ra_i^{0,2}(H/R)^{0,25}$	$\approx 8$	$10^{11} - 10^{14}$
Theofanous et al. (1997b)	$Nu_{up} = 1,95Ra_i^{0,18}$ $Nu_{dn} = 0,30Ra_i^{0,22}$	$2,6 - 10,8$	$10^{12} - 10^{16}$

Os trabalhos experimentais têm um papel importante para gerar não apenas dados de validação de modelos numéricos de acidente severo, tais como o MELCOR, MAAP, RELAP, ASTEC, mas também para códigos comerciais de fluidodinâmica computacional aplicados no estudo da convecção natural no corium. A próxima seção apresenta uma abordagem a respeito dos modelos de turbulência aplicados para o estudo da convecção natural turbulenta à elevado número de Rayleigh, com ênfase nos modelos RANS investigados nesse trabalho.

## 2.2 Modelos de turbulência

A maioria dos escoamentos de prática em engenharia apresentam característica de regime turbulento, favorecendo dessa forma o grande número de pesquisas sobre turbulência. Na engenharia nuclear, por exemplo, o estudo de escoamentos turbulentos estão relacionados também com a ocorrência de acidente severo, uma vez que após tal cenário, possivelmente o material de núcleo derretido é relocado para o fundo do plenum inferior do vaso de pressão, o qual se encontra à elevadas cargas térmicas, propiciando a ocorrência de escoamentos em regime turbulento.

No caso de convecção natural à elevados números de Rayleigh, as tensões viscosas superam a inércia do fluido e o regime laminar torna-se instável, à altas velocidades e flutuações da pressão, tornando o escoamento tridimensional e não-estacionário (Versteeg e Malalasekera, 2007).

As primeiras tentativas no desenvolvimento de uma descrição numérica das tensões turbulentas partiram da busca por simulações de difusões moleculares, no qual Boussinesq (1877) tornou-se o autor conhecido pela introdução do conceito de viscosidade turbulenta.

Anos depois, Reynolds (1895) publicou os primeiros resultados de sua pesquisa sobre turbulência, apresentando uma abordagem numérica por meio da metodologia de média temporal das equações de Navier-Stokes, processo este, pioneiro e que é também referenciado por médias de Reynolds.

Entretanto, somente no século 20, com as pesquisas de Prandtl (1925) acerca do comprimento de mistura da camada limite, que foi possível uma melhor compreensão

da física associada aos escoamentos viscosos que, juntamente com o conceito de viscosidade turbulenta, formaram uma base para a modelagem da turbulência.

Passados 20 anos, Prandtl (1945) formulou um modelo na qual a viscosidade turbulenta depende da energia cinética das flutuações turbulentas ( $k$ ), levando em consideração que a viscosidade turbulenta é afetada pelo histórico do escoamento. Tal modelo mostrou-se com acurácia para escoamentos sem separação do fluido e com baixos gradientes de pressão. Todavia é considerado um modelo incompleto devido à limitação de determinação empírica dos comprimentos de mistura à cada aplicação do mesmo.

Sabendo-se que a escala de comprimento pode ser definida como o comprimento dos vórtices e que, para cada escoamento diferente, tais escalas são completamente distintas, modelos de turbulência que não contêm tal informação são ditos como incompletos (Wilcox, 2006). Dessa forma, Kolmogorov (1942) apresentou conceitos relacionados à diferentes escalas, variando o comprimento de mistura às menores escalas na qual o efeito de viscosidade se torna notável, assim como o modelo de turbulência no qual um parâmetro adicional à equação para  $k$ , definido como frequência de turbulência ou dissipação da energia cinética turbulenta  $\omega$ , foi introduzido. Todavia, o modelo  $k$ - $\omega$  desenvolvido por Kolmogorov (1942) ficou na obscuridade, devido à complexidade de resolução computacional das equações não-lineares na época.

Trinta anos depois, Launder e Spalding (1972) desenvolveram o modelo  $k$ - $\varepsilon$ , o qual tornou-se o modelo de duas equações mais conhecido e utilizado. Na mesma época, Saffman (1970) formulou o modelo  $k$ - $\omega$ , independentemente da formulação proposta por Kolmogorov (1942), cuja principal característica está no fato das equações serem integradas até mesmo na região interna da sub-camada viscosa, prescrevendo assim os efeitos de gradientes adversos e também o efeito de rugosidade da superfície, diferentemente do modelo  $k$ - $\varepsilon$ .

Tanto o  $k$ - $\varepsilon$  quanto o  $k$ - $\omega$  são exemplos de modelos de duas equações que, como o próprio nome diz, tratam-se de modelos que requerem a solução de duas equações governantes adicionais para o cálculo das contribuições turbulentas para o escoamento médio. No decorrer dos anos, o modelo proposto por Saffman (1970) passou por alterações, conforme abordado por Wilcox (1988), Wilcox (1989) e Wil-

cox (2006). No âmbito das modificações do modelo  $k-\omega$ , encontra-se o modelo SST (Shear Stress Transport) desenvolvido por Menter (1993), o qual combina as vantagens do modelo  $k-\varepsilon$ , em regiões de escoamento distante da parede, e do modelo  $k-\omega$ , aplicado nas regiões próximas à parede. Devido à sua grande aplicabilidade em diversos problemas de engenharia, assim como robustez, o modelo SST tornou-se um dos mais famosos e utilizados modelos de turbulência.

Em muitos casos de turbulência, o tratamento correto de escoamentos próximos à parede é necessário. O modelo  $k-\varepsilon$  de Launder e Spalding (1972), por exemplo, aplica o conceito de funções de parede nas condições de contorno de  $k$  e  $\varepsilon$ , que atuam na região de camada subviscosa, evitando a integração das equações em regiões em que a distância adimensional do primeiro nó da malha ( $y^+$ ) em relação à parede é inferior à 20.

Os modelos que fazem uso de função de parede são comumente referidos de modelos de alto-número de Reynolds. Uma alternativa a tais modelos é a abordagem de baixo-número de Reynolds (LRN - *Low Reynolds Number*) que, apesar do nome, aplica-se a escoamentos a alto número de Reynolds, mas não faz uso de funções de parede, uma vez que as equações governantes de transporte são resolvidas em toda a camada subviscosa, levando-se em consideração os efeitos próximos à parede por meio de funções de amortecimento. Um dos modelos LRN mais utilizados trata-se do modelo Launder-Sharma, o qual leva o nome dos seus desenvolvedores (Launder e Sharma, 1974).

Todavia, de acordo com Durbin (1991) as funções de amortecimento, em geral funções empíricas, são fundamentalmente incorretas pois são calculadas para que o modelo  $k-\varepsilon$  forneça resultados mais próximos aos resultados exatos da viscosidade turbulenta em regiões de  $y^+ \leq 1$ . Tendo-se em mente as limitações dos usuais modelos LRN com funções de amortecimento, Durbin (1991) desenvolveu o modelo elíptico baseado nas equações  $k-\varepsilon$ , denominado de  $k-\varepsilon-\overline{v^2}$ - $f$  (comumente chamado de  $V2$ - $f$ ). Tal modelo apresenta além das equações de transporte para  $k$  e  $\varepsilon$ , uma equação de transporte para  $\overline{v^2}$ , as flutuações normais à parede responsáveis pela transferência de calor turbulento e momentum para o interior do fluido. Há também uma equação elíptica para  $f$ , que leva em consideração os efeitos de restrições cine-

máticas consequentes do bloqueio pela parede, fazendo com que o modelo completo leve em consideração os efeitos anisotrópicos das regiões próximas à parede.

Ao longo de 30 décadas, várias modificações do modelo original proposto por Durbin (1991) foram realizadas com o objetivo de evitar o problema de rigidez numérica causado pelas condições de contorno. Billard e Laurence (2012) apresentaram, por exemplo, um estudo com diferentes implementações do modelo V2-f, em termos de coeficientes e condições de contorno das variáveis envolvidas. As modificações propostas por Lien e Durbin (1996), Lien e Kalitzin (2001) e Davidson et al. (2003), por exemplo, são muito aplicadas por garantirem a condição de contorno de Dirichlet para a variável  $f$  nas paredes, tornando assim o código mais “amigável” e estável numericamente.

Na procura de resultados mais acurados fornecidos pelas centenas de modelos de turbulência já desenvolvidos, modelos de segunda-ordem contendo equações completas para o cálculo das tensões de Reynolds  $\overline{u'_i u'_j}$  e fluxos de calor turbulento  $\overline{\theta u'_i}$  tornaram-se cada vez mais investigados. Nesse contexto, destacam-se os trabalhos realizados por Ince e Launder (1989), os quais mostraram que a formulação isotrópica, também denominada de SGDH (*Simple Gradient Diffusion Hypothesis*), aplicada no cálculo de  $\overline{\theta u'_i}$  não seria a opção mais apropriada para os cálculos de fluxos de calor turbulento e forneceu então a formulação de gradiente generalizado GGDH (*Generalized Gradient Diffusion Hypothesis*) como melhor opção. Alguns anos depois, uma formulação mais completa para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos denominada de AFM (*Algebraic Fluxes Model*) foi apresentada por Kenjereš e Hanjalić (1995), a qual, além de levar em consideração os efeitos anisotrópicos ocasionados pela produção térmica ( $\overline{u'_i u'_j} \partial T / \partial x_j$ ) presente na formulação GGDH, também contém os termos de produção mecânica e de empuxo dos fluxos turbulentos.

É certo que, independente do quão acurado seja o modelo, o mesmo não será capaz de mostrar todos os detalhes do escoamento, visto que, como o próprio nome diz, um modelo trabalha com aproximações, sendo algumas bastante robustas e outras menos. Uma alternativa à aplicação dos modelos de turbulência trata-se de simulações numéricas diretas (DNS), as quais resolvem as equações tridimensionais

e temporais de Navier-stokes e de continuidade sem o uso de qualquer aproximação. Embora forneçam, em princípio, soluções com o mais elevado nível de acuracidade, que em muitos casos são aplicados na validação de algum determinado modelo, o custo computacional de tais simulações é diretamente proporcional à acurácia. A malha de uma simulação DNS deve ser fina o suficiente para capturar os menores vórtices, os quais se encontram nas escalas de Kolmogorov, e o passo de tempo também deve ser reduzido para que a simulação obtenha convergência numérica. Tais características limitam bastante a aplicação de tais simulações em problemas de maior complexidade (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Uma alternativa às simulações numéricas diretas trata-se das simulações de grandes escalas (LES - *Large Eddy Simulation*) que, por sua vez, resolvem os vórtices de grande escala e modelam os de menores, denominados de vórtices de escalas-submalhas SGS (*subgrid-scale*) por meio do uso de filtros. Uma vez que a LES provê a aplicação da modelagem dos menores vórtices, cujos tamanhos podem ser superiores aos do comprimento de Kolmogorov, as malhas e passos de tempo requeridos pela mesma são consideravelmente superiores aos necessários para simulações DNS, favorecendo por consequência um menor esforço computacional. Trabalhos como os desenvolvidos por Ferziger (1996) e Leseieur e Metais (1996) mostram o desempenho de simulações LES para escoamentos com regiões de separação, enquanto que Darioush (2004) apresentou um estudo sobre a aplicação tanto de DNS quanto LES em simulações de convecção natural em camadas limites.

Visto que esse trabalho de tese fez uso de modelos RANS, a próxima seção dará prosseguimento à revisão bibliográfica de trabalhos numéricos sobre convecção natural em cavidades, abordando principalmente aqueles que utilizaram a modelagem de média de Reynolds.

## 2.3 Trabalhos numéricos

Simulações numéricas de convecção natural têm sido o tema de muitas pesquisas de trabalho. É notável o uso do método de simulação de grandes escalas (LES-*Large eddy simulation*), embora observa-se que os modelos de médias de Reynolds

Navier-Stokes também têm destaque no estudo desse problema físico.

O estudo da convecção natural em uma cavidade quadrada com paredes diferencialmente aquecidas contendo fonte interna de calor foi realizado por Acharya e Goldstein (1983), que também levou em consideração a influência da inclinação da cavidade no comportamento do fluido. Em uma faixa de  $Ra_e$  de  $10^3$  a  $10^7$  e um intervalo de  $Ra_i$  de 0 a  $10^7$ , Acharya e Goldstein (1983) concluíram que a transição do regime laminar para turbulento ocorreu quando  $Ra_e$  se encontrou entre  $0,1Ra_i$  ao valor máximo correspondente ao  $Ra_i$  e que a média da taxa de calor ao longo da parede fria aumentou monotonicamente com o aumento do  $Ra_e$ .

Assim como Acharya e Goldstein (1983), outros trabalhos analisaram a interferência da inclinação da cavidade no comportamento da convecção natural, tais como os trabalhos desenvolvidos por Acharya (1983), May (1991), Aounallah et al. (2007) e Rahman e Sharif (2003). É também notável que uma grande quantidade de trabalhos aplicados ao estudo de convecção natural em cavidades com aquecimento diferenciado nas paredes (Fusegi et al., 1992, Le Quéré e Behnia, 1998, Paolucci, 1990, Patterson e Imberger, 1980, Ravi et al., 1994, Shim e Hyun, 1997). Muito deve-se ao fato de tal problema físico ter uma boa aplicação para implementação de modelos numéricos, podendo ser validados por muitos experimentos com mesma condições de contorno já realizados, tais como Lee e Goldstein (1988), Ampofo e Karayiannis (2003) e Saury et al. (2012).

Dinh e Nourgaliev (1997) fizeram uma investigação numérica da transferência de calor por convecção natural em um fluido com fonte volumétrica de calor, com  $Ra_i$  até  $10^{15}$ , utilizando o modelo  $k-\varepsilon$  de baixo número de Reynolds. Correções fenomenológicas foram feitas no número de Prandtl turbulento e viscosidade próxima à parede, levando em conta os efeitos da densidade e temperatura de estratificação no fluido em turbulência.

Devido à presença de diferentes materiais no corium, é difícil saber ao certo o valor de Prandtl do núcleo derretido. Dessa forma, alguns estudos foram realizados a fim de compreender a influência das propriedades do fluido no comportamento da transferência de calor.

Nesse contexto, Nourgaliev et al. (1997) investigaram por meio de simulações

com o modelo de baixo número de Reynolds  $k-\varepsilon$  de Launder e Sharma (Launder e Sharma, 1974) o efeito de vários fluidos com números de Prandtl variando de 0,2 à 7,0, contidos em cavidades com diferentes formatos (retangular, semicircular, semiesférica e elíptica). Nourgaliev et al. (1997) observaram o aumento do número de Nusselt ( $Nu$ ) com o aumento do número de Rayleigh ( $Ra_i$ ) e que, no fundo da cavidade a influência do número de Prandtl ( $Pr$ ) é mais evidente, levando-se em consideração os fenômenos  $\alpha$  (fluidos com menores números de  $Pr$  favorecem a transferência de calor nas paredes do fundo da cavidade em que se encontram, devido à alta condutividade do mesmo e alta difusividade térmica) e  $\nu$  (fluidos com maior número de  $Pr$  apresentam maior resistência ao escoamento descendente às camadas de estratificação, favorecendo uma melhor transferência de calor nas regiões superiores da cavidade em questão).

Horvat et al. (2001) realizaram análises numéricas da convecção natural gerada por fonte volumétrica de calor com o modelo LES, para  $Pr$  iguais a 0.25 e 0.6. A cavidade em questão foi um quadrado com paredes isotérmicas e a faixa de  $Ra_i$  foi de  $10^6$  a  $10^{11}$ . A conclusão obtida foi que o fluido com número de  $Pr$  menor reforçou a transferência de calor na região do fundo da cavidade, enquanto que o fluido de maior  $Pr$  propiciou um aumento na transferência de calor na região próxima ao topo, conforme destacado por Nourgaliev et al. (1997).

Walsh e Leong (2004) estudaram a capacidade de obtenção de resultados acuratos por meio de modelos de turbulência baseados nas equações RANS, tais como  $k-\varepsilon$ , RNG- $k-\varepsilon$  (*Renormalized Group  $k-\varepsilon$* ), assim como a metodologia de tensões de Reynolds (RSM). Os números de Rayleigh utilizados nas simulações variaram de  $10^7$  à  $10^{10}$  e o fluido em questão foi o ar. Todos os resultados obtidos por Walsh e Leong (2004) levaram à constatação que os modelos analisados não apresentaram resultados em concordância com as correlações empíricas utilizadas.

A validação dos modelos  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$  e de Transporte de Tensão de Cisalhamento (SST) foi realizada por Rundle e Lighthstone (2007), por meio de comparação com os resultados experimentais fornecidos por Ampofo e Karayiannis (2003). Aounallah et al. (2007) também investigou os modelos RANS ( $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$  e  $k-\omega$ -SST), além de simulações numéricas diretas em malhas não muito finas, em casos de convecção

natural em cavidades diferentemente aquecidas contendo fluido com  $Pr = 0,71$  e  $Ra_i$  variando de  $1,58 \times 10^9$  à  $10^{12}$ . A conclusão obtida por Aounallah et al. (2007) foi que o modelo  $k-\omega - SST$  superestimou os resultados em relação aos demais modelos analisados, embora tenha sido capaz de reproduzir razoavelmente o escoamento médio e apresentar boa concordância do campo térmico com os dados experimentais obtidos por Ampofo e Karayiannis (2003).

Fukasawa et al. (2008) examinaram modelos de baixo número de Reynolds e o modelo de grandes escalas (LES) por meio de simulações em cavidade similar ao do experimento BALI com diferentes condições de contorno na parede superior. Foi observado que para a condição de contorno de topo adiabático, apenas uma pequena diferença entre os modelos foi notada, além de um escoamento com estratificação mais estável, em comparação com a condição de parede isotérmica.

Tran e Dinh (2009a) e Tran e Dinh (2009b) estudaram o desenvolvimento de um método acurato e simplificado, denominado de Método de Convecção Efetiva (ECM), com a finalidade de prever seguramente as cargas térmicas das estruturas internas do núcleo e do vaso do reator. O já validado modelo ILES (Simulação Implícita de Grandes Escalas) foi utilizado para verificar o método ECM, o qual demonstrou ser capaz de capturar eficientemente a energia de separação em materiais derretidos com fonte volumétrica de calor.

Tanto a análise sobre a influência do número de  $Pr$  e sobre uma adequada aplicação dos métodos da fluido dinâmica computacional foram realizadas por Tran et al. (2010). O modelo utilizado nas análises foi o ILES, o qual forneceu resultados em boa concordância com os resultados experimentais obtidos por Kulacki e Emara (1977).

O modelo V2-f desenvolvido por Durbin (1991) tem sido bastante utilizado em diversos tipos de problema físicos (Durbin, 1993, Laurence et al., 2004, Manceau et al., 2000, Sveningsson, 2003, Thielen et al., 2005, Tsai e Lin, 2000), visto que, diferentemente dos demais modelos de baixo número de Reynolds, como o modelo de Launder-Sharma (Launder e Sharma, 1974), o mesmo leva em consideração a anisotropia próxima à parede, fenômeno bastante notável em problemas de convecção natural. Billard e Laurence (2012) mostrou que o modelo V2-f forneceu uma

melhor predição dos níveis de energia cinética turbulenta nas paredes de um canal diferentemente aquecido, em relação ao modelo SST. Apesar das características do modelo V2-f, que o tornam bastante atraente em relação aos demais modelos RANS, não se encontra a aplicação do mesmo ao problema de convecção natural movida por fonte interna de calor, da mesma forma como se pode encontrar com facilidade para casos de simulação de convecção em paredes diferencialmente aquecidas.

Simulações com fluidos contendo baixos números de Prandtl requerem especial atenção em virtude da necessidade de resolução de escalas muito pequenas de velocidade e grandes escalas no campo de temperatura. Os modelos de turbulência baseados na analogia de Reynolds relacionam a difusividade turbulenta com o número de Prandtl turbulento ( $Pr_t$ ), assumindo difusividades isotrópicas turbulentas tanto nas equações de momento quanto de calor. Todavia, tais modelos consideram uma relação simples entre o gradiente de temperatura e difusividade térmica por meio do  $Pr_t$ , podendo apresentar falhas nos estudos de escoamentos com camadas de estratificação, regiões de anisotropia e com estruturas de grandes vórtices como células de convecção, por exemplo.

Sendo assim, alguns trabalhos foram realizados com o objetivo de estudar a aplicação de modelos algébricos com tratamento direto dos fluxos de calor turbulentos, em vez da utilização de modelos RANS convencionais.

Dol et al. (1997) estudaram a convecção natural turbulenta em um fluido de  $Pr = 0,71$  e  $Ra_e = 5,4 \times 10^5$  contido entre placas diferentemente aquecidas, objetivando calcular os termos da equação de transporte de fluxo de calor turbulento por meio do modelo algébrico  $k-\varepsilon - \theta^2 - \varepsilon_\theta$ . Boudjemadi et al. (1996) e Versteegh e Nieuwstadt (1998) analisaram a convecção natural em canais verticais contendo fluido com  $Pr = 0,71$  e  $Ra_e = 10^5$ , também com o modelo algébrico para o tratamento dos fluxos de calor turbulento.

Hanjalić (2002) investigou três metodologias, RANS, LES e o modelo RANS baseado no tratamento algébrico dos fluxos de calor turbulento, para o estudo da convecção natural de Rayleigh-Bénard, ao longo de paredes verticais aquecidas. Foi observado que o modelo algébrico  $k-\varepsilon - \overline{\theta^2}$ , apesar de ter apresentado maior esforço computacional, reproduziu bem as propriedades médias do escoamento e a trans-

ferência de calor nas paredes e que, os modelos baseados no número de Prandtl turbulento apresentaram falhas mais relevantes.

Otic et al. (2005) também utilizaram o tratamento algébrico dos fluxos de calor turbulento e obtiveram comportamentos do perfil de produção, difusão e dissipação da variação da temperatura similares aos resultados obtidos por Boudjemadi et al. (1996) e Versteegh e Nieuwstadt (1998).

Assim como o modelo de turbulência V2-f, muito se encontra sobre a aplicação dos modelos AFM e GGDH para investigação dos fluxos de calor turbulento em convecção em cavidades com paredes diferencialmente aquecidas (Choi et al., 2004, Kenjereš, 1998, Kenjereš e Hanjalić, 1995), porém não há trabalhos apresentando a performance desses modelos anisotrópicos em convecção com fonte volumétrica de calor, levando-se à originalidade do tema por essa tese.

A conclusão que pode ser tirada por essa revisão bibliográfica é que apesar das limitações apresentadas para o estudo experimental de fluidos sob condições de acidente severo, muitos grupos de pesquisa têm investigado o problema físico de convecção natural, até mesmo para faixas de  $Ra_i$  consideravelmente altas de  $10^{15} - 10^{16}$  e, quanto aos trabalhos numéricos, observou-se que os modelos RANS têm sido bastante utilizados para análises de convecção natural turbulenta, destacando-se a aplicação do modelo de baixo número de Reynolds  $k-\varepsilon$  e SST.

# Capítulo 3

## Metodologia

Esse capítulo apresenta as equações que governam o problema físico de convecção natural, assim como a metodologia utilizada no OpenFOAM para obtenção dos resultados, os quais são discutidos no capítulo seguinte. Também são abordadas as formulações dos modelos de turbulência utilizados nas simulações, assim como os métodos numéricos aplicados para nas análises realizadas.

### 3.1 Equações governantes

De forma geral, as equações que governam o estudo da convecção natural são as equações de conservação de massa, Navier-Stokes e conservação de energia. As equações de Navier-Stokes podem ser resolvidas na sua forma tridimensional transiente tanto para regime laminar quanto turbulento (DNS). A próxima subseção apresenta tais equações para fluido incompressível com aplicação do modelo de Boussinesq para o tratamento de empuxo das equações de momentum.

#### 3.1.1 Equações de Navier-Stokes tridimensionais com fluido incompressível

As equações de conservação de massa, momentum e energia podem ser escritas, respectivamente, na seguinte forma,

- Equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0, \quad (3.1)$$

- Equações de Navier-Stokes

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \mathbf{S}_M, \quad (3.2)$$

sendo  $\delta$  o tensor identidade,

$$\delta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

O termo de empuxo presente na equação do momento (3.2) é definido por,

$$\mathbf{S}_M = (\rho - \rho_{ref})g_i. \quad (3.3)$$

- Equação da Energia Térmica

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \alpha \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + q_v \quad (3.4)$$

sendo  $\alpha$  a difusividade térmica,  $q_v$  a fonte interna de calor ( $\frac{q}{\rho c_p}$ ) e  $c_p$  o calor específico à pressão constante.

As Equações 3.1, 3.2 e 3.4 tratam da notação vetorial das equações governantes aplicadas à fluido incompressível. O tratamento do termo de empuxo das equações de momentum pode, por sua vez, ser simplificado por meio da consideração do modelo de Boussinesq.

O modelo de Boussinesq considera que a massa específica do fluido é constante em todos os termos das equações de transporte em que está envolvida, exceto no termo de empuxo. Tal modelo possui viável aplicação quando a variação da massa específica é regida apenas por pequenas variações de temperatura, fato observado no

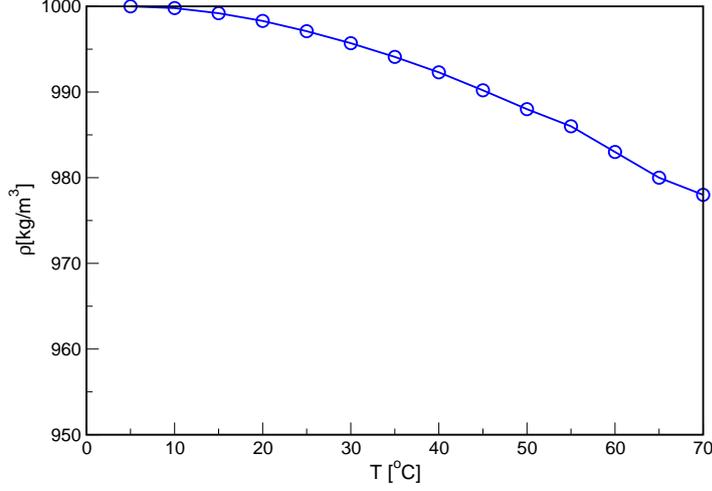


Figura 3.1: Variação da densidade da água em função da variação da temperatura ocorrida no experimento BALI.

experimento BALI (em CEA, Grenoble-França)(Bonnet, 1999). A figura 3.1 mostra a variação quase linear da densidade em função da temperatura, obtidos com os dados fornecidos pelo experimento BALI.

De acordo com o modelo de Boussinesq, o termo de fonte de empuxo é aproximado da seguinte forma,

$$\mathbf{S}_M = (\rho - \rho_{ref})\mathbf{g}_i \approx -\rho_{ref}\beta(T - T_{ref})\mathbf{g}_i, \quad (3.5)$$

sendo  $T_{ref}$  a temperatura de referência do empuxo e  $\beta$  a expansividade térmica definida por,

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_p, \quad (3.6)$$

Sendo assim, as Equações (3.1), (3.2) e (3.4), na notação cartesiana, tornam-se respectivamente,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.7)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (3.8)$$

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z}\right) = \mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial p}{\partial y} - \rho g \quad (3.9)$$

$$\rho\left(\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z}\right) = \mu\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial p}{\partial z} \quad (3.10)$$

$$\rho c_p\left(\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} + v\frac{\partial T}{\partial y} + w\frac{\partial T}{\partial z}\right) = \lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) + q_v \quad (3.11)$$

sendo  $t$  o tempo,  $p$  a pressão,  $T$  a temperatura,  $\rho$  a massa específica e  $\lambda$  a condutividade térmica.

A pressão total é resultante da soma da pressão estática ( $p_0$ ) e a pressão dinâmica ( $p_d$ ), conforme mostrado na equação (3.12).

$$p = p_0 + p_d, \quad (3.12)$$

na qual a pressão estática é definida por  $-\rho_0 gy$  (em que  $\rho_0$  trata-se da massa específica constante do fluido utilizada no modelo de Boussinesq) .

As formas derivadas da Equação acima, em relação às direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , são respectivamente descritas por,

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p_d}{\partial x}, \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = -\rho_0 g + \frac{\partial p_d}{\partial y}, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial p_d}{\partial z}, \quad (3.15)$$

Após a substituição das equações (3.13), (3.14) e (3.15) nas equações (3.41), (3.42) e (3.10) obtém-se respectivamente ,

$$\rho_0\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z}\right) = \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial p_d}{\partial x}. \quad (3.16)$$

$$\rho_o \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial p_d}{\partial y} - (\rho - \rho_o)g, \quad (3.17)$$

$$\rho_o \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial p_d}{\partial z}. \quad (3.18)$$

Utilizando-se a definição de  $\beta$  descrita pela Equação 3.39, a Equação 3.17 torna-se,

$$\rho_o \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial p_d}{\partial y} + \rho_o \beta (T - T_0)g. \quad (3.19)$$

As formas adimensionais das Equações (3.40), (3.16), (3.19), (3.18) são descritas respectivamente por,

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} + \frac{\partial W}{\partial Z} = 0, \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} + W \frac{\partial U}{\partial Z} = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial X}, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} + W \frac{\partial V}{\partial Z} = \left( \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{Ra_i}{Pr} \theta, \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial W}{\partial \tau} + U \frac{\partial W}{\partial X} + V \frac{\partial W}{\partial Y} + W \frac{\partial W}{\partial Z} = \left( \frac{\partial^2 W}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial Z}, \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} + U \frac{\partial \Psi}{\partial X} + V \frac{\partial \Psi}{\partial Y} + W \frac{\partial \Psi}{\partial Z} = \frac{1}{Pr} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Z^2} \right) + \frac{1}{Pr}. \quad (3.24)$$

sendo as variáveis adimensionais definidas por,

$$X = \frac{x}{H} \quad Y = \frac{y}{H} \quad Z = \frac{z}{H}$$

$$\begin{aligned}
U &= \frac{u}{(\nu/H)} & V &= \frac{v}{(\nu/H)} & W &= \frac{w}{(\nu/H)} \\
\tau &= \frac{t}{(H^2/\nu)} & P &= \frac{p_d}{\rho(\nu/H)^2} \\
\Psi &= \frac{T - T_0}{q_v H^2/k}
\end{aligned}$$

Em caso de simulação de regime turbulento, as equações acima são resolvidas por meio da aplicação de modelos de turbulência, ocasionando o surgimento de novos termos que são modelados numericamente. A próxima seção fornece uma abordagem geral dos modelos de turbulência baseados na metodologia de média de Reynolds, que foram utilizados nesse trabalho de tese.

## 3.2 As equações de médias de Reynolds - RANS

Ainda no século *XIX*, Osborne Reynolds (1842 – 1912) constatou que os fenômenos turbulentos eram extremamente complexos para serem tratados de forma detalhada e propôs a decomposição dos parâmetros que caracterizam o escoamento (como velocidade, pressão e temperatura) em componentes "médias" e "flutuantes ou estocásticos". Dessa forma, o campo da velocidade instantâneo turbulento  $\mathbf{u}(x, t)$  foi descrito por,

$$\mathbf{u}(x, t) = \bar{\mathbf{u}}(x) + \mathbf{u}'(x, t), \quad (3.25)$$

sendo,  $\bar{\mathbf{u}}(x)$  a velocidade média (estatisticamente estacionária) e  $\mathbf{u}'(x, t)$  a componente flutuante.

O motivo de tal decomposição é possibilitar o tratamento de propriedades bem comportadas do escoamento turbulento (componentes médias) e de contribuições flutuantes de caráter complexo, as quais são tratadas separadamente. É justamente essa parte flutuante que carrega toda a dinâmica do escoamento turbulento, em virtude da sua dependência temporal e que por sua vez é responsável pela modelagem das flutuações características de escoamentos turbulentos.

O componente médio da decomposição é definido por,

$$\bar{\mathbf{u}}(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \mathbf{u}(x, t) dt, \quad (3.26)$$

em que  $T$ , nesse caso, é o intervalo de tempo suficientemente longo para que a média seja representativa do comportamento estacionário do escoamento. Dessa forma, tomando a média temporal da decomposição (3.25), e sabendo que a média da média é a própria média ( $\overline{\overline{u(x)}} = \overline{u(x)}$ ), tem-se que,

$$\overline{u'}(x, t) = 0. \quad (3.27)$$

O mesmo se aplica para os demais parâmetros, como pressão e temperatura.

O caso de interesse desse trabalho trata-se da representação dos escoamentos de fluidos incompressíveis por meio das equações de Navier-Stokes. Sendo assim, o objetivo é obter soluções médias bem comportadas e aplicar o tratamento adequado dos termos de flutuação.

Sabendo que o escoamento incompressível de um fluido viscoso e newtoniano é completamente descrito pela equação da continuidade,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.28)$$

e pelas equações de Navier-Stokes,

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho \beta (T - T_0) g \quad (3.29)$$

onde  $\sigma_{ij}$  representa o tensor de tensões decorrente da soma da pressão e viscosidade, e é definido por,

$$\sigma_{ij} = -\frac{p}{\rho} \delta_{ij} + \nu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.30)$$

Tomando a média da equação da continuidade tem-se,

$$\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} = 0 \quad (3.31)$$

Do mesmo modo, a componente flutuante equivale a zero, conforme a seguinte equação,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial (\overline{u_i} + u'_i)}{\partial x_i} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.32)$$

Tomando a média das equações de Navier-Stokes têm-se,

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j}. \quad (3.33)$$

Sabendo que o primeiro termo da equação acima é nulo, visto que a média é tomada em um intervalo de tempo relativamente longo, e considerando a decomposição da velocidade tem-se,

$$\frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [(\overline{u_i} + u'_i)(\overline{u_j} + u'_j)] = \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{u_i u_j} + \overline{u_i u'_j} + \overline{u'_i u_j} + \overline{u'_i u'_j}]. \quad (3.34)$$

Aplicando a média temporal da equação 3.34 tem-se,

$$\frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\overline{u_i u_j}} + \overline{\overline{u_i u'_j}} + \overline{\overline{u'_i u_j}} + \overline{\overline{u'_i u'_j}}]. \quad (3.35)$$

A equação 3.35 apresenta os quatro termos de correlação temporal. Sabendo que a média temporal das flutuações é zero, que a componente  $\overline{u_i}(x)$  é estatisticamente estacionária e que o termo  $\overline{u'_i u'_j}$  não é nulo pois tanto  $u'_i$  quanto  $u'_j$  possuem dependência temporal, a equação 3.35 pode ser reescrita por,

$$\frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\overline{u_i u_j}} + \overline{\overline{u'_i u'_j}}]. \quad (3.36)$$

Ao utilizar a definição proposta pela equação 3.25 no termo de empuxo obtém-se,

$$\rho \beta g (\overline{T} + \theta - T_0), \quad (3.37)$$

sendo  $\theta$  as flutuações da temperatura.

Tomando-se a média do termo de empuxo tem-se então,

$$\rho \beta g (\overline{T} - T_0). \quad (3.38)$$

Substituindo a equação 3.36 na equação 3.33 (sem o termo transiente) obtém-se as equações médias de Reynolds Navier-Stokes (RANS),

$$\overline{u_j} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\sigma_{ij}} + \overline{u'_i u'_j}] + \rho \beta g (\overline{T} - T_0). \quad (3.39)$$

A equação 3.39 pode ser rescrita para cada um dos componentes da velocidade, conforme mostram as equações 3.40, 3.41 e 3.42, considerando um escoamento incompressível e tridimensional.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \left[ \frac{\partial \overline{u'^2}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z} \right], \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \left[ \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z} \right] + \rho \beta g (T - T_0), \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \left[ \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} \right]. \quad (3.42)$$

Aplicando o conceito de decomposição de Reynolds na equação da energia, obtém-se a seguinte equação de energia,

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\nu}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \overline{\theta u'_i} \right), \quad (3.43)$$

sendo  $\theta$  o componente flutuante da temperatura e  $u_i$  as flutuações da velocidade.

O termo  $\overline{u'_i u'_j}$  é denominado de tensões turbulentas ou tensões de Reynolds e representa os fluxos de quantidade de movimento que atuam como tensões adicionais no escoamento. Tal termo é tratado separadamente do campo médio, por meio de diferentes modelos de turbulência que seguem a metodologia RANS. As seguintes subseções apresentam os diferentes modelos RANS que foram utilizados nesse trabalho para o cálculo de  $\overline{u'_i u'_j}$ . O termo  $\overline{\theta u'_i}$  refere-se aos fluxos turbulentos de calor e também precisa ser calculado a fim de fechar o sistema de equações governantes. Mais adiante serão apresentados três diferentes meios de tratamento para tais fluxos.

### 3.2.1 As equações do modelo k- $\varepsilon$

O modelo k- $\varepsilon$  é baseado na metodologia de equações de médias de Reynolds. Tal modelo envolve duas equações diferenciais de transporte, a energia cinética turbulenta (k) e de transporte da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de massa ( $\varepsilon$ ).

O modelo desenvolvido por Launder e Spalding (1972, 1974) é o modelo reconhecido na literatura pelo modelo k- $\epsilon$  padrão, em que a equação exata de transporte de k é obtida diretamente das equações de Navier-Stokes. A equação exata para o transporte de k é definida por,

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\bar{p}}{\rho} u'_j + \frac{1}{2} \overline{k u'_j} - \nu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\nu \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)^2}. \quad (3.44)$$

Os primeiros termos do lado esquerdo da equação 3.44 representam, respectivamente, a taxa de variação local da energia cinética local e o termo convectivo. O terceiro termo da equação está relacionado com o transporte difusivo turbulento decorrente das flutuações no campo de pressão, enquanto o quarto termo representa transporte difusivo da velocidade. O quinto termo da equação pode ser definido conforme à hipótese de Boussinesq, em que a difusividade de qualquer propriedade escalar é proporcional à difusividade da quantidade de movimento, segundo a seguinte expressão,

$$\nu \frac{\partial k}{\partial x_j} = \Gamma_t \frac{\partial k}{\partial x_j}, \quad (3.45)$$

sendo,  $\gamma_t$  a difusividade turbulenta.

Considerando a analogia de Reynolds, a difusividade turbulenta é relacionada com a viscosidade turbulenta, por meio do número de Prandtl turbulento ( $Pr_t$ ), conforme a seguinte equação,

$$Pr_t = \frac{\nu_t}{\Gamma_t}. \quad (3.46)$$

O sexto termo da equação 3.44 é comumente denominado termo de produção e representa a taxa de transferência de energia do escoamento médio para o campo turbulento, em que o tensor de tensões de Reynolds  $\overline{u'_i u'_j}$  é determinado aplicando-se a hipótese de Boussinesq, em que,

$$-\overline{u'_i u'_j} = \nu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}. \quad (3.47)$$

O último termo da equação 3.44 descreve a transformação da energia cinética em energia interna nas pequenas escalas turbulentas, e que está relacionado com a taxa de dissipação viscosa de  $k$ , isto é,

$$\varepsilon = \nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j}\right)^2}. \quad (3.48)$$

Os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  estão relacionados com as escalas do vetor velocidade  $\mathbf{U}$  e uma escala característica de comprimento  $l_\mu$ , conforme mostram as seguintes expressões,

$$\mathbf{U} = k^{1/2} \quad \text{e} \quad l_\mu = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$$

Sabendo que a viscosidade turbulenta é descrita em função da energia cinética turbulenta, conforme proposto por Prandtl (1945) e descrito na equação 3.49, obtém-se a relação da viscosidade turbulenta para o modelo  $k$ - $\varepsilon$ , definido na equação 3.50.

$$\nu_t = C_\mu l_\mu k^{1/2}, \quad (3.49)$$

onde,  $C_\mu$  representa uma constante adimensional empírica.

Substituindo  $l_\mu$  pela definição da escala característica de comprimento  $((k^{3/2})/\varepsilon)$ , a Equação 3.49 pode ser reescrita por,

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (3.50)$$

Dessa forma, aplicando todas as hipóteses, a formulação padrão do modelo  $k$ - $\varepsilon$  para altos números de Reynolds é dada por,

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{Pr_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_i} \right] + \left[ \nu_t \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \right] - \varepsilon \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \kappa \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} \left[ \nu_t \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \right] \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (3.52)$$

Os valores  $Pr_\kappa$ ,  $C_\mu$ ,  $Pr_\varepsilon$ ,  $C_{\varepsilon 1}$  e  $C_{\varepsilon 2}$  são determinados por meio de correlações empíricas e são iguais a,

$$C_\mu = 0,09 \quad Pr_\kappa = 1,00 \quad Pr_\varepsilon = 1,30 \quad C_{\varepsilon_1} = 1,44 \quad C_{\varepsilon_2} = 1,92$$

### 3.2.2 As equações do modelo SST

Assim como o modelo k- $\varepsilon$ , o modelo de turbulência SST também é baseado nas equações RANS (Wilcox, 2006), cujas equações de energia e de frequência turbulenta são descritas conforme mostrado nas equações abaixo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \nu_t \left( \frac{1}{F_1^{-1} \sigma_{k1}} + \frac{1}{(1-F_1)^{-1} \sigma_{k2}} \right) \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \\ + P_k \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \beta_k k \omega, \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \nu_t \left( \frac{1}{F_1^{-1} \sigma_{\omega 1}} + \frac{1}{(1-F_1)^{-1} \sigma_{\omega 2}} \right) \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ + (1-F_1) \frac{2}{\sigma_{\omega 2} \omega} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) - [F_1 \beta_{\omega 1} + (1-F_1) \beta_{\omega 2}] \omega^2 \\ + [F_1 \alpha_1 + (1-F_1) \alpha_2] \frac{\omega}{k} P_k, \end{aligned} \quad (3.54)$$

sendo,

$$P_k = \nu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij}. \quad (3.55)$$

As constantes presentes nas equações 3.53 e 3.54 assumem os seguintes valores

$$\alpha_1 = 2 \quad \alpha_2 = 1 \quad \alpha_{\omega 1} = 2 \quad \alpha_{\omega 2} = 1/0,856$$

$$\beta_k = 9/100 \quad \beta_{\omega 2} = 0,0828$$

A viscosidade turbulenta  $\nu_t$  é definida como,

$$\nu_t = \frac{\alpha k}{\max(\alpha\omega, SF_2)}, \quad (3.56)$$

onde  $S$  é uma medida invariante da taxa de deformação.

As funções de mistura,  $F_1$  e  $F_2$ , são fundamentais para a viabilidade do método e são baseadas na distância da superfície e nas variáveis de escoamento. Ambas funções são similares.

$$F_1 = \tanh(arg^4), \quad (3.57)$$

onde,

$$arg = \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{k}}{\beta_k \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho k}{CD_\omega \sigma_\omega y^2} \right], \quad (3.58)$$

e

$$CD_\omega = \max \left[ 2\rho \frac{1}{\sigma_\omega y} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right]. \quad (3.59)$$

O modelo de turbulência SST é uma modificação do modelo Baseline  $k-\omega$  na literatura. A concepção do modelo SST permite um adequado transporte das tensões cisalhantes resultando assim, em previsões acuradas da separação sob condições de gradiente de pressões adverso (Wilcox, 2006).

### 3.2.3 Modelo de baixo número de Reynolds - Launder-Sharma (Launder e Sharma, 1974)

O modelo proposto por Launder e Sharma (1974) (aqui denominado modelo Launder-Sharma) é um dos mais antigos e utilizados modelos de baixo número de Reynolds (LRN). Tal modelo já mostrou uma ótima aplicação em problemas de escoamentos turbulentos, com boa concordância com simulações DNS e dados experimentais.

Assim como os demais modelos LRN, o modelo de Launder e Sharma (1974) apresenta funções de amortecimento que são aplicadas nas regiões de camada sub-viscosa, em que a distância adimensional do primeiro nó em relação à parede  $y^+$  se

encontra inferior à 1. Tal modelo também contém termos fontes extras que são ativados apenas próximo à parede, tornando assim possível a integração das equações de  $k$  e  $\varepsilon$  no interior da subcamada viscosa.

As equações de transporte da energia cinética turbulenta e dissipação da energia cinética turbulenta são definidas pelas seguintes equações,

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ k u_j - \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \left( \nu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \varepsilon - 2\nu \left( \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial y} \right)^2 \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \varepsilon u_j - \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] &= \left( C_{\varepsilon 1} f_1 \left( \nu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} f_2 \varepsilon \right) \frac{\varepsilon}{k} \\ &\quad - 2\nu \nu_t \left( \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (3.61)$$

O cálculo da viscosidade turbulenta é dado pela equação abaixo,

$$\nu_t = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.62)$$

Os valores das constantes e funções apresentadas nos modelos se encontram na tabela 3.1

Tabela 3.1: Constantes e funções de amortecimento do modelo proposto por Launder e Sharma (1974).

$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$f_\mu$
1,44	1,92	0,09	1,0	1,0	$\exp \left( \frac{-3,4}{(1+Re_t/50)} \right)$

### 3.2.4 Modelo de baixo número de Reynolds - V2-f

O modelo  $\overline{v^2}$ -f (comumente denominado de V2-f) é um tipo de modelo LRN, porém diferentemente do modelo Launder-Sharma, o mesmo não faz uso de funções de amortecimento, levando em consideração os efeitos de anisotropia no cálculo da viscosidade turbulenta, por meio da utilização das flutuações da velocidade normais à linhas de escoamento ( $\overline{v^2}$ ), conforme a equação 3.63. Os efeitos de anisotropia são

modelados pela função de relaxação  $f$ , a qual é tratada por uma equação elíptica de acordo com a equação 3.67.

$$\nu_t = \min \left[ C_{\mu, k\varepsilon} \frac{k^2}{\varepsilon}, C_{\mu} \overline{v^2} \tau \right]. \quad (3.63)$$

As equações de transporte do modelo são dadas pelas equações 3.64, 3.65 e 3.66.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{U}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k + G_b - \frac{k}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right], \quad (3.64)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{U}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{C_{\varepsilon 1}(P_k + G_b)}{\tau} - \frac{C_{\varepsilon 2}\varepsilon}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right], \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{v^2}}{\partial t} + \overline{U}_j \frac{\partial \overline{v^2}}{\partial x_j} = \min \left[ kf, -\frac{1}{\tau} \left( (C_1 - 6)\overline{v^2} - \frac{2}{3}k(C_1 - 1) \right) \right] \\ - \frac{6\overline{v^2}}{\tau} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_{v^2}} \right) \frac{\partial \overline{v^2}}{\partial x_j} \right], \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j^2} = \frac{f}{L^2} - \frac{1}{L^2 \tau} \left[ (C_1 - 6.0) \frac{\overline{v^2}}{k} - (C_1 - 1) \frac{2}{3} \right] - \frac{C_2(P_k + G_b)}{k}. \quad (3.67)$$

Os termos de produção mecânica ( $P_k$ ) e de empuxo ( $G_b$ ) da energia cinética turbulenta são definidos por,

$$P_k = \overline{u_i u_j} (\partial U_i / \partial x_j), \quad (3.68)$$

$$G_b = -\beta g_i (\nu_t / Pr_t) (\partial T / \partial x_j). \quad (3.69)$$

Visto que a versão do OpenFOAM utilizada para as simulações deste trabalho, versão 1.7.1, não contém o modelo V2-f na biblioteca de modelos de turbulência, o mesmo teve que ser implementado e validado (a validação do modelo é discutida no Capítulo 4). A implementação do modelo V2-f seguiu a modificação proposta por Davidson et al. (2003), por duas razões: evitar que a viscosidade turbulenta não obtivesse valores muito altos em regiões onde a variável  $\overline{v^2}$  é equivalente a  $2k/3$  e,

garantir que em regiões longe da parede, os valores não fossem muito superiores à  $2k/3$ .

Também faz-se uso dos limites das variáveis de Kolmogorov nas escalas de tempo e de comprimento, a fim de evitar singularidade nas equações governantes em regiões próximas à parede. Os limites aqui utilizados foram implementados de forma que fosse ativados nas regiões em que os valores de  $y^+$  são inferiores à 30, conforme mostrado pelas equações (3.70) and (3.71),

$$\tau = \max \left[ \frac{k}{\varepsilon}, \text{pos}(30 - y^*) 6 \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \right], \quad (3.70)$$

$$L = C_L \max \left[ \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \text{pos}(30 - y^*) C_\eta \left( \frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \right], \quad (3.71)$$

sendo, *pos* a parte positiva de  $(30 - y^*)$  e  $y^*$  calculado de acordo com a seguinte equação,

$$y^* = \frac{C_{\mu, k\varepsilon}^{1/4} k^{1/2} y_n}{\nu}, \quad (3.72)$$

sendo  $y_n$  a distância do primeiro nó em relação à parede.

Os coeficientes utilizados nas equações 3.63 à 3.67 são dados por,

$$C_\mu = 0,22, \quad C_{\mu, k\varepsilon} = 0,09, \quad C_{\varepsilon 2} = 1,90,$$

$$C_{\varepsilon 1} = 1,40(1 + 0,05 \min(k^{1/2}/\bar{v}^2, 10, 0)),$$

$$C_1 = 1,40, \quad C_2 = 0,30, \quad C_L = 0,23, \quad C_\eta = 70,0,$$

$$\sigma_k = \sigma_{\bar{v}^2} = 1,0, \quad \sigma_\varepsilon = 1,3.$$

Em relação às condições de contorno, a condição de Dirichlet foi utilizada para as variáveis  $k$ ,  $u_i$ ,  $\bar{v}^2$  e  $f$  em todas as paredes. A condição de contorno do  $\varepsilon$  foi calculada por meio dos valores de  $\nu$  e  $k$  no primeiro nó distante da parede e de  $y_n$ , de acordo com a seguinte expressão,

$$\varepsilon = -2\nu_1 \frac{k_1}{y_n}$$

### 3.2.5 Abordagens de tratamento dos fluxos turbulentos de calor $\overline{\theta u'_j}$

Assim como as tensões de Reynolds ( $\overline{u'_i u'_j}$ ), os fluxos de calor turbulentos também precisam ser calculados para que o sistema de equações RANS seja completamente resolvido. As equações (3.73), (3.74) e (3.75) mostram diferentes maneiras de calcular os fluxos turbulentos de calor.

- SGDH (*Simple Gradient Diffusion Hypothesis*):

$$\overline{\theta u'_i} = -\frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (3.73)$$

- GGDH (*General Gradient Diffusion Hypothesis*):

$$\overline{\theta u'_i} = -C_\theta \frac{k}{\varepsilon} (\zeta \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial T}{\partial x_j}), \quad (3.74)$$

- AFM (*Algebraic Flux Model*):

$$\overline{\theta u'_i} = -C_\theta \frac{k}{\varepsilon} \left( \underbrace{\zeta \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial T}{\partial x_j}}_{P_{th}} + \underbrace{\xi \overline{\theta u'_i} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}}_{P_m} + \eta \underbrace{\beta g_i \overline{\theta^2}}_{G_{\theta i}} \right). \quad (3.75)$$

A abordagem mais simples e também mais utilizada em diferentes problemas de engenharia trata-se da SGDH, comumente referida por analogia de Reynolds. Tratando-se de uma abordagem isotrópica, o SGDH calcula os fluxos de calor turbulentos levando-se em consideração o número de Prandtl turbulento (Hanjalić, 2002). Em problemas de convecção natural gerada por aquecimento diferenciado, tal modelo pode apresentar diversas deficiências, tal como o fato da principal fonte de empuxo de energia cinética turbulenta estar associada ao componente vertical do fluxo de calor ( $\beta g \overline{\theta u'_j}$ ) e por ser isotrópico, tal modelo desprezar o gradiente médio da temperatura na direção vertical.

O modelo GGDH, proposto por Daly e Harlow (1970) e Ince e Launder (1989), é a forma mais simples de cálculo anisotrópico dos fluxos de calor turbulento, o qual leva em consideração os gradientes de temperatura perpendiculares ao vetor gravidade. A formulação AFM, introduzida por Kenjereš e Hanjalić (1995) é uma proposta de simples implementação, uma vez que não requer soluções de equações

de transporte para cada componente do fluxo turbulento, mas ainda captura os processos físicos mais importantes, tais quais a produção mecânica ( $P_m$ ), térmica ( $P_{th}$ ) e de empuxo ( $G_{\theta i}$ ) dos fluxos turbulentos de calor.

Na literatura muito se encontra sobre a aplicação dos modelos anisotrópicos GGDH e AFM para a análise de convecção natural em cavidades com paredes diferentemente aquecidas, porém não há trabalhos sobre tais modelos em análises de convecção natural com fonte volumétrica de calor. Tal observação foi mais uma motivação para o estudo desses dois modelos anisotrópicos durante a realização da tese.

Os programas comerciais de CFD como os da ANSYS (CFX e FLUENT, por exemplo) não contém essas abordagens anisotrópicas para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos e um dos motivos deve-se ao fato de que os coeficientes das equações GGDH e AFM (equações (3.74) e (3.75)) não serem universais para todos os modelos de turbulência, isto é, dependendo do modelo de turbulência utilizado juntamente com o modelo GGDH ou AFM, a solução apresenta diferentes comportamentos, requerendo dessa forma uma validação de tais coeficientes para cada modelo de turbulência existente. Havendo centenas de modelos de turbulência, tal prática torna-se então inviável.

Assim como os pacotes comerciais de CFD, o OpenFOAM contém somente a abordagem isotrópica (SGDH) para o cálculo dos fluxos turbulentos de calor. Dessa forma, as abordagens anisotrópicas GGDH e AFM foram implementadas em solvers aplicados a escoamentos com empuxo, os quais foram respectivamente denominados de *buoyantBoussinesqGGDH* e *buoyantBoussinesqAFM*.

O modelo AFM, implementado por esse trabalho de tese e validado por meio de simulações em uma cavidade retangular com aquecimento diferenciado nas paredes verticais, foi baseado no modelo proposto por Kenjereš (1998). A fim de fechar os cálculos do fluxo turbulento de calor, calculou-se a variância de temperatura  $\overline{\theta^2}$  por meio da seguinte equação de transporte:

$$\frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial t} + U_j \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x_j} = -2\overline{\theta u'_j} \frac{\partial T}{\partial x_j} - 2\varepsilon_\theta + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_{\overline{\theta^2}}} \frac{\partial \overline{\theta^2}}{\partial x_j} \right) \right], \quad (3.76)$$

em que,  $\sigma_{\overline{\theta^2}} = 1.0$  e a taxa de dissipação da variância de temperatura,  $\varepsilon_\theta$ , foi calculada de acordo com a equação 3.77,

$$\varepsilon_\theta = \frac{\overline{\varepsilon\theta^2}}{2Rk}. \quad (3.77)$$

A razão de escala de tempo térmica para mecânica (R) foi assumida como constante e igual a 0,5, mesma consideração feita por Kenjereš et al. (2005) e Kenjereš (1998).

### 3.3 Métodos numéricos no OpenFOAM

Como já citado anteriormente, todas as simulações apresentadas por esta tese foram realizadas no programa de CFD, OpenFOAM 1.7.1. O motivo da escolha do OpenFOAM em relação aos programas comerciais de CFD, deve-se ao fato do mesmo ser um código aberto, permitindo ao usuário livre acesso à cada linha do código, dando-lhe possibilidade de modificação e implementação de novas equações. Visto que essa tese teve por finalidade um estudo mais profundo de alguns modelos de turbulência, envolvendo implementação de novos modelos, condições de contorno e modificação de equações de transporte, o OpenFOAM mostrou-se então bastante adequado para a realização desse trabalho.

De forma geral, os passos para uma simulação numérica envolvem desde definição do domínio de interesse até a resolução das equações diferenciais do problema em questão.

A geração da geometria e malha trata-se da primeira etapa e uma das mais importantes, visto que cerca de 80% do sucesso da simulação pode estar relacionado com a boa qualidade da malha. Esse trabalho utilizou a utilidade de geração de malha do OpenFOAM, denominada de *blockMesh* para a construção das cavidades quadradas e do canal de escoamento (utilizado nos casos de validação do modelo V2-f). Nesse caso, tanto a geometria quanto a malha foram definidas no arquivo *blockMeshDict*, o qual está presente no subdiretório *constant*, presente no diretório do caso a ser simulado. As geometrias BALI (1/4 de círculo) e hemisférica foram geradas no programa comercial da ANSYS, ICEM 12.0. Por meio do utilitário *fluentMeshToFoam*, as malhas (no formato *.msh*) foram convertidas para o formato foam, o qual é reconhecido pelo OpenFOAM.

A etapa seguinte à geração de malha trata-se da definição dos métodos de discretização das equações governantes em todo o domínio, assim como as variáveis de controle da simulação. No diretório do caso de simulação, encontra-se o subdiretório *system*, que contém três arquivos: *controlDict* - local onde os dados de início e término da simulação são definidos, assim como o passo de tempo; *fvSchemes* - arquivo onde são definidos os esquemas de discretização das equações; e *fvSolution* - arquivo que contém os solvers, tolerâncias e algoritmos para resolução das equações.

Os resultados das simulações foram obtidas no centro das células e interpolados para as faces por meio da integração de Gauss. Em relação aos solvers lineares, o OpenFOAM apresenta uma lista dos seguintes solvers para a resolução das matrizes de equações:

- PBiCG - *preconditioned bi-conjugate gradient solver for asymmetric matrices*;
- PCG - *preconditioned conjugate gradient solver for symmetric matrices*;
- GAMG - *generalised geometric-algebraic multi-grid solver*;
- smoothSolver - *solver using a smoother for both symmetric and asymmetric matrices*;
- diagonalSolver - *diagonal solver for both symmetric and asymmetric matrices*.

A taxa na qual cada método iterativo converge depende altamente do espectro da matriz de coeficientes de cada equação. Dessa forma, cada método geralmente envolve uma segunda matriz que transforma os coeficientes da matriz principal em um outra com um melhor espectro. Essa matriz de transformação é denominada de condicionador. A função dos condicionadores é melhorar a taxa de convergência dos métodos iterativos, de forma que, mesmo que haja um custo maior de construção de uma matriz extra, o método sem a mesma pode até mesmo divergir (Patankar, 1980).

O usuário tem liberdade para escolher entre usar um solver linear ou um *smooth* solver, ambos aplicados para o mesmo fim. Cada um pode ser condicionado com determinados condicionadores. Dentre os condicionadores presentes

no OpenFOAM encontram-se o diagonal incompleto-Cholesky (DIC) e o diagonal incompleto-LU (DILU), o primeiro aplicado à matriz simétrica e o segundo à matriz assimétrica. Os *smooth* solvers são preconditionados com *smoothers*, os quais incluem o Gauss-Seidel, DIC e DICGaussSeidel, para matrizes simétricas e o DILU-GaussSeidel, para matrizes assimétricas.

Em todas as simulações discutidas neste trabalho, o solvers lineares utilizados para a resolução de matrizes simétricas de equações, como a gerada pela pressão, foram resolvidas pelo solver GAMG. O solver multi-grid se aplicou melhor que o solver PCG nos casos de convergência de malha na cavidade quadrada e também nas simulações BALI, nas quais o refinamento da malha foi requerida para casos em que a condição inicial foi fornecida por simulações com malhas mais grossas.

As matrizes assimétricas fornecidas pelas equações da velocidade (U), temperatura (T), variância da temperatura ( $\theta^2$ ), tensões de Reynolds (R), energia cinética turbulenta ( $k$ ), dissipação da energia cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ), frequência de turbulência ( $\omega$ ) e tensor de tensões anisotrópicos ( $a_{ij}$ ) foram resolvidas pelo *smooth* solver. O preconditionador utilizado para o cálculo da pressão foi o (DICGaussSeidel), enquanto para as demais variáveis, foi utilizado como *smoother* o DILUGaussSeidel.

Além dos métodos para cálculo das equações matriciais, o dicionário *fvSolution* também apresenta os fatores de relaxação ( $\alpha_f$ ) especificados para cada variável que contém equação. Em todas as simulações realizadas por este trabalho, foram definidos os fatores de relaxação para U, T,  $k$ ,  $\varepsilon$ ,  $\omega$ . Os fatores de relaxação para as variáveis  $\theta^2$  e  $\overline{\theta u_i}$  foram definidos nos próprios solvers em que as mesmas foram implementadas.

Os valores de  $\alpha_f$  devem ser positivos e menores que 1, porém não há regra para escolher o valor mais adequado para cada variável, uma vez que tal escolha depende da natureza do problema, do procedimento de iteração e também da malha (Patankar, 1980). Pequenos valores de  $\alpha_f$  limitam a mudança na solução por iteração, conforme pode-se observar na equação 3.78. Por outro lado, valores maiores de  $\alpha_f$  permitem alcançar a solução convergida em um número menor de iterações, porém devido à instabilidades numéricas, divergência da solução pode ocorrer.

Cada caso simulado foi realizado com diferentes valores de fator de relaxação.

Em todos os casos simulados com o modelo de fluxos de calor turbulentos isotrópico (SGDH), os menores valores de  $\alpha_f$  foram definidos para o  $\varepsilon$ ,  $\omega$ ,  $k$ ,  $\overline{v^2}$  e  $f$ , os quais estiveram na faixa de  $0,4 - 0,6$ . Todavia, os modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos (GGDH e AFM) requeriram valores inferiores a  $0,5$  para todas as variáveis das equações de transporte.

$$\Gamma = \alpha\Gamma_{novo} + (1 - \alpha)\Gamma_{antigo} \quad (3.78)$$

sendo  $\Gamma$  a variável dependente da equação em que o fator de relaxação é aplicado.

Uma especial atenção foi dada ao termo fonte  $S$  nas equações discretizadas, visto que esse termo é frequentemente função da variável dependente  $\phi$ , calculada na equação. O valor médio do termo fonte é dado pela equação genérica abaixo:

$$\overline{S} = S_C + S_P\phi_P \quad (3.79)$$

no qual,  $S_C$  representa a parte constante de  $\overline{S}$  enquanto que  $S_P$  é o coeficiente de  $\phi$ .

A linearização do termo fonte de acordo com a equação 3.79 tem por vantagem reforçar o domínio da diagonal do sistema linear, movendo-se o termo de dependência da variável em questão  $\phi$ , do lado direito para o lado esquerdo da equação, favorecendo uma melhor estabilidade da solução numérica.

Portanto, a fim de garantir que os coeficientes das equações discretizadas tenham sempre o mesmo sinal e sejam positivos, é requerido que  $S_P$  seja sempre negativo (Patankar, 1980). A fim de seguir essa restrição e garantir estabilidade numérica, a seguinte técnica é utilizada:

$$S = S_1 - S_2 \quad (3.80)$$

$$S = S_1 - \frac{S_2}{\phi_P}\phi_P \quad (3.81)$$

sendo  $S_1$  a parte positiva do termo fonte ( $S_C = S_1$ ) e  $S_2$  a parte negativa ( $S_P = -S_2/\phi_P$ ).

Essa técnica de linearização do termo fonte é utilizada no OpenFOAM pelas funções  $Sp$  e  $SuSp$ , as quais discretizam o termo fonte explicitamente ( $Sp$ ) e, tanto

implicitamente quanto explicitamente (*SuSp*) dependendo do sinal do termo fonte. O termo de produção  $G_b$ , por exemplo, foi inserido nas equações de  $k$  e  $\varepsilon$  e tratado pela função *SuSp*, com a finalidade de evitar que os valores negativos de  $G_b$  causassem instabilidades numéricas no procedimento de solução.

Em relação ao acoplamento velocidade-pressão, dois diferentes métodos foram utilizados dependendo da característica do escoamento. Sabe-se que as equações de momentum apenas podem ser resolvidas quando o campo de pressão é dado ou estimado. Depois disso, ainda não há garantia de que o campo de velocidade será plenamente satisfeito pela equação de continuidade e, mesmo que os valores corretos sejam obtidos, há ainda nenhuma garantia que eles satisfaçam a equação inicial do momento. Dessa forma, um procedimento iterativo é requerido para correção e atualização dos campos instantâneos de velocidade e pressão, a fim de conciliar tanto a equação de continuidade quanto de momento quando a convergência for alcançada (Hanjalić et al., 2012).

Esse trabalho utilizou o algoritmo PIMPLE (uma combinação dos algoritmos PISO e SIMPLE, aplicado a escoamentos incompressíveis e de viável aplicação para casos com grandes passos de tempo (Patankar, 1980)) para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade dos casos transientes. Nos casos estacionários, foi utilizado o algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). A escolha de tratamento dos métodos de acoplamento pressão-velocidade é dada também no dicionário *fvSolution*.

Também no arquivo *fvSolution* foram estabelecidos os critérios de convergência das soluções lineares. Foram estabelecidos resíduos médios inferiores à  $10^{-8}$  para a velocidade, temperatura, tensões de Reynolds (denominado de  $R$  na linguagem do OpenFOAM) e viscosidade turbulenta  $\nu_t$ . Já para as variáveis das equações de turbulência como energia cinética turbulenta  $k$ , dissipação da energia cinética turbulenta  $\varepsilon$ , frequência de turbulência  $\omega$ , flutuações da velocidade normais ao escoamento  $v$ , função de relaxação  $f$  foram estipulados resíduos inferiores à  $10^{-7}$ , enquanto que para a pressão o critério foi de resíduos inferiores à  $10^{-10}$ .

Os solvers, modelo de turbulência V2-f e condições de contorno implementados no OpenFOAM encontram-se no Apêndice A. O próximo capítulo abordará os

resultados de validação do modelo V2-f em simulações em um canal de escoamento, assim como detalhes numéricos dessas simulações.

## Capítulo 4

### Validação do modelo V2-f

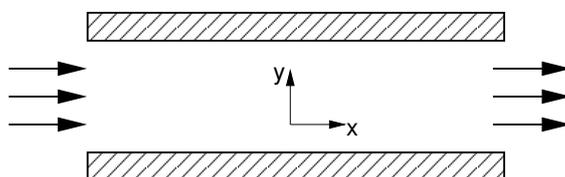


Figura 4.1: Esquema do canal de escoamento

Simulações em um canal bidimensional com escoamento de ar ( $Pr = 0,71$ ) completamente desenvolvido, conforme mostrado na figura 6.6, apresentando número de Reynolds turbulento  $Re_\tau$  igual a 395 foram realizadas no intuito de validar o modelo V2-f implementado no OpenFOAM-1.7.1. Utilizando-se mesma geometria e condições de contorno utilizadas pelo desenvolvedor do modelo, Durbin (1991), os resultados obtidos foram comparados com os resultados por ele apresentados e também com resultados de simulações numéricas diretas, DNS.

As simulações, em regime estacionário, foram realizadas com o algoritmo SIMPLE para o acoplamento da velocidade e pressão. O esquema de segunda ordem de diferença central (CDS) foi utilizado para o tratamento dos termos laplacianos enquanto que os termos convectivos foram tratados com o método de primeira-ordem upwind.

Três malhas não uniformes (com refinamento nas regiões próximas às paredes) foram avaliadas em análises de convergência de malha. Os dados das malhas encontram-se na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Dados estatísticos da malhas utilizadas nas simulações de análise de convergência.

	Nós	Elementos	$y^+$
M-1	204	50	0,1189
M-2	404	100	0,0435504
M-3	804	200	0,01568

Baseando-se no balanço de forças (figura 4.2) em um canal cuja altura é dada por  $H$ , espessura por  $w$ , largura por  $L$  e metade da altura por  $d$ , o gradiente de pressão foi calculado para um caso de  $Re_\tau = 395$ , conforme mostrado nas seguintes equações.

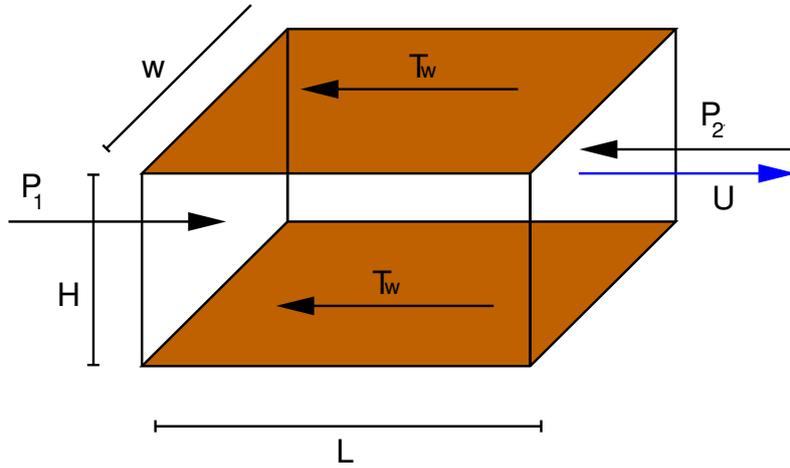


Figura 4.2: Esquema representativo do balanço de forças em um canal de escoamento

$$P_1 w H - P_2 w H - 2T_w L w = 0, \quad (4.1)$$

sendo  $T_w$  a tensão cisalhante nas paredes horizontais.

$$P_1 w H - \left( P_1 + \frac{\partial P}{\partial x} L \right) w H - 2T_w L w = 0, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} L w H = -2T_w L w, \quad (4.3)$$

$$2T_w = -\frac{\partial P}{\partial x} (2d), \quad (4.4)$$

$$T_w = -\frac{\partial P}{\partial x}d \quad (4.5)$$

$$Re_\tau = \frac{U_\tau d}{\nu} = \frac{\sqrt{\frac{T_w}{\rho}}d}{\nu} = \frac{\sqrt{(\frac{\partial P}{\partial x})d}}{\nu} \quad (4.6)$$

Considerando-se que  $d = 1\text{m}$  e aproximando-se  $Re_\tau = 400$  para um fluido com viscosidade cinemática ( $\nu$ ) igual a  $0,0001\text{ m}^2/\text{s}$  e  $\rho = 1\text{ kg}/\text{m}^3$ , o valor de  $0,0016\text{ m}/\text{s}^2$  foi calculado para o gradiente de pressão, o qual foi utilizado como dado de entrada para o escoamento no canal. A fim de levar em consideração o gradiente de pressão na direção do escoamento calculado para esse específico caso, o solver *simpleFoam* foi modificado, inserindo-se uma constante denominada de “gradP” na equação do momento. Tal constante foi definida como  $0,0016$  no arquivo de especificações das propriedades de transporte (*transportProperties*) do fluido.

Um outro detalhe importante para essas simulações foi a implementação da condição de contorno para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. A condição de contorno denominada de *fixedInternalValueEpsilon* foi também implementada e utilizada nos casos de simulação em que o modelo V2-f foi aplicado. De acordo com tal condição de contorno, o valor de  $\varepsilon$  nas paredes foi dado por,

$$\varepsilon = \frac{2k_1}{y_n^2}, \quad (4.7)$$

sendo,  $k_1$  o valor da energia cinética turbulenta calculada no primeiro nó da malha próximo à parede e  $y_n$  a distância do primeiro nó em relação à parede.

A condição de gradiente zero nas paredes foi utilizada para a pressão e para as demais variáveis foi considerada a condição de Dirichlet nas paredes.

O modelo V2-f proposto por Durbin (1991) já passou por diversas modificações desde quando foi desenvolvido (Billard e Laurence, 2012). Tal fato deve-se principalmente pela característica de condição de contorno rígida apresentada pela variável  $f$ , a qual está relacionada com a redistribuição da energia cinética turbulenta na direção normal ao escoamento (Laurence et al., 2004). De acordo com o modelo original, a condição para tal variável é dada pela equação 4.8,

$$f = -\frac{20v^2}{\varepsilon y^4}. \quad (4.8)$$

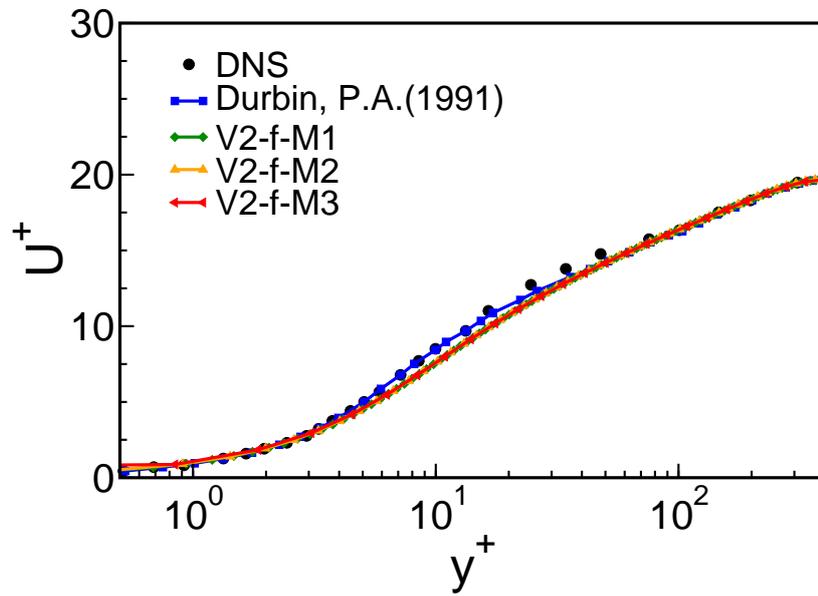
A Equação 4.8 pode apresentar consideráveis dificuldades numéricas devido ao comportamento assintótico de  $y^4$  próximo à parede, significando que pequenas perturbações nos dados de entrada tanto de  $v^2$  quanto de  $\varepsilon$  poderiam gerar notáveis mudanças na solução. Problemas de divergência da solução poderiam, portanto, ser facilmente obtidos para problemas com malhas bem refinadas nas regiões próximas à parede,  $y^+ < 1$ .

Dessa forma, a implementação do modelo V2-f feita por este trabalho seguiu a modificação proposta por Davidson et al. (2003), o qual foi explicada no capítulo 3 e cuja condição de contorno de  $f$  trata-se da bem comportada condição de Dirichlet ( $f = 0$ , nas paredes). A proposta de modelo V2-f com a condição rígida de contorno para  $f$ , apresentada por Kenjereš et al. (2005) também foi avaliada nessa etapa de implementação do modelo.

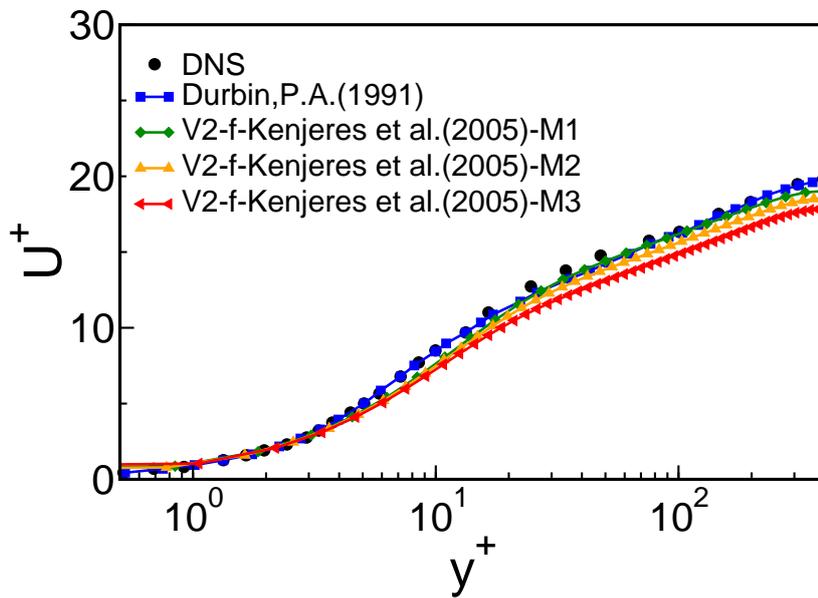
As figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 mostram os resultados obtidos pelas simulações tanto com o modelo V2-f implementado no OpenFOAM, cuja condição de contorno para  $f$  é a condição de Dirichlet, assim como os resultados fornecidos pelo modelo proposto por Kenjereš et al. (2005), cuja condição de contorno de  $f$  trata-se da condição definida pela Equação (4.8). Observa-se que o modelo proposto por Kenjereš et al. (2005) não apresentou solução independente da malha, diferentemente do modelo baseado nas modificações propostas por Davidson et al. (2003).

O termo de produção de empuxo  $G_b \left(-g\beta \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_j}\right)$  foi analisado em ambos os modelos V2-f utilizados nessas simulações e, foi constatado que a presença desse termo nas equações de  $k$ ,  $\varepsilon$  e  $v^2$  não apresentou relevante importância para os resultados obtidos, ou seja, as soluções obtidas tanto com e sem esse termo nas equações não apresentaram alguma diferença.

Uma concordância satisfatória entre as soluções fornecidas por este trabalho, os dados numéricos de Durbin (1991) e também a solução DNS de Kim e Moin (1989) foi obtida, levando-se à conclusão que a implementação do modelo V2-f pôde reproduzir uma correta escala de transporte de turbulência nas regiões próximas da parede, de acordo com a proposta esperada pelo modelo.

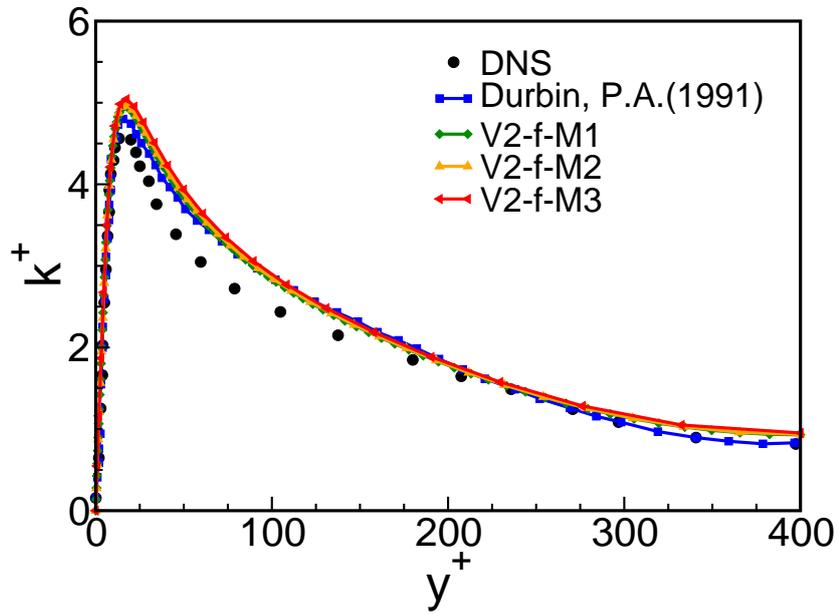


(a)

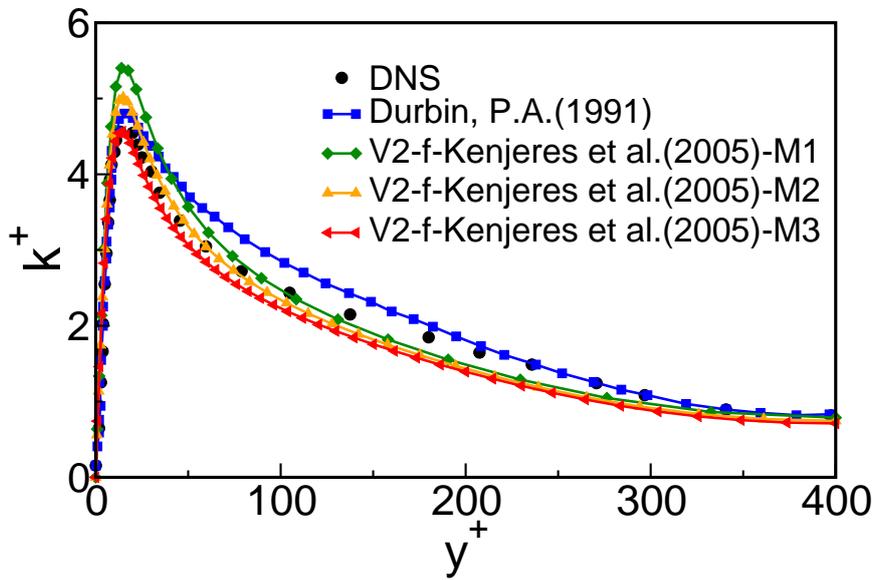


(b)

Figura 4.3: Velocidade adimensional ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005).

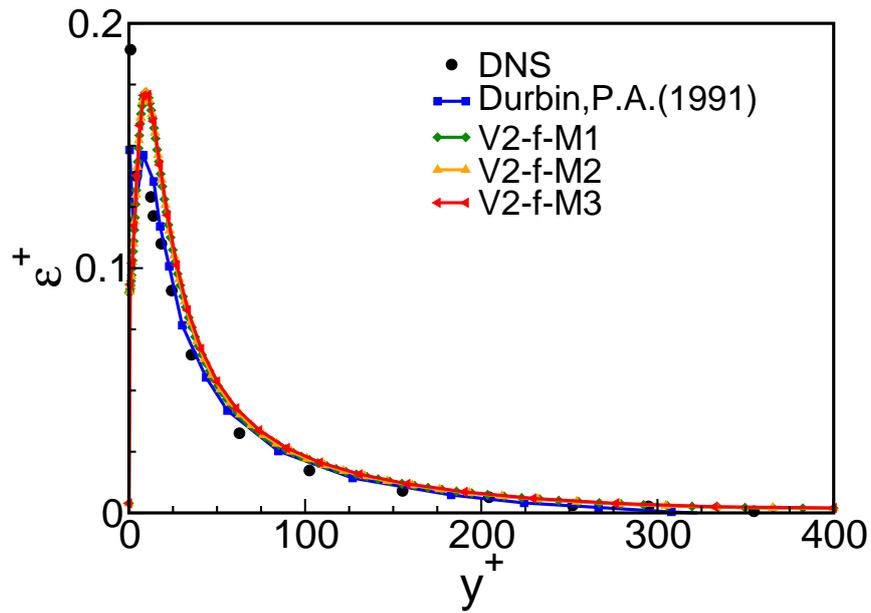


(a)

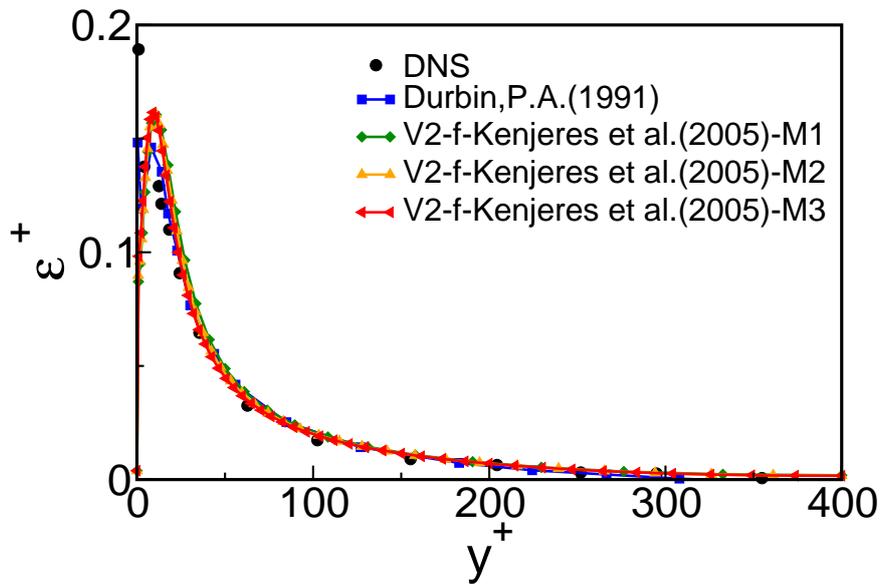


(b)

Figura 4.4: Valores adimensionais de  $k$  ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005).

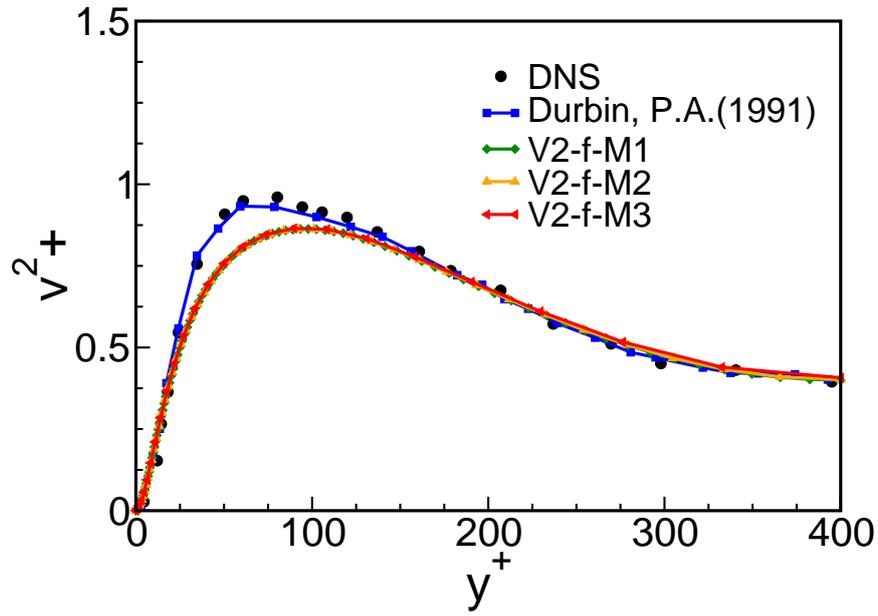


(a)

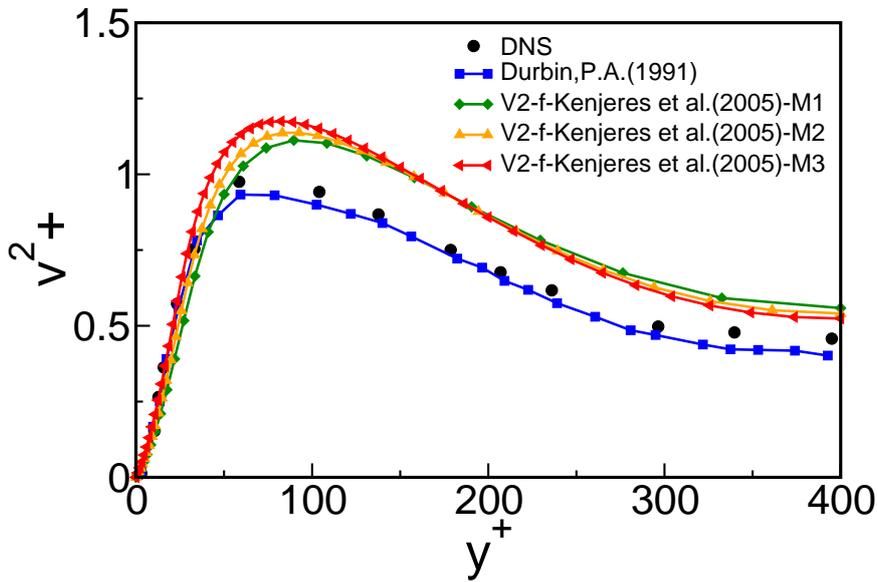


(b)

Figura 4.5: Taxa de dissipação adimensional da energia cinética turbulenta  $\varepsilon$  ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjeres et al. (2005).



(a)



(b)

Figura 4.6: Valores adimensionais de  $v^2$  ao longo de uma linha vertical central ( $X/H = 0,5$ ) obtida por simulações com os modelos (a) V2-f implementado no OpenFOAM e (b) V2-f proposto por Kenjereš et al. (2005).

# Capítulo 5

## Validação dos modelos anisotrópicos para os fluxos de calor turbulentos

Conforme destacado previamente, os modelos padrões de turbulência no OpenFOAM estão baseados na analogia de Reynolds para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos, considerando-se o desenvolvimento da camada limite térmica como análogo ao desenvolvimento da camada limite hidrodinâmica. Os cálculos de fluxo de calor turbulentos são então resolvidos pela hipótese simples de gradiente de difusão (SGDH), a qual trata os fluxos de calor turbulentos proporcionais ao gradiente de temperatura, por meio do número de Prandtl turbulento.

Com a finalidade de avaliar a aplicação de modelos anisotrópicos para casos de convecção natural turbulenta gerada por fonte interna de calor, foram implementados dois modelos: GGDH e AFM. Ambos modelos foram escritos em dois solvers baseados no solver aplicado à escoamentos com empuxo, os quais foram renomeados por *buoyantBoussinesqGGDH* e *buoyantBoussinesqAFM* (os arquivos de código dos solvers encontram-se em Anexo).

As equações dos modelos GGDH e AFM foram inseridas em um loop de interação, o qual foi executado 60 vezes para garantir soluções convergidas dos fluxos de calor turbulentos (diferentes números de iterações foram testados e foi observado que 60 iterações foi suficiente para que as soluções alcançassem a convergência de resíduos médios inferiores à  $10^{-6}$ ).

Simulações em uma cavidade retangular com paredes verticais diferentemente

aquecidas contendo ar e sob condição de  $Ra_e = 5 \times 10^8$ , foram realizadas no intuito de validar e verificar a implementação dos modelos GGDH e AFM. Embora a cavidade seja de simples geometria, a mesma é comumente utilizada para validar modelos de segunda-ordem de fechamento, visto que o problema físico presente na mesma envolve importantes fenômenos, tais como efeitos de turbulência imposto pelas condições de contorno e efeitos não-viscosos devido ao bloqueio próximo à parede (Hanjalić, 2002). Com 0,52 m de largura (L) e 2,6 m de altura (H), uma razão de aspecto (H/L) de 5 : 1 foi mantida. A parede fria foi mantida à temperatura constante ( $T_c =$ )de 295K e a parede quente ( $T_H$ ) à temperatura de 341K, de acordo com o esquema mostrado pela Figura 6.8.

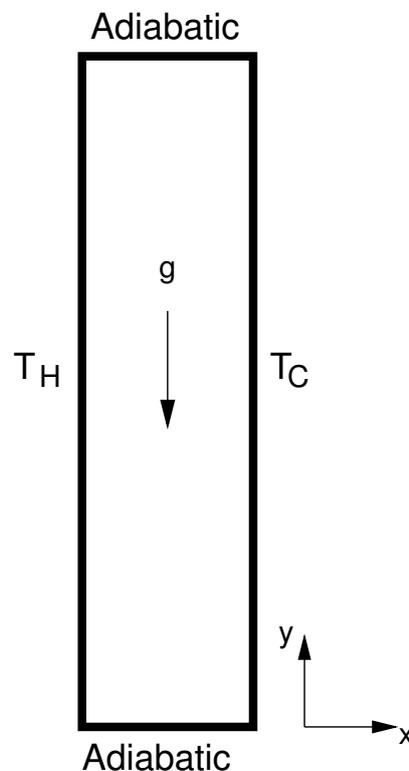


Figura 5.1: Esquema de uma cavidade retangular com paredes diferencialmente aquecidas, utilizada nas simulações com  $Pr = 0,71$  e  $Ra_e = 5 \times 10^8$  (Vieira et al., 2013)

Os dados numéricos de Kenjereš (1998) (autor que propôs as equações propostas para os dois modelos anisotrópicos implementados por esse trabalho de tese) e os experimentais de Cheesewright e King (1990) foram utilizados para avaliar a

performance dos modelos AFM, GGDH e SGDH em simulações com os modelos de turbulência V2-f e SST.

A solução numérica requereu o uso de fatores de relaxação ( $f_r$ ), tanto na equação dos fluxos de calor, quanto na equação da variância de temperatura. Baixos valores de  $f_r$  (respectivamente 0, 2 e 0, 1 para  $\overline{\theta u_i}$  e  $\overline{\theta^2}$ ) foram necessários para evitar divergência da solução devido à elevadas soluções de  $\overline{\theta^2}$ . A equação da velocidade também necessitou de fatores de relaxação, como consequência de grandes gradientes da velocidade em regiões próximas à parede. Conseqüentemente, as simulações com os modelos GGDH e AFM foram consideravelmente mais lentas na obtenção de soluções convergidas, comparadas ao modelo SGDH.

Diferentes coeficientes das equações GGDH e AFM foram testados. Dentre as várias opções de coeficientes, foram analisados aqueles sugeridos por Kenjereš (1998), Kenjereš et al. (2005) e Thielen et al. (2005). Os coeficientes que forneceram melhor performance tanto com o modelo de turbulência V2-f quanto com o SST foram os fornecidos por Kenjereš et al. (2005), os quais se encontram na tabela 5.1.

Tabela 5.1: Coeficientes utilizados nas equações dos modelos anisotrópicos GGDH e AFM, proposto por Kenjereš et al. (2005)

$C_\theta$	$\zeta$	$\eta$
0,15	0,6	0,6

Fixando-se o valor da variação da temperatura entre as paredes verticais ( $\Delta T = 26$  K), casos laminares foram realizados para inicializar a simulação com o  $Ra_e = 5 \times 10^8$ , variando-se o valor da viscosidade cinemática ( $\nu$ ), conforme mostrado pela equação 5.1.

$$\nu = \sqrt{\frac{g\beta\Delta TH^3 Pr}{Ra_e}} \quad (5.1)$$

As simulações foram inicializadas com os resultados de uma simulação laminar com  $Ra_e = 10^8$ . Três diferentes malhas, refinadas nas regiões próximas às paredes foram analisadas em simulações de convergência de malhas:  $M1$ -  $80 \times 80$ ,  $M2$ -  $82 \times 122$  e  $M3$ -  $102 \times 152$  elementos. O caso laminar com  $Ra_e = 10^8$  foi realizado

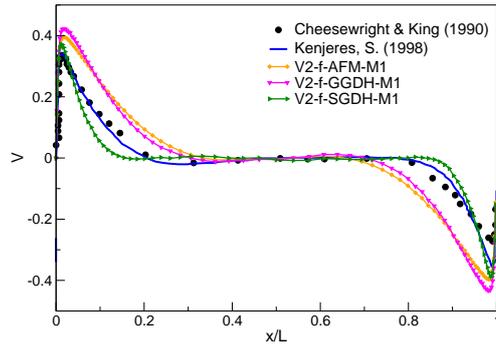
com a malha mais grossa  $M1$  e, por meio da utilidade *mapFields*, os resultados foram interpolados para as malhas mais finas.

A figura 5.2 mostra os resultados obtidos com o modelo de turbulência V2-f juntamente com os modelos SGDH, GGDH e AFM para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos. Por meio da mesma, observa-se que apesar dos modelos GGDH e AFM subestimarem os valores de  $\overline{\theta u}$  e fornecerem uma camada hidrodinâmica mais espessa que o modelo SGDH (figura 5.2a), ambos modelos foram os que melhores prescreveram o perfil do componente vertical dos fluxos de calor turbulentos. Resultados muito similares foram obtidos por Choi et al. (2004), o qual explicou que, apesar dos componentes horizontais terem sido subestimados pelos modelos anisotrópicos, o componente vertical dos fluxos de calor turbulentos é o que apresenta importância na dinâmica do energia cinética turbulenta e conseqüentemente na previsão de outras propriedades do escoamento. Dessa forma, o modelo V2-f com o modelo AFM e GGDH apresentou uma boa performance nesse caso de convecção natural em cavidade diferentemente aquecida, ao contrário do modelo SGDH que subestimou consideravelmente a variável  $\overline{\theta v}$ .

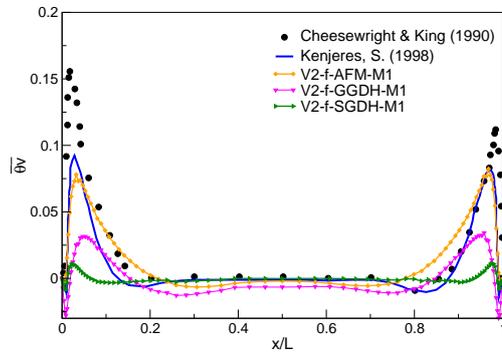
Ao contrário do modelo de turbulência V2-f, o modelo SST não apresentou uma boa performance com os modelos GGDH e AFM, visto que diferentemente do modelo V2-f, os valores de  $\overline{\theta u}$  foram bem preditos, porém os valores de  $\overline{\theta v}$  foram notavelmente subestimados tanto com o modelo SGDH quanto com os modelos anisotrópicos GGDH e AFM, conforme observado na figura 5.3.

As figuras 5.4, 5.5, 5.7 e 5.6 mostram os resultados das simulações de convergência de malha realizadas com os modelos anisotrópicos implementados no OpenFOAM, pelas quais é possível observar que os modelos AFM e GGDH provaram ser independentes da malha, tanto com o modelo de turbulência V2-f quanto SST.

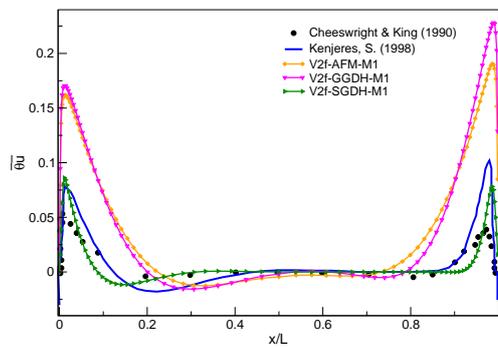
As figuras 5.8, 5.9 e 5.10 mostram os campos de temperatura, componente vertical dos fluxos de calor turbulentos ( $\overline{\theta v}$ ), variância da temperatura ( $\overline{\theta^2}$ ) e flutuações da velocidade da direção normal do escoamento ( $\overline{v^2}$ ), fornecidos pelo modelo de turbulência V2-f com os modelos SGHD, GGDH e AFM respectivamente. De acordo com tais figuras, observa-se que o campo de temperatura do modelo SGDH apresentou um comportamento mais estável na região interna da cavidade, diferentemente



(a)

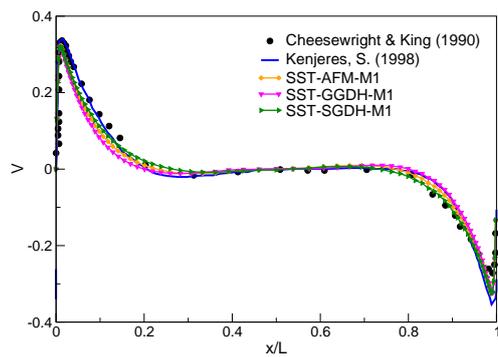


(b)

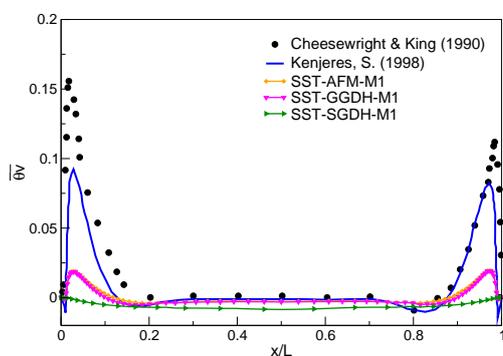


(c)

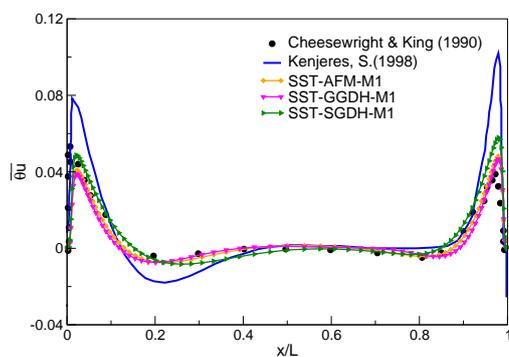
Figura 5.2: Perfis do (a) componente vertical da velocidade ( $V$ ) em  $m/s$ , (b) componente vertical do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta v}$ ) e (c) componente horizontal do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta u}$ ), ambos em  $Km/s$ , ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5$ ), fornecidos por simulações com o modelo de turbulência V2-f e os modelos SGD, GGDH e AFM.



(a)



(b)



(c)

Figura 5.3: Perfis do componente vertical da velocidade ( $V$ ) em  $m/s$ , (b) componente vertical do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta v}$ ) e (c) componente horizontal do fluxo de calor turbulento ( $\overline{\theta u}$ ), ambos em  $Km/s$ , ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5$ ), fornecidos por simulações com o modelo de turbulência SST e os modelos SGDh, GGDh e AFM.

dos modelos GGDH e AFM. Todavia, os valores de  $\overline{\theta v}$  fornecidos pelo modelo SGDH foram consideravelmente inferiores ao modelo GGDH e AFM. A variância da temperatura apresentou valores mais altos pelo modelo AFM, porém todos os modelos forneceram valores consideravelmente altos para tal parâmetro em relação aos valores de  $\overline{\theta^2}$  fornecidos por Kenjereš et al. (2005). Os campos de  $\overline{v^2}$  foram prescritos de forma similar pelos modelos anisotrópicos GGDH e AFM, enquanto que o modelo SGH forneceu valores ligeiramente inferiores aos demais modelos anisotrópicos.

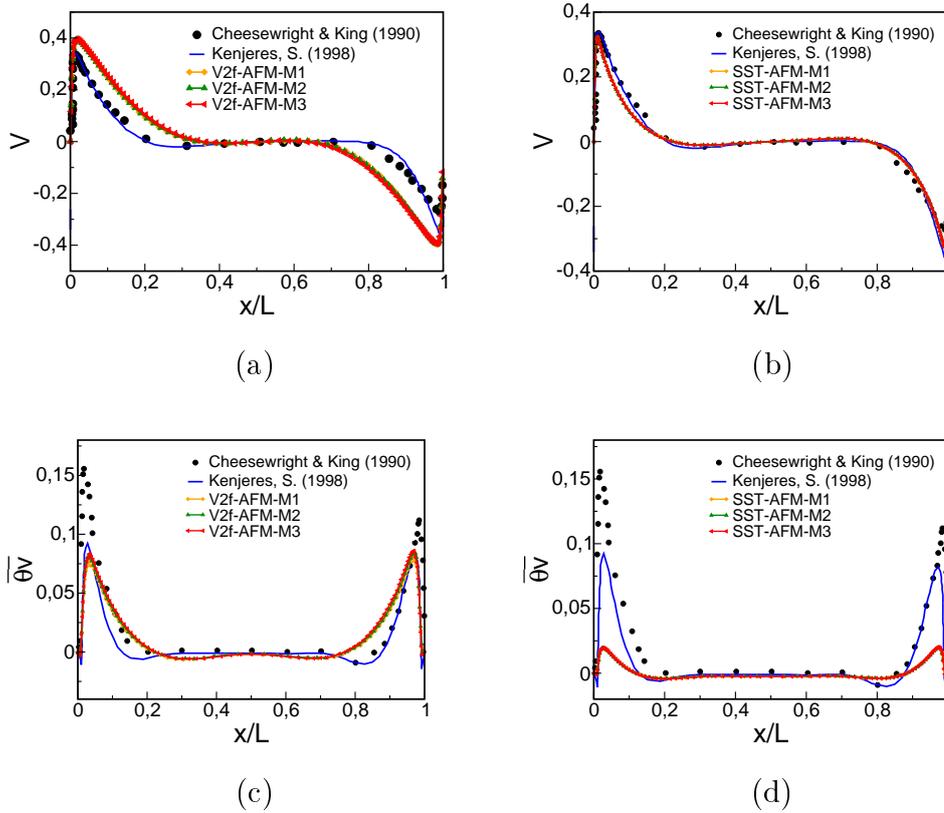
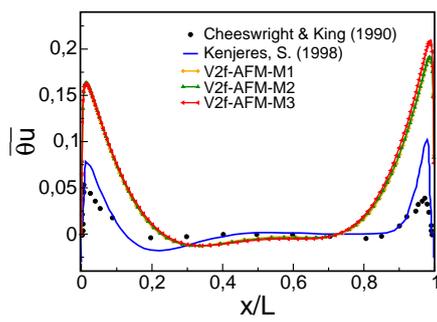
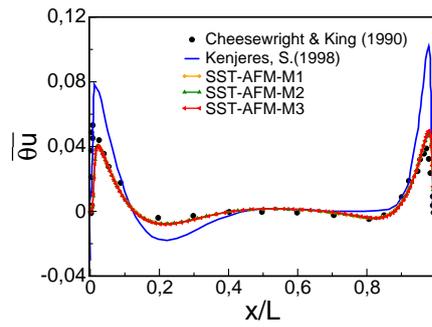


Figura 5.4: Convergência de malha: perfis da velocidade ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5m$ ) fornecidos por (a) V2-f com AFM, (b) SST com AFM, e perfis de  $\overline{\theta v}$  ao longo de  $y/H = 0,5m$  fornecidos por (c) V2-f com AFM e (d) SST com AFM.

Essas simulações tiveram por conclusão que o modelo AFM foi o que forneceu melhores resultados do componente vertical dos fluxos de calor turbulentos, componente fundamental para produção da turbulência em caso de convecção gerada por aquecimento diferenciado.



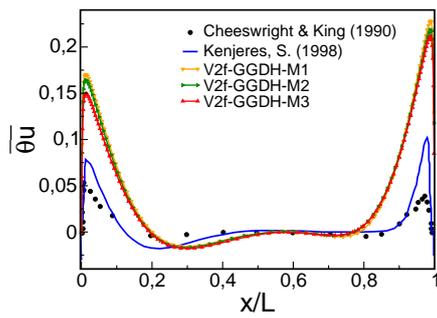
(a)



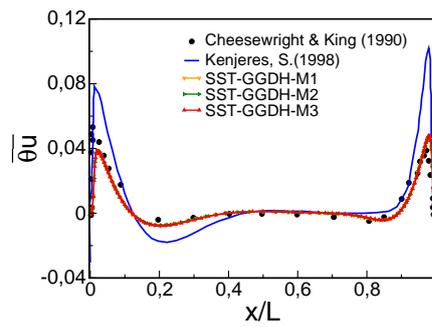
(b)

Figura 5.5: Convergência de malha: perfis de  $\overline{\theta u}$  ao longo de  $y/H = 0,5m$  fornecidos por (c) V2-f com AFM e (d) SST com AFM.

Também vale a pena ressaltar que o modelo de turbulência V2-f apresentou uma melhor performance com os modelos anisotrópicos que o modelo SST.

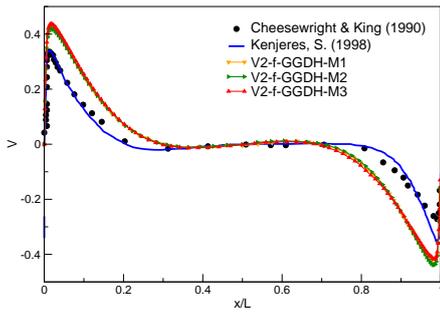


(a)

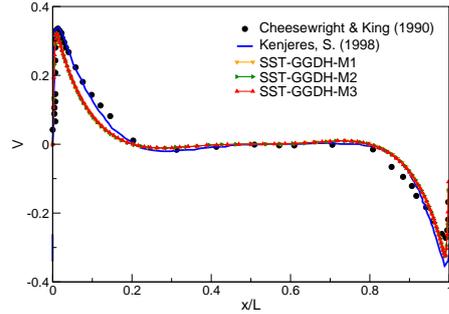


(b)

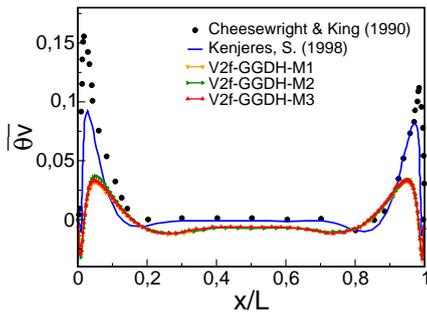
Figura 5.6: Convergência de malha: perfis de  $\overline{\theta u}$  ao longo de  $y/H = 0,5m$  fornecidos por (c) V2-f com GGDH e (d) SST com GGDH.



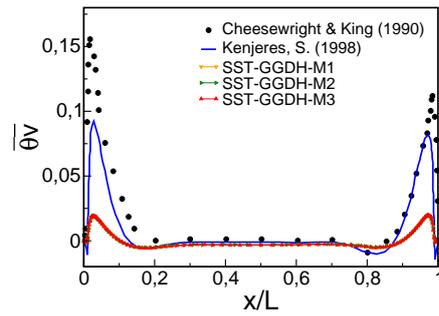
(a)



(b)

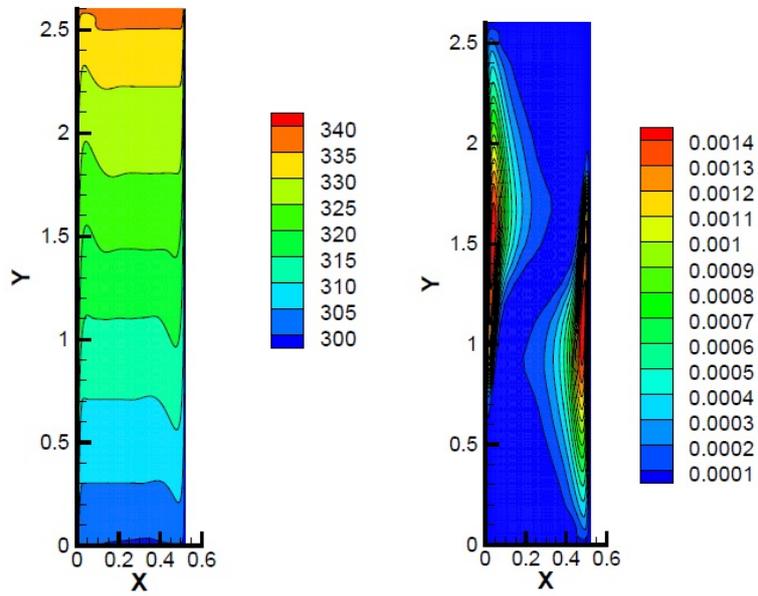


(c)



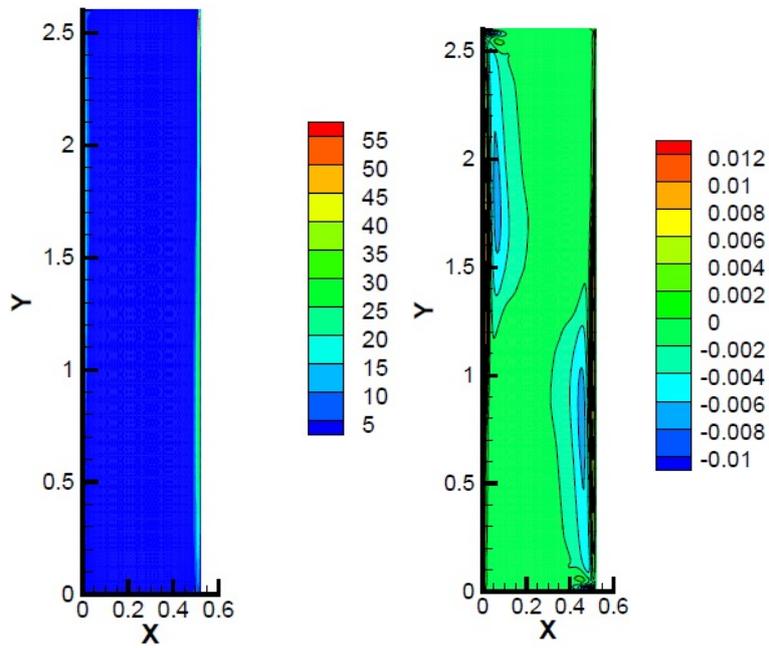
(d)

Figura 5.7: Convergência de malha: perfis da velocidade ao longo de uma linha central ( $y/H = 0,5m$ ) fornecidos por (a) V2-f com GGDH, (b) SST com GGDH, e perfis de  $\overline{\theta v}$  ao longo de  $y/H = 0,5m$  fornecidos por (c) V2-f com GGDH e (d) SST com GGDH.



(a)  $T$

(b)  $v^2$



(c)  $\overline{\theta^2}$

(d)  $\overline{\theta v}$

Figura 5.8: Simulação realizada com V2-f e SGDh, para  $Ra_i = 5 \times 10^8$  e  $Pr = 0,71$ .

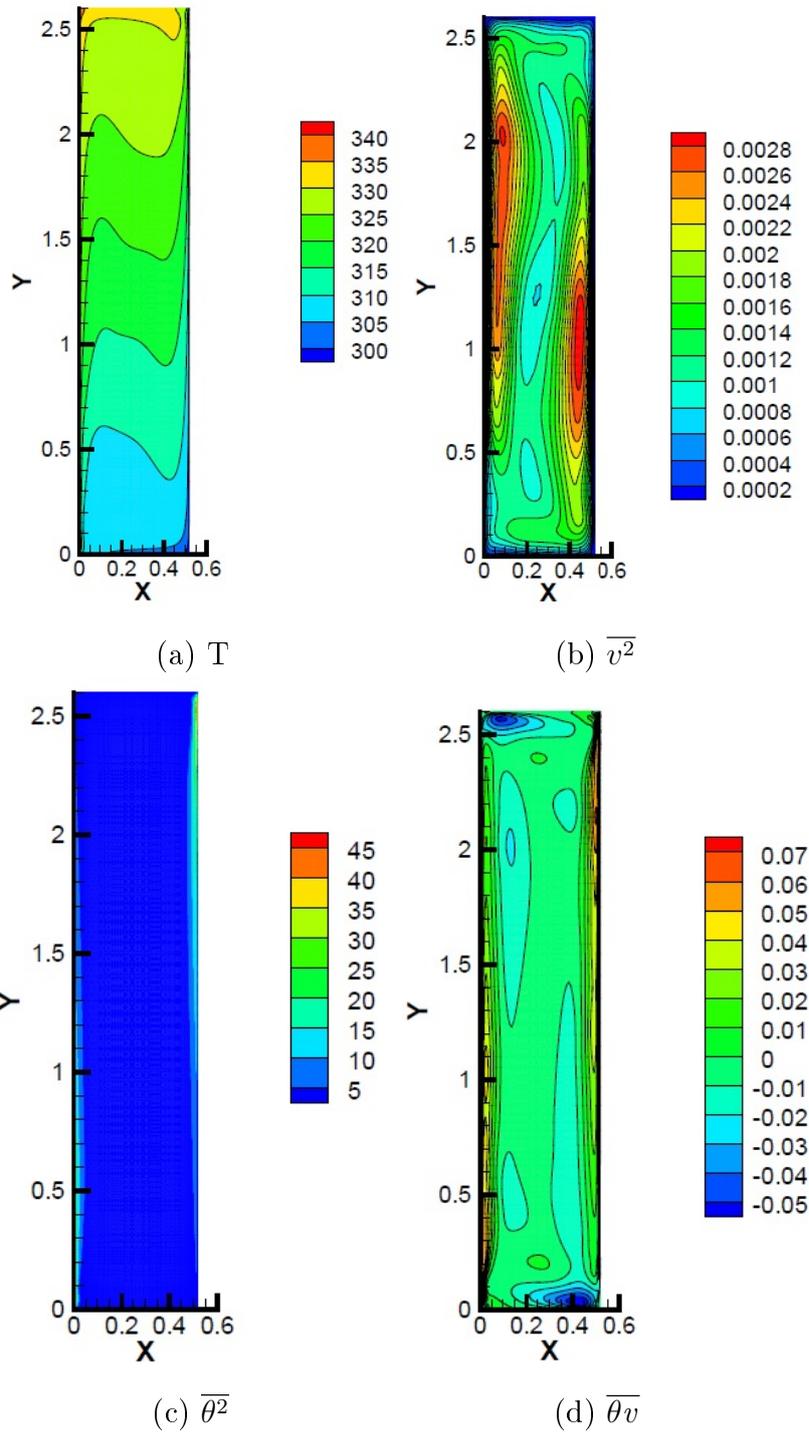


Figura 5.9: Simulação realizada com V2-f e GGDH, para  $Ra_i = 5 \times 10^8$  e  $Pr = 0,71$ .

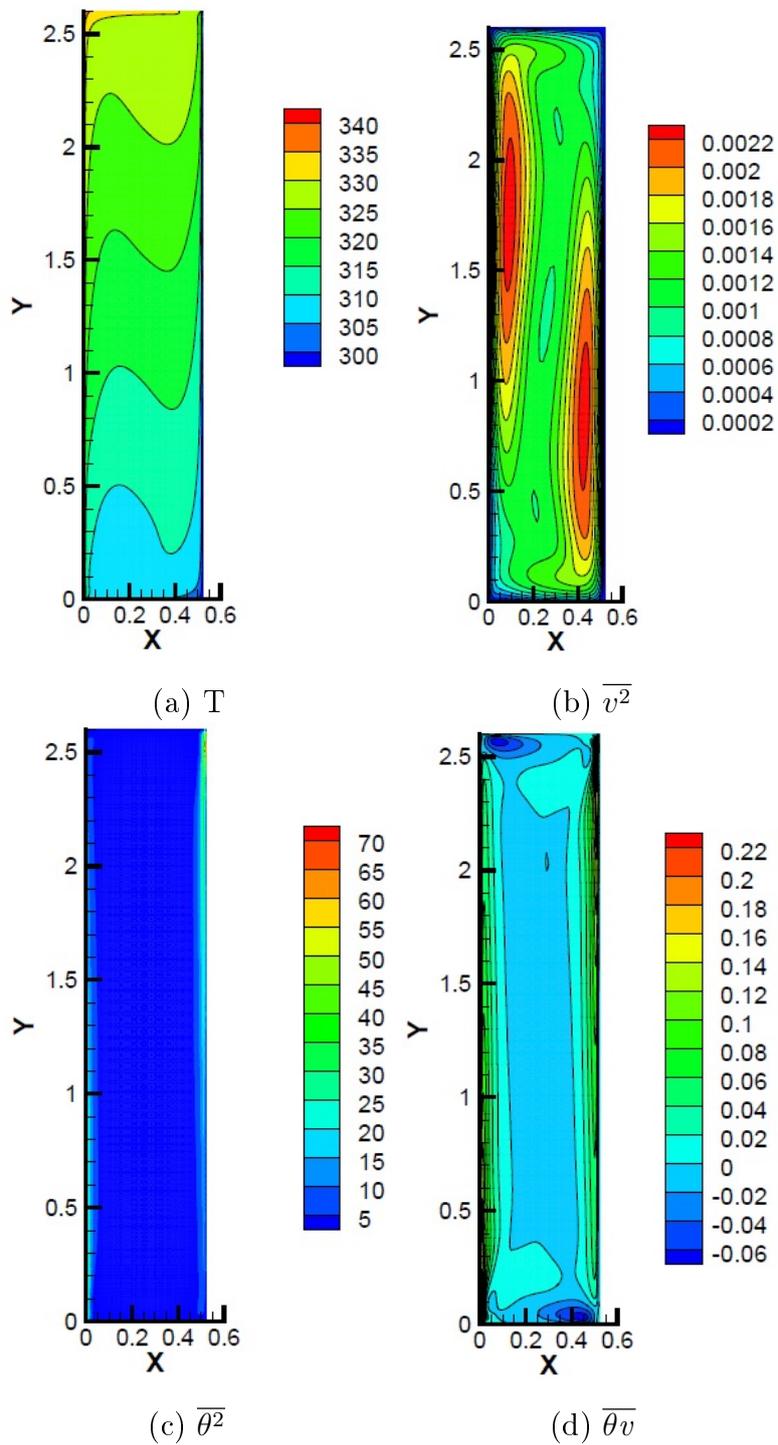


Figura 5.10: Simulação realizada com V2-f e AFM, para  $Ra_i = 5 \times 10^8$  e  $Pr = 0,71$ .

# Capítulo 6

## Análise de modelos de turbulência RANS em uma cavidade quadrada com fonte interna de calor uniforme.

Este capítulo apresenta os resultados das simulações realizadas em uma cavidade quadrada, as quais foram realizadas no intuito de investigar com mais detalhe o desempenho de quatro modelos de turbulência RANS no estudo de convecção natural turbulenta com fonte interna de calor. Também é discutido a aplicação de modelos anisotrópicos para o cálculo de  $\overline{\theta u'_i}$  em análises de convecção natural gerada por fonte volumétrica de calor.

### 6.1 Performance dos modelos de turbulência $k-\varepsilon$ , baixo-número de Reynolds $k-\varepsilon$ (Launder e Sharma (1974) model), V2-f e SST com o modelo SGDH para o cálculo de $\overline{\theta u'_i}$

A cavidade quadrada com todas paredes isotérmicas (Figura 6.1) foi escolhida para uma investigação mais detalhada dos modelos de turbulência devido à simplicidade da geometria, tornando de fato os cálculos mais simples em relação à

outras geometrias, como a hemisférica. De acordo com Horvat et al. (2001), resultados experimentais obtidos em cavidades retangulares e hemisféricas apresentaram comportamentos similares, sem relevante discrepância entre os valores de Nusselt fornecidos por ambas geometrias. Nourgaliev et al. (1997) também obtiveram resultados numéricos similares para geometrias hemisférica e quadrada. Perante essas razões, a cavidade quadrada mostrou-se adequada para as análises dos modelos de turbulência.

A condição de contorno de paredes isotérmicas (273 K) foi utilizada como representação da camada óxida formada ao redor do material de núcleo derretido no fundo do vaso de pressão e o fluido simulante foi água ( $Pr = 7,0$ ). A maioria dos experimentos têm sido realizados com água, devido ao fato de que, apesar do  $Pr$  de material óxido ser 0,6, a água consegue representar as condições de acidente severo sem a necessidade de elevados gradientes de temperatura, garantindo mais segurança e menos custos por equipamentos.

As simulações aqui apresentadas foram realizadas com passo de tempo de  $10^{-2}$  segundos. A simulação com  $Ra_i = 10^6$  foram inicializadas no tempo zero, enquanto que as demais simulações foram inicializadas com os resultados convergidos dos casos de  $Ra_i$  inferiores, por exemplo, o resultado da simulação com  $Ra_i = 10^6$  foi utilizado para inicializar a simulação com o  $Ra_i = 10^8$  e assim por diante. Os termos convectivos foram discretizados com o método de segunda ordem upwind, os termos laplacianos foram tratados por diferença central e a integração no tempo foi realizada pelo método implícito de Euler.

Em uma faixa de  $Ra_i$  de  $10^6$  à  $10^{11}$ , quatro modelos RANS foram escolhidos para essa presente análise. O modelo  $k - \varepsilon$  foi escolhido por se tratar de um modelo padrão e um dos mais utilizados em diferentes problemas físicos, incluindo convecção natural em cavidades. O modelo de baixo-número de Reynolds de Launder e Sharma (1974) (LS) também foi analisado por se tratar de um modelo bem conhecido nas análises de problemas em que a região da parede apresenta grande influência no escoamento do fluido, como é caso aqui estudado. O SST trata-se de um dos modelos mais famosos, com bom desempenho em problemas complexos em que tanto escoamentos próximos quanto distantes à parede são importantes e leva-

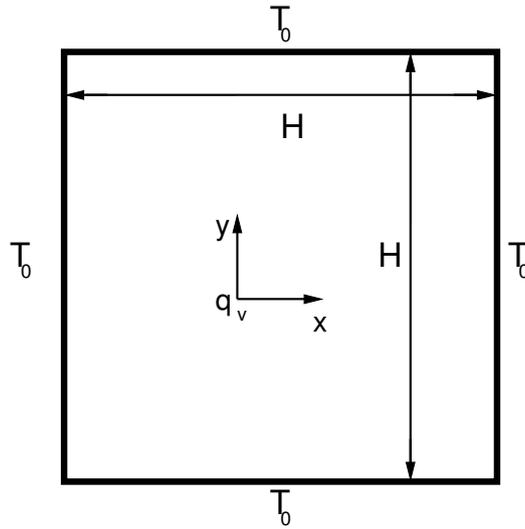


Figura 6.1: Esquema da cavidade quadrada utilizada nas simulações para análise dos modelos de turbulência.

dos em consideração nos cálculos. O modelo V2-f trata-se também de um modelo de baixo-número de Reynolds, mas diferentemente do LS, o mesmo leva em consideração o fenômeno de anisotropia próximo à parede, não considerando funções de amortecimento para o cálculo da viscosidade turbulenta, mas sim os dados do próprio escoamento, ou seja, os componentes de flutuação da velocidade normais à direção do escoamento ( $v^2$ ).

Visto que o interesse dessas simulações foi investigar o desempenho dos modelos de turbulência selecionados, optou-se então, por utilizar um modelo mais simples para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos, no caso o modelo SGDH, a fim de evitar que qualquer outro fator pudesse interferir nas análises dos próprios modelos de turbulência.

Todos os modelos analisados, cujas equações encontram-se no Capítulo 3 foram testados com e sem o termo de produção de empuxo  $G_b$  (Equação (3.69)). Uma observação relevante nesses testes tratou-se do fato que o modelo LS somente prescreveu escoamentos turbulentos após a inserção do termo  $G_b$  nas equações de  $k$  e  $\varepsilon$ . Tal evidência foi notada pelos baixos valores de  $y^+$  fornecidos antes inserção de  $G_b$  ( $y^+ < 10^{-4}$ ), os quais são calculados em função dos valores de  $k$ . O modelo  $k$ - $\varepsilon$  apresentou um melhor desempenho sem a presença do termo  $G_b$ , em simula-

ções com  $Ra_i > 10^{10}$ , enquanto que os modelos SST e V2-f apresentaram a mesma performance tanto com e sem o termo  $G_b$ .

As primeiras análises realizadas foram referentes à convergência de malha, as quais foram realizadas com o modelo de turbulência V2-f, para o caso de  $Ra_i = 10^{11}$ . Essas análises foram feitas com o intuito de obter a ordem de acurácia (p), a extrapolação de Richardson (estimativa de alta ordem de um valor para malha com espaçamento tendendo à zero), índice de convergência de malha (GCI), a faixa assintótica de convergência e o erro fracional (E1) fornecidos por simulações com diferentes tamanhos de malha (Roache, 1998).

Quatro malhas não estruturadas e não-uniformes foram analisadas: M-1 ( $100 \times 100$  elementos), M-2 ( $200 \times 200$ ), M-3 ( $300 \times 300$ ) e M-4 ( $400 \times 400$ ). As malhas foram geradas pelo programa ANSYS ICEM 12.0 e importadas pelo OpenFOAM por meio da utilidade *fluentMeshToFoam*.

A tabela 6.1 mostra os valores de  $Nu_{dn}$  fornecidos por cada uma das malhas avaliadas, assim como os dados estatísticos das mesmas, as quais foram refinadas nas regiões próximas às paredes e portanto apresentaram diferentes fatores de crescimento dos elementos ( $k_{gr}$ ).

Tabela 6.1: Análise de sensibilidade de malha realizada com o modelo de turbulência V2-f em uma cavidade quadrada bidimensional contendo fluido com  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$

Malha	Nós	Elementos	$k_{gr}$	$\overline{Nu}_{dn}$
$100 \times 100$	20000	29799	1,1	17,3134
$200 \times 200$	45000	67199	1,055	18,0269
$300 \times 300$	80000	119599	1,05	18,2387
$400 \times 400$	320000	479199	1,03	18,3533

A figura 6.2 mostra a distribuição local dos valores médios de Nusselt ao longo da parede do fundo ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) fornecidos pelas quatro malhas analisadas. De acordo com a mesma, observa-se que a solução tornou-se independente da malha a partir da malha com  $200 \times 200$  elementos. O cálculo de Nusselt foi baseado nos valores de fonte interna de calor  $q_v$  e fluxos de calor  $q_w$  ao longo de cada parede (no caso

da análise de convergência de malha, os valores de  $q_w$  ao longo da parede do fundo foram utilizados), conforme explicado por citeVieira:2010.

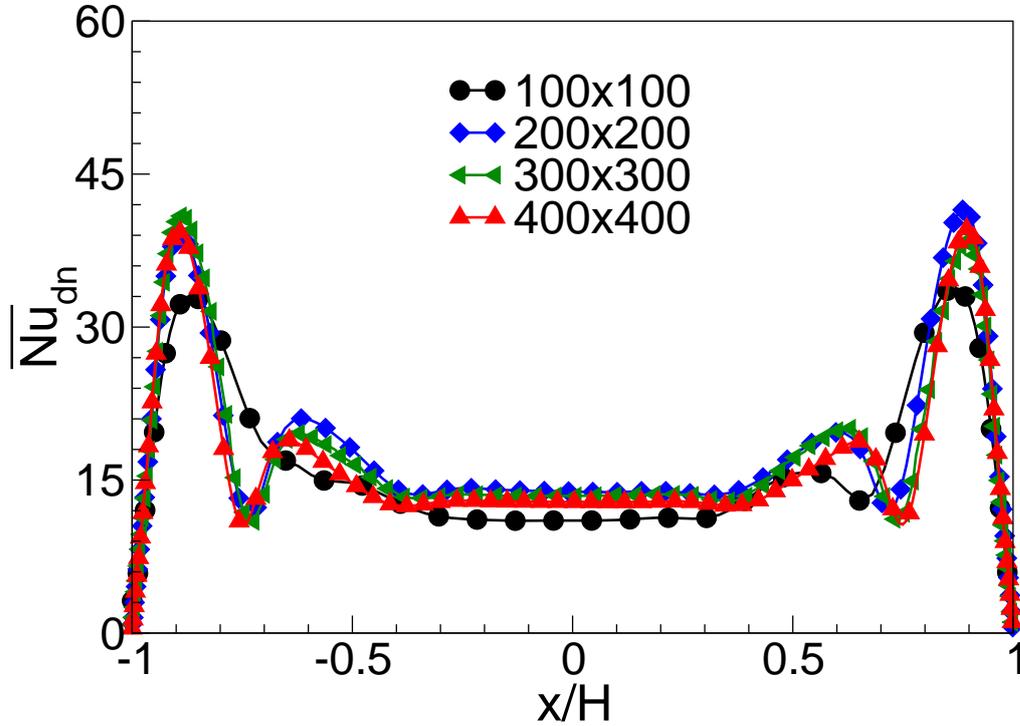


Figura 6.2: Análise de convergência de malha do modelo V2-f, para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$ : distribuição local da média temporal de Nusselt  $\overline{Nu}_{dn}$  ao longo da parede do fundo da cavidade.

Levando-se em consideração os valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelas malha mais grossa (M-1), intermediária (M-2) e mais fina (M-4), o cálculo da ordem de acurácia foi determinado conforme apresentado pela equação (6.1) (Bai et al., 2013, Eça e Hoekstra, 2014). As malhas foram normalizadas pelo valor do espaçamento da malha mais fina e redefinidas de acordo com o espaçamento normalizado ( $\Delta$ ), conforme mostrado na tabela 6.2.

$$p = \ln \left( \frac{\overline{Nu}_{dn4} - \overline{Nu}_{dn2}}{\overline{Nu}_{dn2} - \overline{Nu}_{dn1}} \right) / \ln(r), \quad (6.1)$$

sendo  $r$  a razão de refinamento da malha, o qual tratou-se de 2 nesse caso.

Tabela 6.2: Análise de sensibilidade de malha: valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelas malhas normalizadas pelo espaçamento da malha mais fina.

Malha	$\Delta$	$\overline{Nu}_{dn}$
$100 \times 100$	4	17,3134
$200 \times 200$	2	18,0269
$400 \times 400$	1	18,3533

Substituindo os valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  na equação 6.1, o valor de ordem de acurácia obtido foi 1,12827. A diferença entre o valor teórico (2) e o valor obtido pelas malhas (1,128), pode ser consequente do refinamento da malha e não linearidades na solução (Roache, 1998).

Utilizando o valor obtido para ordem de convergência e os valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelas malhas intermediária e fina, foi possível obter uma estimativa ( $f_{ex}$ ) do valor de  $\overline{Nu}_{dn}$  quando o espaçamento dos elementos da malha tendem à zero (Eça e Hoekstra, 2014), o qual foi calculado de acordo com a equação (6.3).

$$f_{ex} = \overline{Nu}_{dn1} + \frac{(\overline{Nu}_{dn1} - \overline{Nu}_{dn2})}{(r^p - 1)}. \quad (6.2)$$

A figura 6.3 mostra o comportamento da solução quando a malha tende a um espaçamento mínimo entre os elementos. A diferença entre o valor estimado para uma malha com espaçamento zero entre os elementos e o valor obtido pela malha mais fina trata-se de 0,0147.

Um outro critério de sensibilidade de malha, denominado de índice de convergência de malha (GCI), foi analisado (Bai et al., 2013). Utilizando um fator de segurança de  $F_S = 1,25$ , visto que três malhas foram sendo avaliadas (caso fossem duas malhas, o valor de  $F_S$  recomendado seria 3,0), o cálculo de GCI para as malhas com  $\Delta = 1$  e 2 foi baseado na seguinte equação:

$$GCI_{12} = \frac{\left(1,25 \frac{(\overline{Nu}_{dn1} - \overline{Nu}_{dn2})}{\overline{Nu}_{dn1}}\right)}{(r^p - 1)} 100\% = 1,87445. \quad (6.3)$$

Utilizando a equação para o cálculo de GCI entre as malhas intermediária

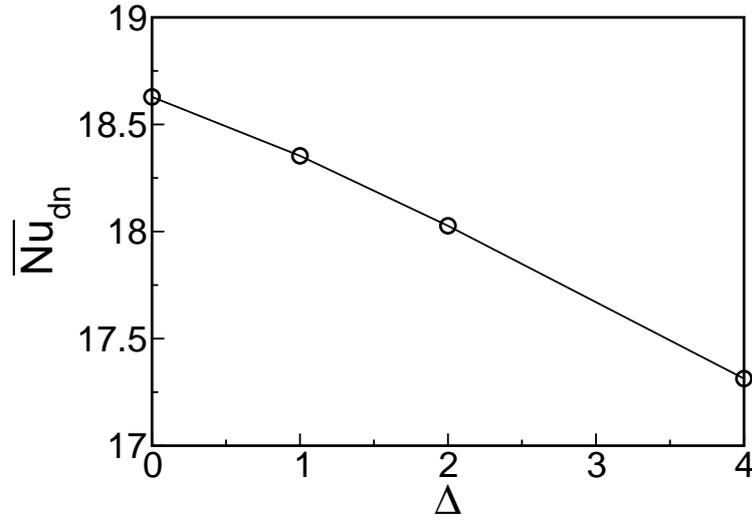


Figura 6.3: Extrapolação de Richardson (Roache, 1998).

( $\Delta = 2$ ) e grossa ( $\Delta = 4$ ), o valor do índice de convergência de malha foi de  $GCI_{24} = 4,17167$ . Por meio dos valores de GCI, foi então possível checar se as soluções estiveram na faixa assintótica de convergência de malha, de acordo com a equação (6.4).

$$c_a = \frac{GCI_{12}}{(r^p - GCI_{24})} = 1,0181. \quad (6.4)$$

Visto que  $c_a$  foi aproximadamente um, a solução tem um alto indicativo de estar na faixa assintótica de convergência de malha (Bai et al., 2013).

O erro fracional  $E$  (equação (6.1)) também foi outro critério avaliado, visto que soluções com boa acurácia apresentam um erro fracional inferior a um. Os valores dos erros obtidos pelas malhas com  $\Delta = 1$  e 2 foi de  $E1 = 0,015$ , enquanto que com as malhas com  $\Delta = 2$  e 4 foi de  $E2 = 0,0337$ . Ambos estiveram bem inferiores à um e tenderam a diminuir com o refinamento da malha.

$$E1 = \frac{\epsilon}{r^p - 1} \quad (6.5)$$

sendo  $\epsilon$  o erro relativo  $((\overline{Nu}_{dn1} - \overline{Nu}_{dn2})/\overline{Nu}_{dn1})$ .

A tabela 6.3 mostra todos os valores dos critérios analisados na análise de

convergência de malha. Essa análise mostrou que as soluções foram independentes da malha, a partir da malha com  $200 \times 200$  elementos e apresentaram boa acurácia. Com base nessa análise de sensibilidade de malha, optou-se por utilizar a malha M-2 em todas as demais simulações realizadas na cavidade quadrada.

Tabela 6.3: Sumário dos critérios avaliados na análise de sensibilidade de malha com o modelo V2-f, na cavidade quadrada contendo fluido com  $Pr = 0.6$  e  $Ra_i = 10^{11}$ .

$p$	$f_{ex}$	$c_a$	$E_1$	$E_2$
1,12827	18,6285	1,0181	0,015	0,033

A tabela 6.4 apresenta os valores de  $y^+$  fornecidos por cada um dos modelos de turbulência utilizados nas simulações de convecção natural turbulenta na cavidade quadrada. Observa-se que, para todos os modelos, a malha M-2 se adequou às exigências de boa prática de CFD (Casey e Wintergerste, 2000, Mahaffy et al., 2007), a qual prescreve que para modelos de alto números de Rayleigh, como o k- $\varepsilon$ , o qual faz uso de funções de paredes e portanto não levam em consideração a região de sub-camada viscosa, os valores de  $y^+$  devem ser acima de 30 (as simulações com o modelo k- $\varepsilon$  foram realizadas com a malha M-2, mas sem refinamento nas regiões de parede). Já para modelos de baixo-número de Reynolds como o modelo LS, V2-f e também SST (no OpenFOAM, de acordo com o refinamento da malha, o modelo SST pode ser utilizado como alto ou baixo-número de Reynolds), os valores de  $y^+$  devem se encontrar abaixo de 5 e próximos à uma unidade .

Tabela 6.4: Valores médios de  $y^+$  fornecidos pelos modelos de turbulência SST, k- $\varepsilon$ , LS e V2-f, em simulações com  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$

Parede	SST	k- $\varepsilon$	LS	V2-f
Topo	0.3463	41,4840	1,9985	0,7221
Esquerda	1.2784	43,14	0,9266	1,6526
Direita	1.3294	40,9918	2,6392	1,6661
Fundo	0.1417	42,7301	0,1948	0,6285

A faixa de  $Ra_i$  em que o escoamento esteve em regime laminar foi de  $10^6$  à  $10^8$ . De acordo com a figura 6.4, observa-se que a solução convergiu para si-

mulação laminar e alcançou o regime estacionário, ao contrário do escoamento com  $Ra_i = 10^9$ , cujo regime tratou-se de uma transição de laminar transiente para turbulento. A transferência de calor na parede do topo apresentou valores mais elevados visto que o fluido ao aquecer-se e dirigir-se em direção ao topo da cavidade, por convecção natural, alcança uma superfície com temperatura muito inferior ao do mesmo, proporcionando uma alta transferência de calor devido aos altos gradientes de temperatura. Ao escoar em direção à parede do fundo, o fluido já está com uma temperatura mais reduzida devido à transferência de calor na parede superior e, por isso, a troca de calor nas paredes laterais é inferior à encontrada no topo e superior à transferência na parede do fundo, região em que o fluido já encontra-se com baixas temperaturas.

As figuras 6.5, 6.6, 6.7 e 6.8, mostram a evolução ao longo do tempo dos valores médios espaciais dos números de Nusselt ( $\overline{Nu}$ ) fornecidos, respectivamente, pelos modelos de turbulência k- $\varepsilon$ , LS, SST e V2-f. De acordo com os resultados obtidos com os modelos LS e k- $\varepsilon$ , observou-se que ambos os modelos superestimaram os valores de  $\overline{Nu}$  ao longo da parede do topo, em consequência de fornecerem altos valores de energia cinética na região de estagnação, ou seja, local onde o fluido atinge a parede do topo. Tal comportamento foi também observado em simulações de jatos de colisão analisados por Craft et al. (1993), que constatou que a principal dificuldade de tais modelos em predizer acuradamente os valores de  $\overline{Nu}$  provém do emprego da formulação de viscosidade turbulenta isotrópica nas regiões próximas à sub-camada viscosa. A abordagem anisotrópica fornecida pelo modelo V2-f, contribui para uma melhor predição de  $\overline{Nu}$  em regiões de estagnação, conforme pode-se observar pelo figura 6.8. O modelo k- $\varepsilon$  foi o menos robusto e acurato, o qual forneceu diversos problemas de convergência durante as simulações com  $Ra_i = 10^{10}$  e  $Ra_i = 10^{11}$ .

As figuras 6.9, 6.10, 6.11, 6.12, 6.13 e 6.14 mostram os campos instantâneos de temperatura e velocidade fornecidos por simulações com os modelos SST, LS e V2f, para  $Ra_i = 10^9$ . Todos os modelos conseguiram fornecer camadas estratificadas de temperatura, com valores maiores no topo da cavidade e, um escoamento estreito de fluido próximo às paredes laterais.

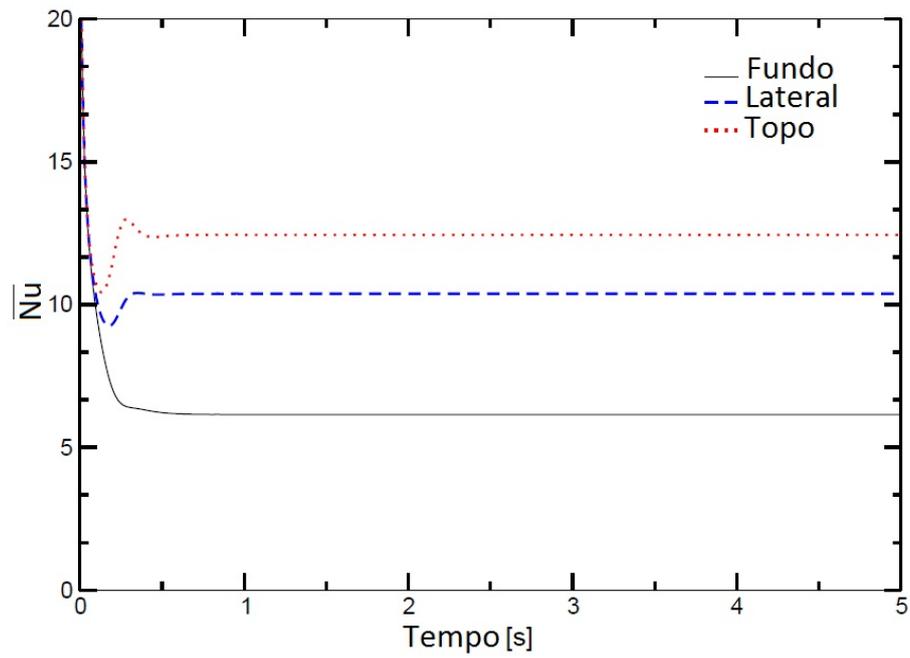
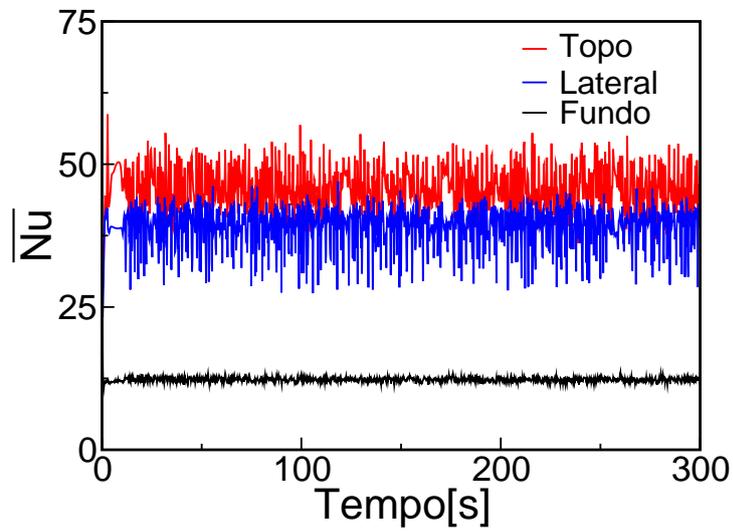
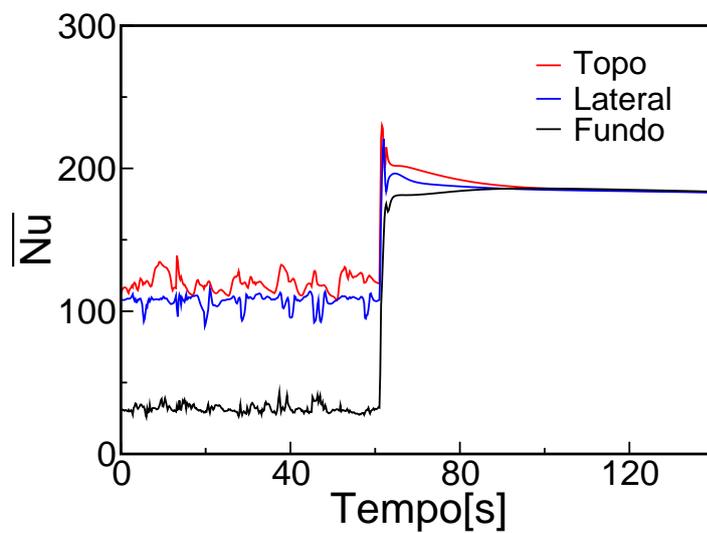


Figura 6.4: Histórico temporal dos valores de média espacial de  $\overline{Nu}$  ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação laminar com  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^6$

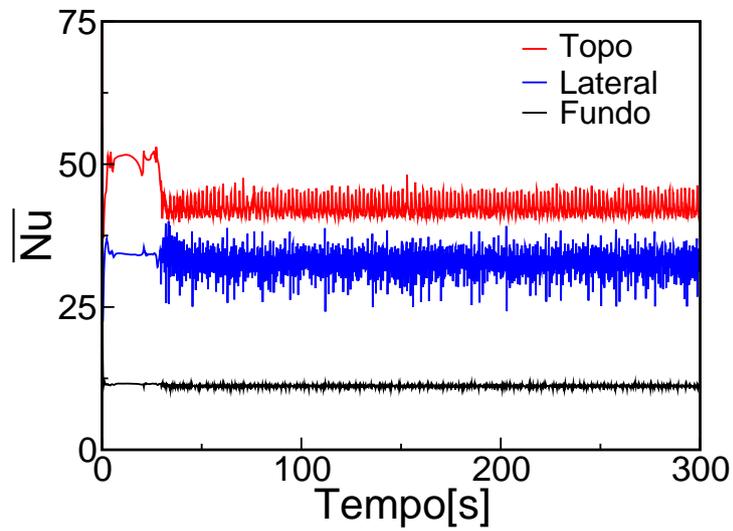


(a)

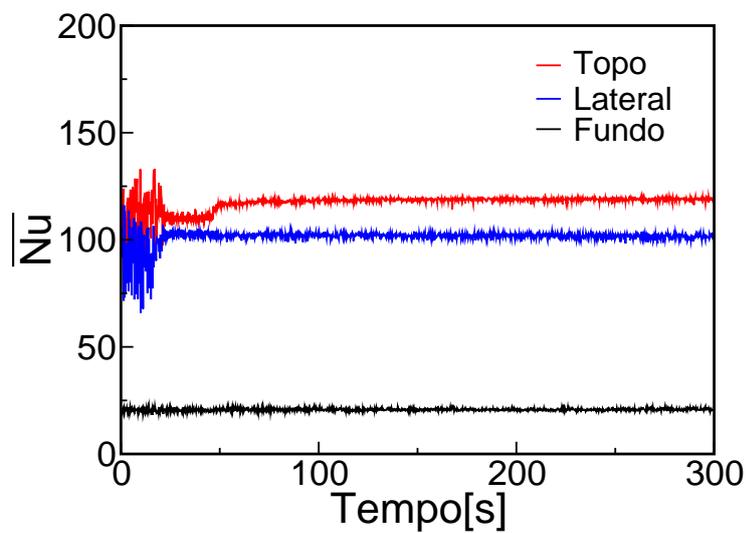


(b)

Figura 6.5: Histórico temporal dos valores de média espacial de  $\overline{Nu}$  ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo k- $\varepsilon$ , para (a)  $Ra_i = 10^9$  e (b)  $Ra_i = 10^{11}$ .

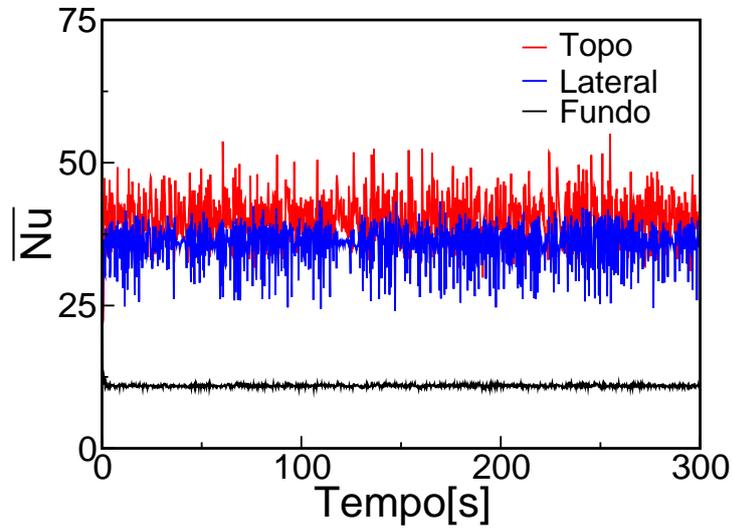


(a)

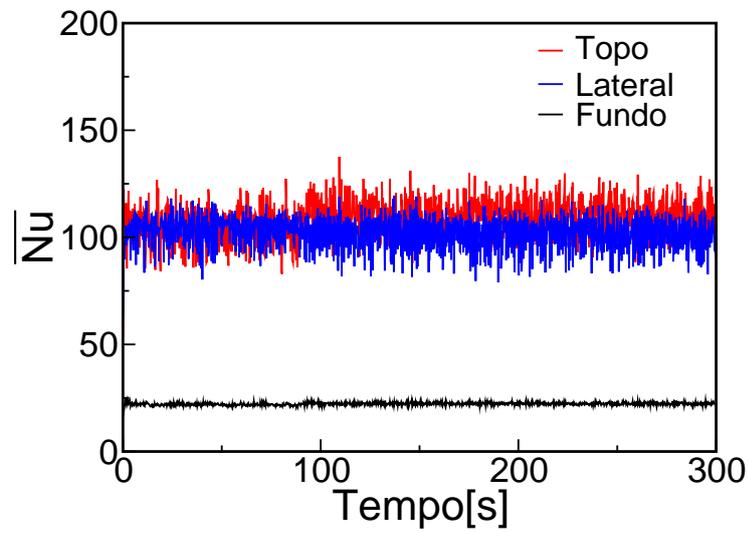


(b)

Figura 6.6: Histórico temporal dos valores de média espacial de  $\overline{Nu}$  ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo LS, para (a)  $Ra_i = 10^9$  e (b)  $Ra_i = 10^{11}$ .

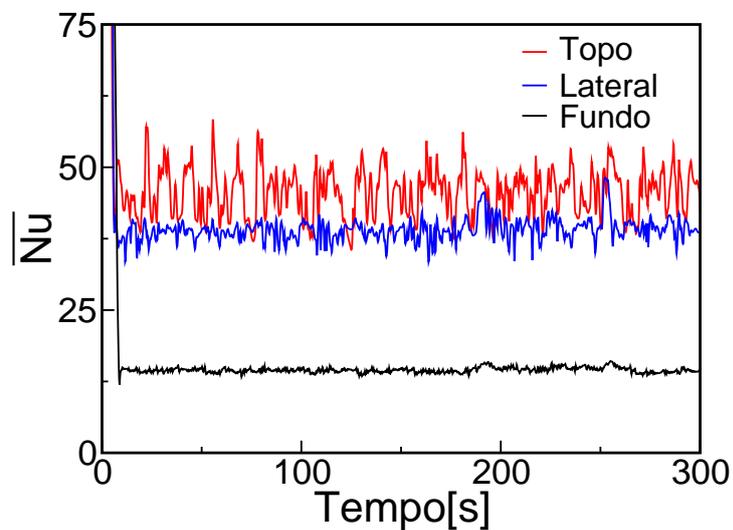


(a)

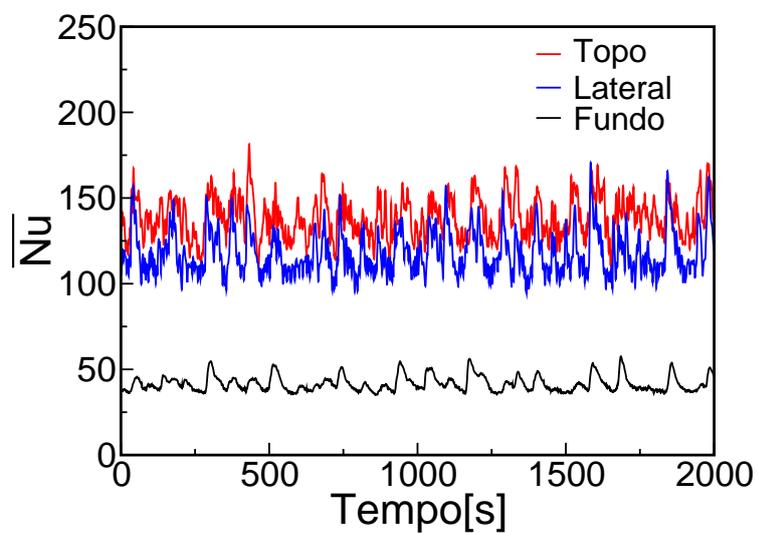


(b)

Figura 6.7: Histórico temporal dos valores de média espacial de  $\overline{Nu}$  ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo SST, para (a)  $Ra_i = 10^9$  e (b)  $Ra_i = 10^{11}$ .



(a)



(b)

Figura 6.8: Histórico temporal dos valores de média espacial de  $\overline{Nu}$  ao longo das paredes da cavidade quadrada, fornecidos por simulação com o modelo V2-f, para (a)  $Ra_i = 10^9$  e (b)  $Ra_i = 10^{11}$ .

Com o aumento do número de Rayleigh ( $Ra_i = 10^{11}$ ), o escoamento se tornou bastante instável, com muitas estruturas não estacionárias tanto no campo de velocidade quanto no campo de temperatura, conforme pode ser visto pelas figuras 6.15, 6.16, 6.17, 6.18, 6.19 e 6.20.

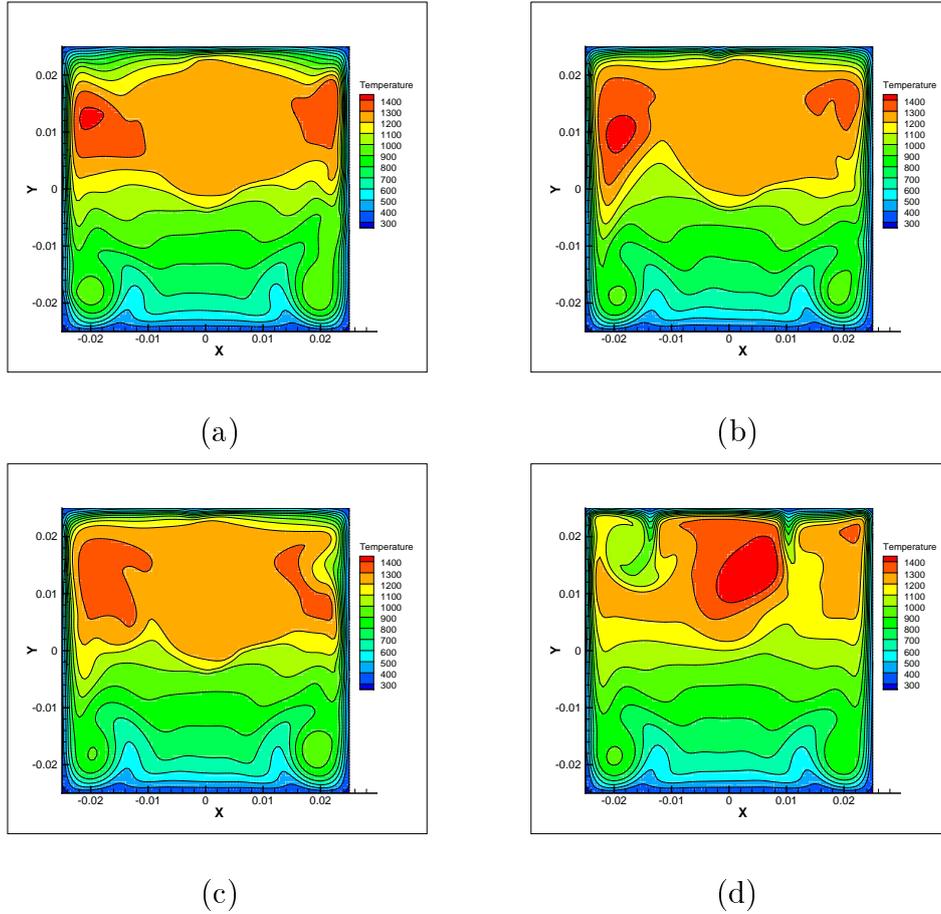
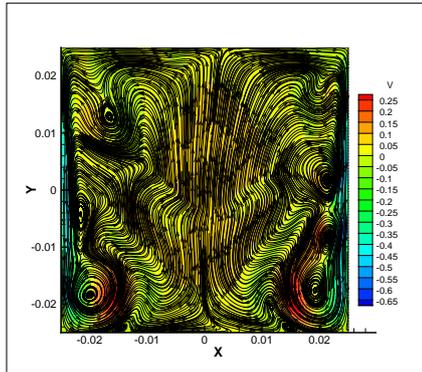
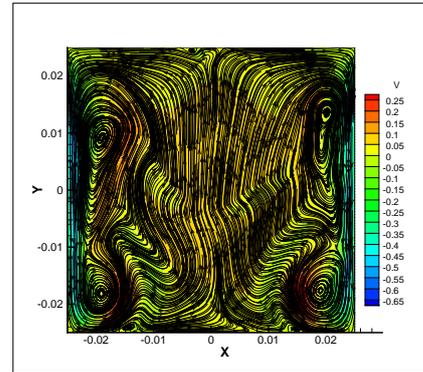


Figura 6.9: Campo de temperatura computado com o modelo SST para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação.

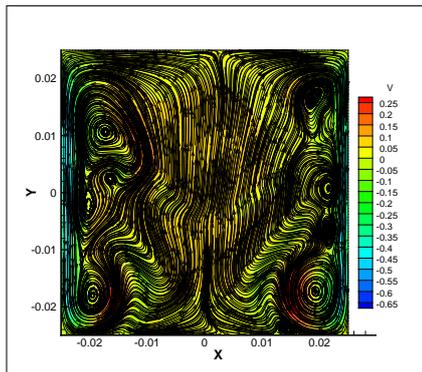
As figuras 6.21, 6.22 e 6.23 mostram os resultados de  $\overline{Nu}$  global em função de  $Ra_i$  fornecidos pelas simulações com os modelos de turbulência analisados por esse trabalho e também correlações empíricas e numéricas obtidas na literatura. Os valores de  $\overline{Nu}_{up}$  fornecidos pelo modelo SST tiveram melhor concordância com a correlação empírica de Lee et al. (2007) em relação aos demais modelos, enquanto



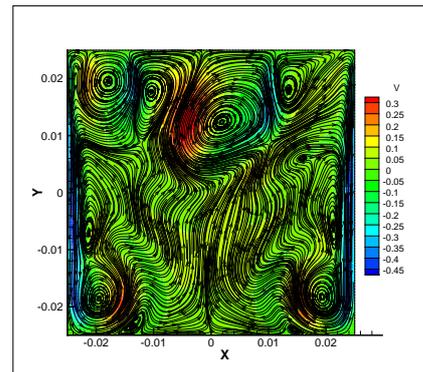
(a)



(b)

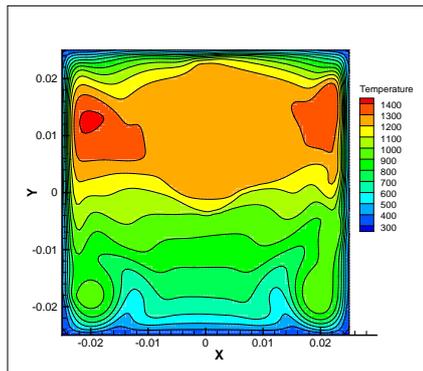


(c)

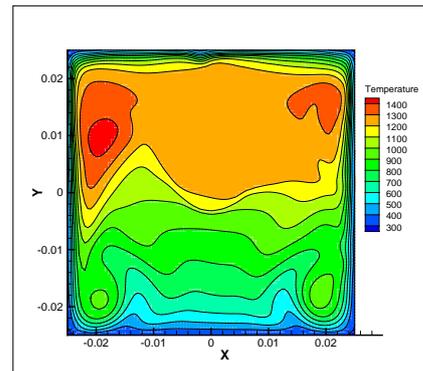


(d)

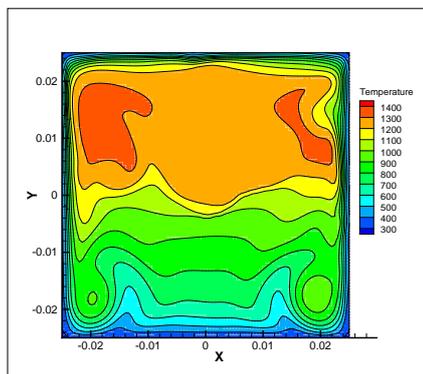
Figura 6.10: Componente vertical da velocidade computado com o modelo SST para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação.



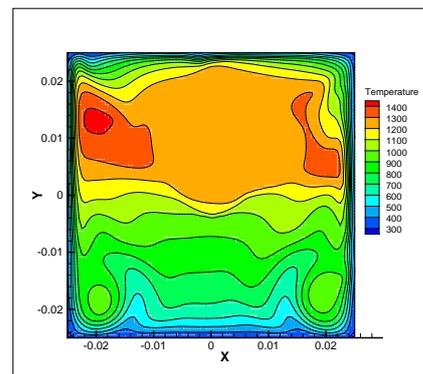
(a)



(b)

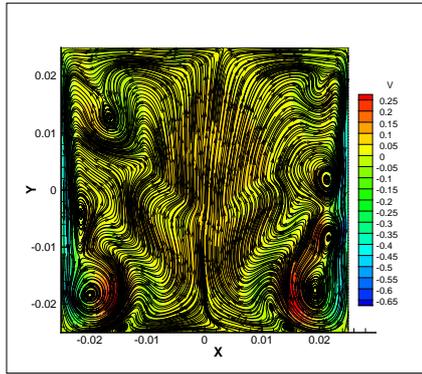


(c)

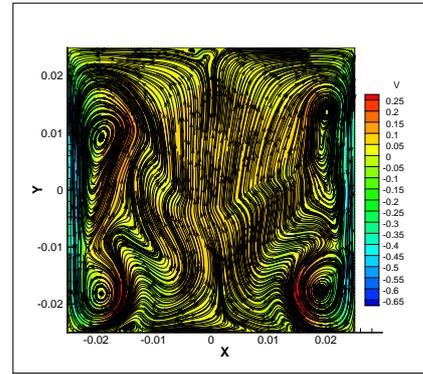


(d)

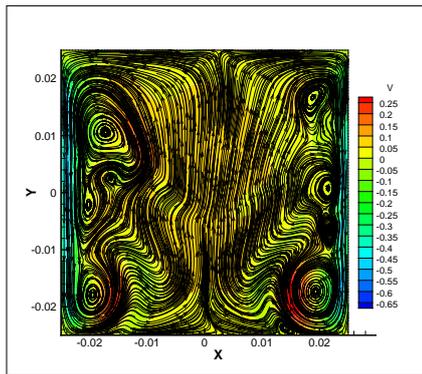
Figura 6.11: Campo de temperatura computado com o modelo LS para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação.



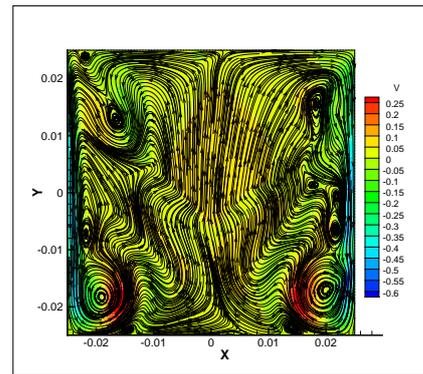
(a)



(b)

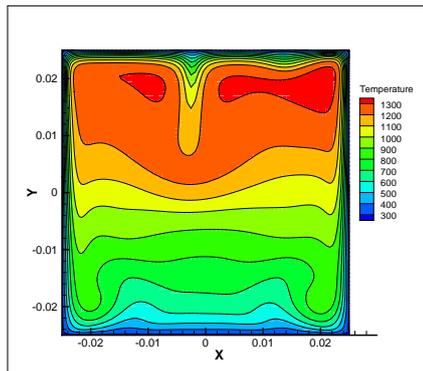


(c)

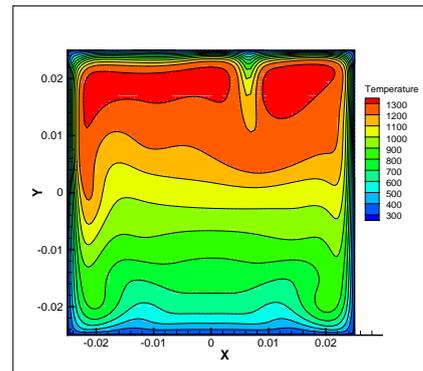


(d)

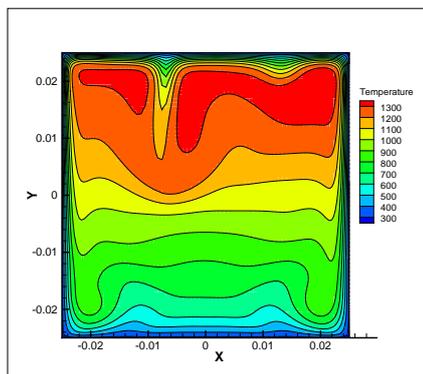
Figura 6.12: Componente vertical da velocidade computado com o modelo LS para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação.



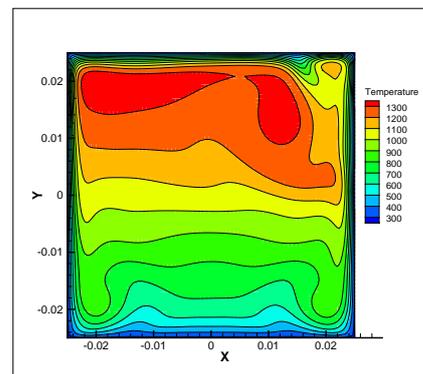
(a)



(b)

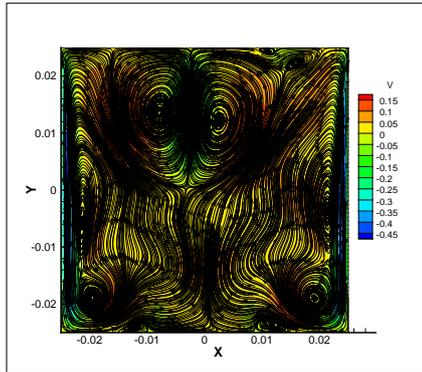


(c)

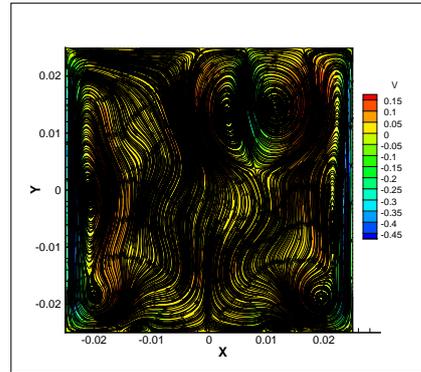


(d)

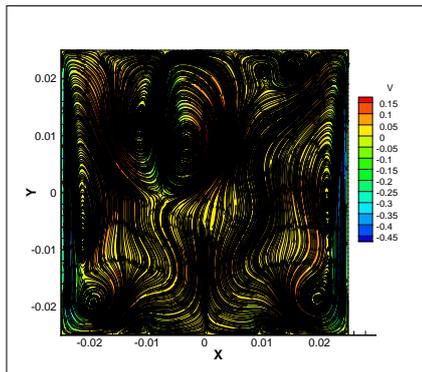
Figura 6.13: Campo de temperatura computado com o modelo V2f para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação.



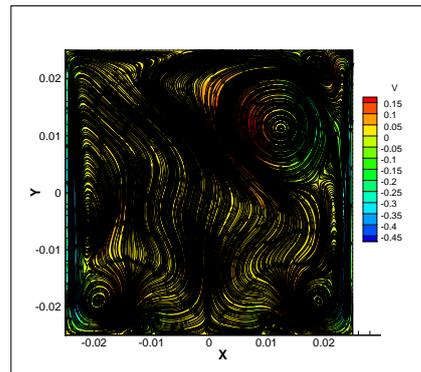
(a)



(b)

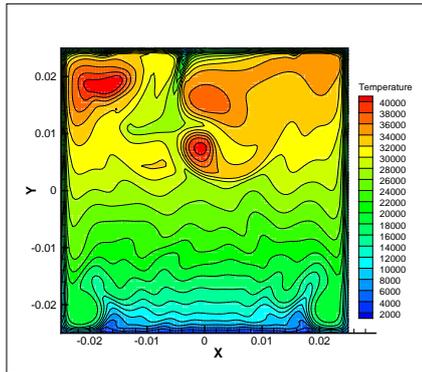


(c)

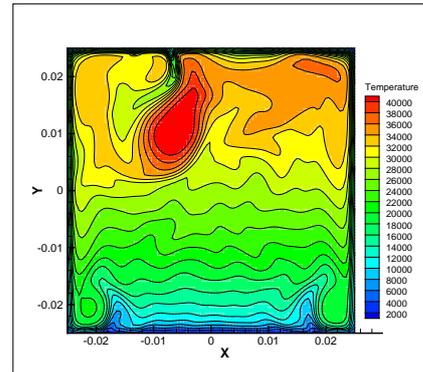


(d)

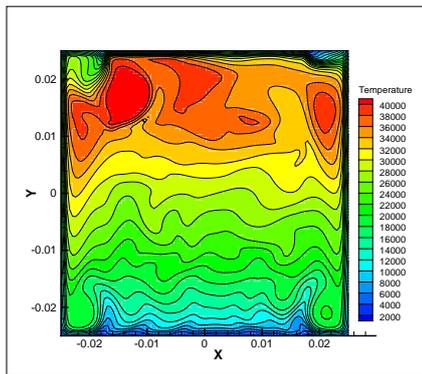
Figura 6.14: Componente vertical da velocidade computado com o modelo V2f para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  após (a) 500s, (b) 1000s, (c) 1500s and (d) 2000s de simulação.



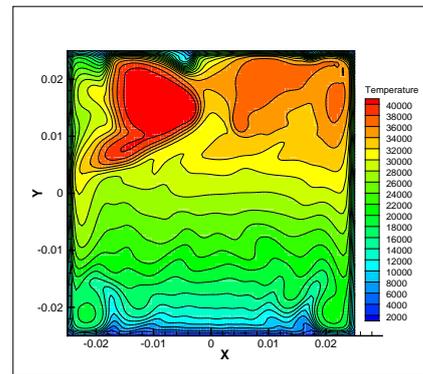
(a)



(b)

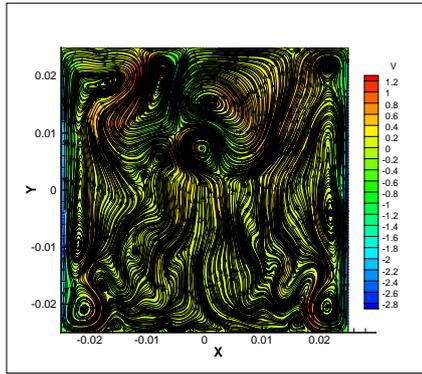


(c)

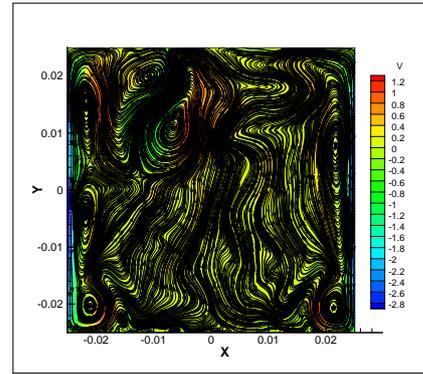


(d)

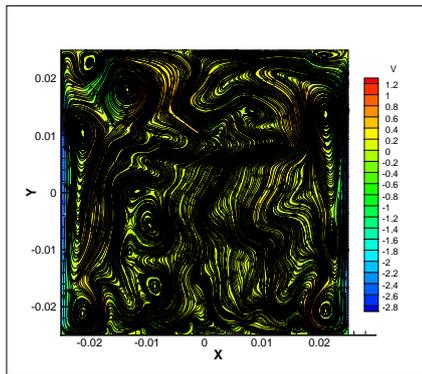
Figura 6.15: Campo de temperatura computado com o modelo SST para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$  após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação.



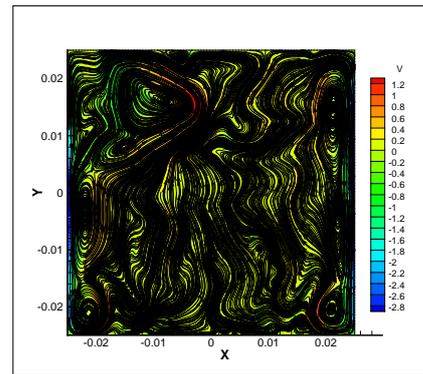
(a)



(b)

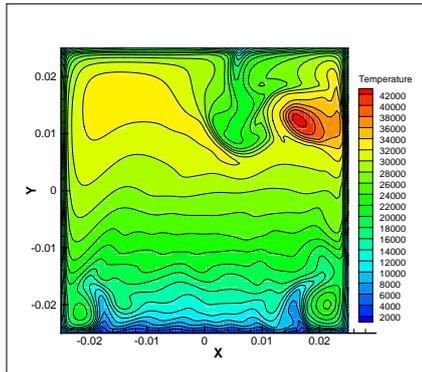


(c)

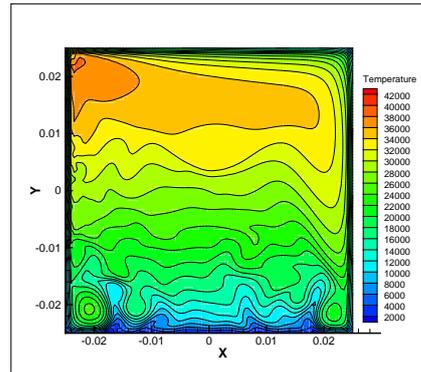


(d)

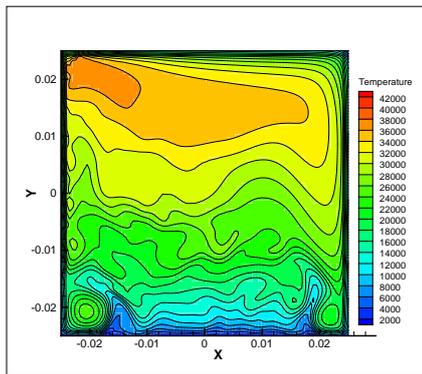
Figura 6.16: Componente vertical da velocidade computado com o modelo SST para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$  após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação.



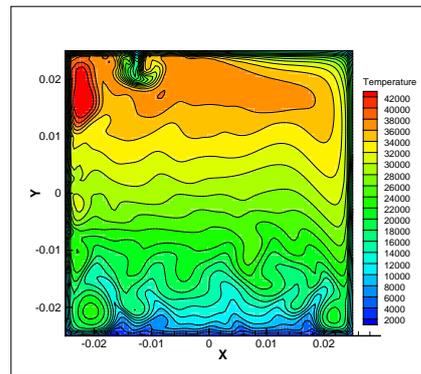
(a)



(b)

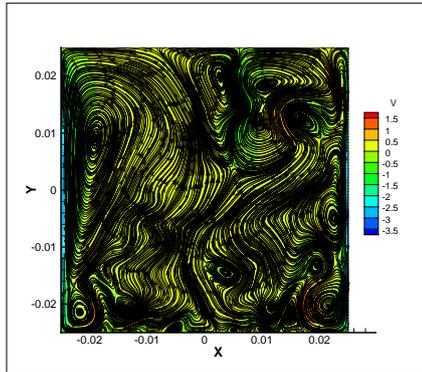


(c)

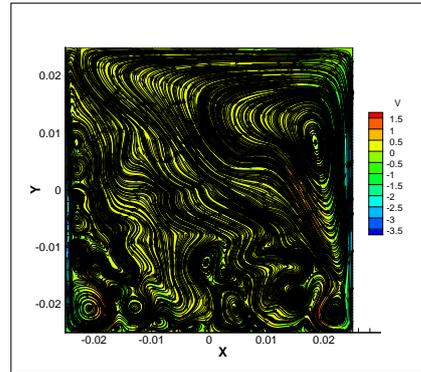


(d)

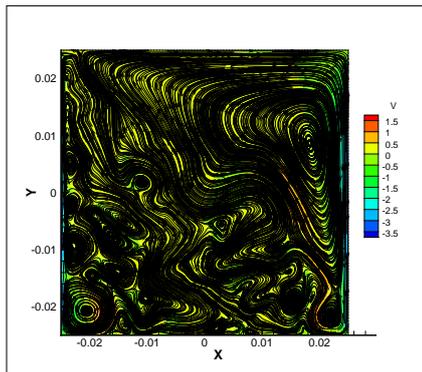
Figura 6.17: Campo de temperatura computado com o modelo LS para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$  após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação.



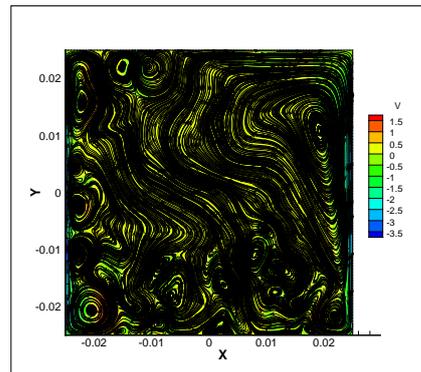
(a)



(b)

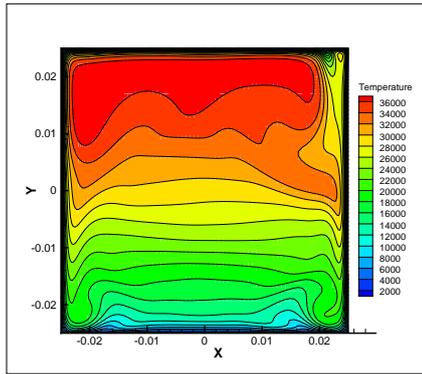


(c)

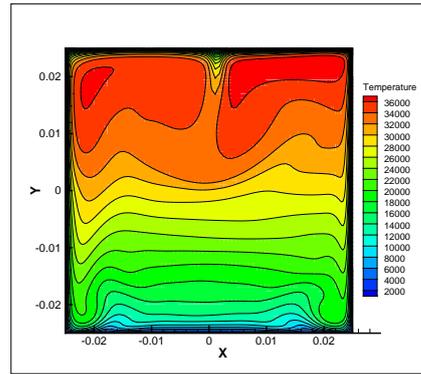


(d)

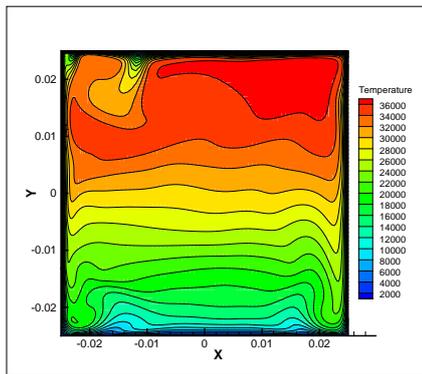
Figura 6.18: Componente vertical da velocidade computado com o modelo SST para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$  após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação.



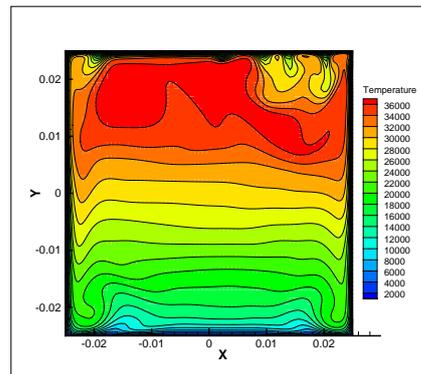
(a)



(b)

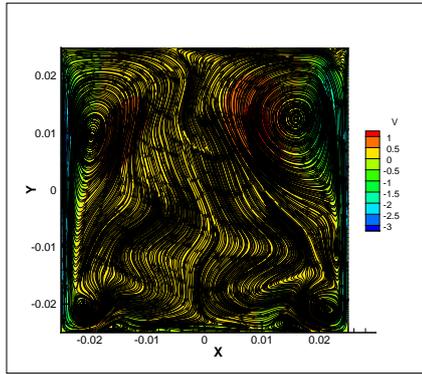


(c)

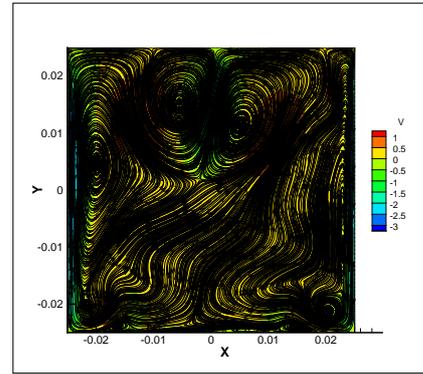


(d)

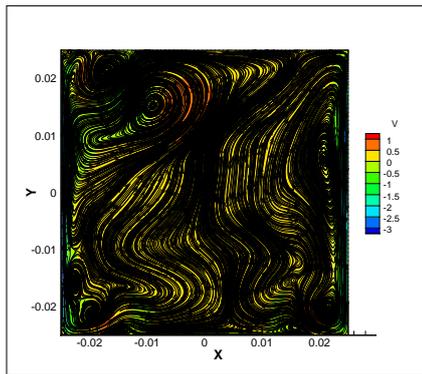
Figura 6.19: Campo de temperatura computado com o modelo V2-f para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$  após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação.



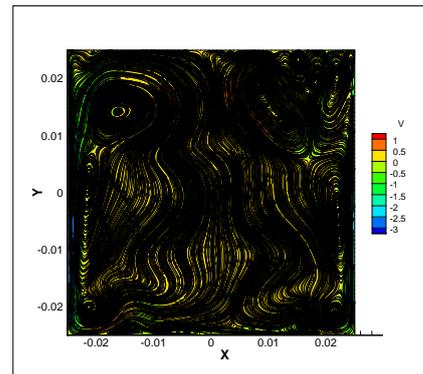
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.20: Componente vertical da velocidade computado com o modelo V2-f para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^{11}$  após (a) 1500s, (b) 3000s, (c) 4500s and (d) 6000s de simulação.

que, na região das paredes laterais, os valores de  $Nu_{sd}$  fornecidos pelo modelo k- $\varepsilon$  foram ligeiramente superiores aos valores fornecidos pelos demais modelos. O modelo k- $\varepsilon$  apresentou um valor muito superior de  $\overline{Nu}_{dn}$  em relação à correlação de Horvat et al. (2001) e aos demais modelos de turbulência, para o caso de  $Ra_i = 10^{11}$ . Tal fato ocorreu em consequência do modelo k- $\varepsilon$  ter apresentado um comportamento completamente instável, culminando em frequentes divergências numéricas durante toda a simulação.

De todos os modelos apresentados, o modelo V2-f foi o que apresentou melhor robustez, sem a necessidade de reduzir o fator de relaxação para garantir convergência e também com resultados em boa concordância com as correlações utilizadas como comparação. O modelo SST também mostrou-se adequado para as análises de convecção natural turbulenta, também com boa acurácia e robustez. O modelo LS apresentou problema de divergência para o caso de  $Ra_i = 10^{11}$ , mas que foi minimizado por meio dos fatores de relaxação para velocidade ( $\alpha_{fV} = 0,6$ ,  $k$  ( $\alpha_{fk} = 0,5$ ) e  $\varepsilon$  ( $\alpha_{f\varepsilon} = 0,4$ ). O modelo k- $\varepsilon$  mostrou-se o menos adequado para as análises de convecção natural turbulenta, visto que, para  $Ra_i > 10^{10}$ , as simulações foram muito instáveis e tiveram problemas de divergência da solução, a cada intervalo de aproximadamente 100 segundos.

Os resultados de Nusselt global em função de  $Ra_i$ , fornecidos por cada modelo de turbulência analisado, resultaram em correlações numéricas as quais foram obtidas por regressão linear com coeficiente de determinação de  $\approx 0,994$ , para todos os modelos.

Tabela 6.5: Correlações para números de Nusselt em função do número de Rayleigh para as diferentes paredes da cavidade, fornecidas pelos modelos turbulência k- $\varepsilon$ , LS, SST e V2-f

Modelos	$\overline{Nu}_{dn}$	$\overline{Nu}_{sd}$	$\overline{Nu}_{up}$
k- $\varepsilon$	$\overline{Nu}_{dn} = 0,126Ra_i^{0,22}$	$\overline{Nu}_{sd} = 0,418Ra_i^{0,22}$	$\overline{Nu}_{up} = 0,667Ra_i^{0,20}$
LS	$\overline{Nu}_{dn} = 0,913Ra_i^{0,12}$	$\overline{Nu}_{sd} = 0,324Ra_i^{0,23}$	$\overline{Nu}_{up} = 0,473Ra_i^{0,22}$
SST	$\overline{Nu}_{dn} = 0,795Ra_i^{0,13}$	$\overline{Nu}_{sd} = 0,403Ra_i^{0,22}$	$\overline{Nu}_{up} = 0,548Ra_i^{0,21}$
V2-f	$\overline{Nu}_{dn} = 0,559Ra_i^{0,15}$	$\overline{Nu}_{sd} = 0,419Ra_i^{0,22}$	$\overline{Nu}_{up} = 0,621Ra_i^{0,21}$

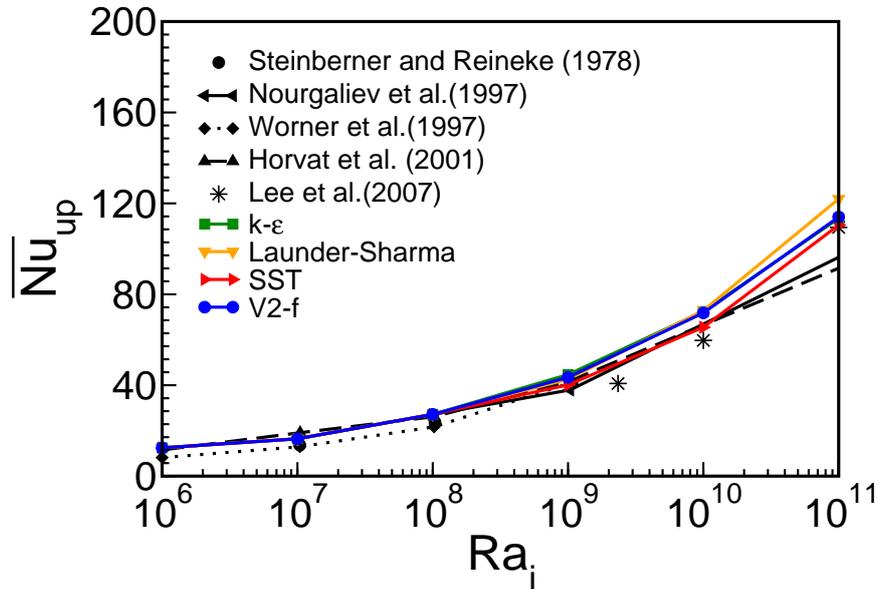


Figura 6.21: Valores da média espacial e temporal dos números de Nusselt ao longo da parede do topo da cavidade quadrada em função dos números de Rayleigh para  $Pr = 0,6$ .

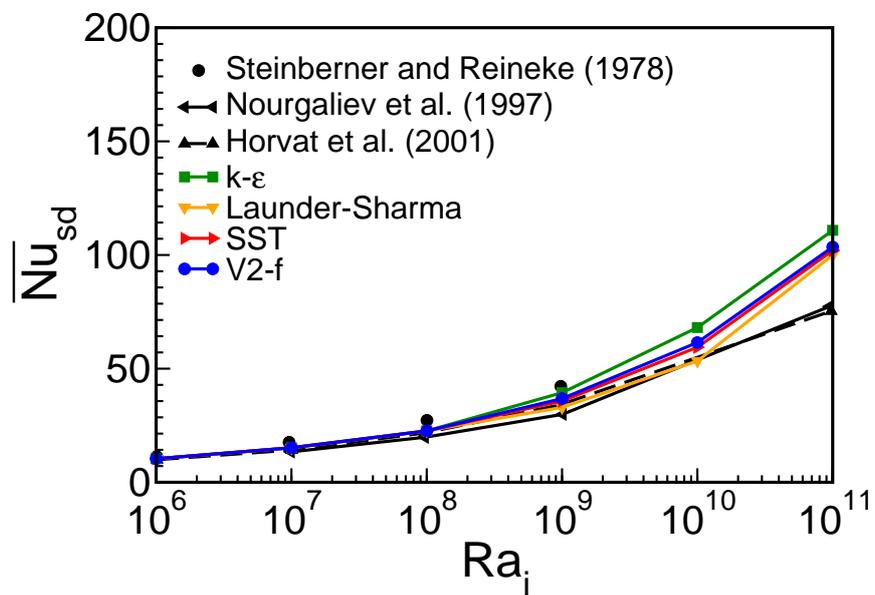


Figura 6.22: Valores da média espacial e temporal dos números de Nusselt ao longo da parede lateral da cavidade quadrada em função dos números de Rayleigh para  $Pr = 0,6$ .

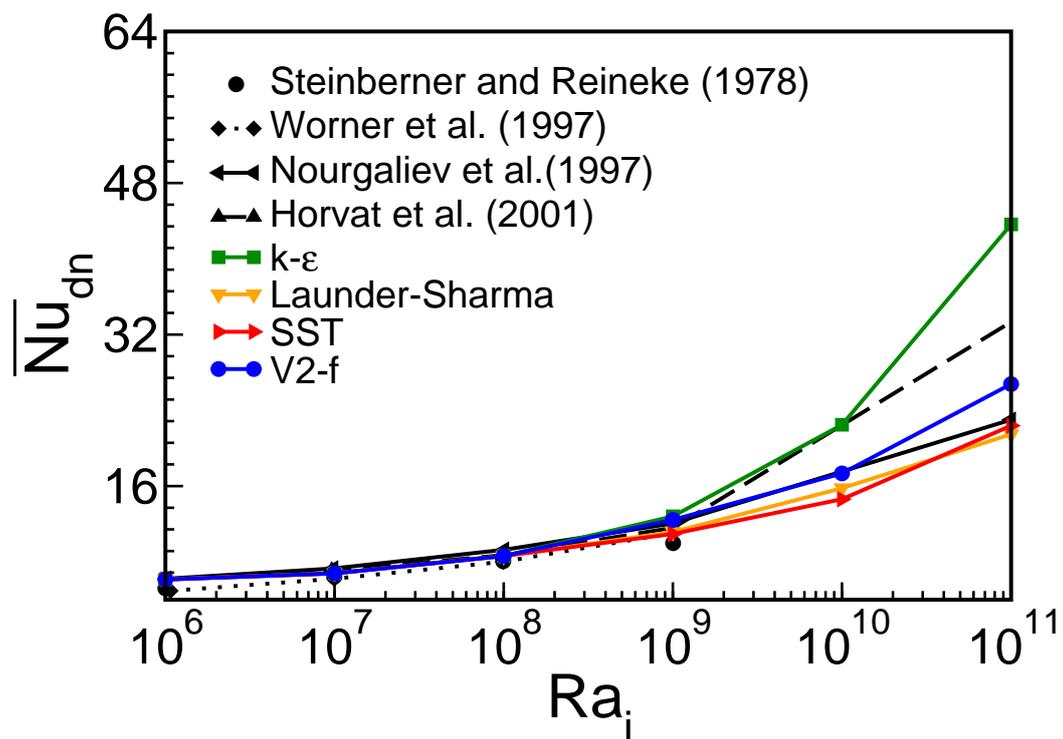


Figura 6.23: Valores da média espacial e temporal dos números de Nusselt ao longo da parede do fundo da cavidade quadrada em função dos números de Rayleigh para  $Pr = 0,6$ .

## 6.2 Aplicação de modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos.

As simulações apresentadas na seção anterior foram realizadas com o modelo SGDH para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos, o qual se mostrou com boa aplicação nas análises feitas para o problema de convecção natural gerada por fonte volumétrica de calor. Conforme apresentado no capítulo 5, os modelos anisotrópicos GGDH e AFM têm apresentado uma boa performance para estudos de convecção natural gerada por aquecimento diferenciado, porém não se encontra a aplicação dos mesmos no estudo de convecção natural em fluidos com fonte interna de calor.

Dessa forma, esse trabalho também objetivou analisar o comportamento das simulações apresentadas na seção anterior, com o modelo de turbulência V2-f e os modelos anisotrópicos GGDH e AFM. Fazendo uso dos mesmos coeficientes utilizados nos casos de validação dos modelos anisotrópicos na cavidade com aquecimento diferenciado, as simulações na cavidade quadrada com fonte volumétrica de calor requeriram fator de relaxação para a equação da variância de temperatura inferior ao utilizado nos testes de calibração ( $f_r \leq 0,1$ ), para garantir convergência da solução.

Embora o modelo AFM mostrou-se o mais robusto e acurato para os testes de calibração, o mesmo não ocorreu para o caso de convecção natural com fonte volumétrica de calor. Diferentes combinações de coeficientes foram testados, assim como diferentes esquemas de discretização numérica (diferença central, primeira e segunda ordem upwind), solvers lineares (PBiCG e smoothSolver) e escolhas de passo de tempo ( $10^{-2}$ ,  $10^{-3}$  e  $10^{-4}$ s), porém todas as tentativas resultaram em divergência da solução. O modelo GGDH foi capaz de fornecer soluções convergidas somente para o caso de  $Ra_i = 10^9$ , utilizando-se um passo de tempo de  $10^{-2}$  segundos, esquema de discretização de segunda ordem upwind para os termos convectivos, diferença central para os termos laplacianos e integração temporal por meio do método implícito de Euler.

A figura 6.24 mostra os históricos temporais dos valores de média espacial dos números de Nusselt ao longo da parede do topo  $\overline{Nu}_t$  fornecidos pelos modelos SGDH e GGDH, pelos quais observa-se que ambos modelos atingiram o regime

estatisticamente estacionário, com oscilações na mesma frequência.

Tanto o modelo GGDH, quanto o modelo SGDH forneceram os mesmos perfis dos fluxos de calor turbulentos, conforme mostrado pelas figuras 6.25 e 6.26, para o caso de  $Ra_i = 10^9$ . Esses resultados reforçam que o modelo isotrópico, apesar das suas possíveis deficiências para análises de convecção natural gerada por aquecimento diferenciado, apresenta um comportamento semelhante ao comportamento de um modelo anisotrópico para os cálculos dos fluxos turbulentos de calor em análises de convecção natural gerada por fonte interna de calor.

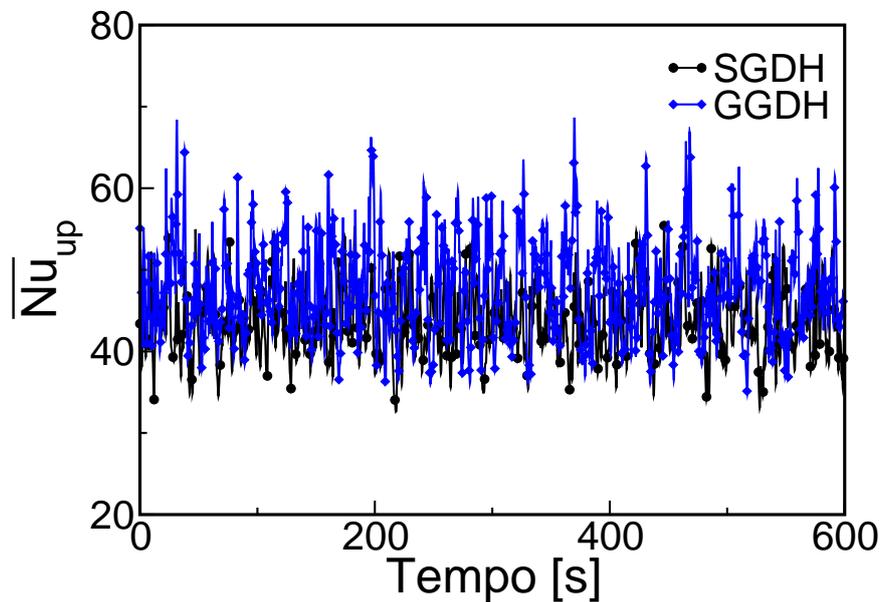


Figura 6.24: Históricos temporais dos valores de  $\overline{Nu}_t$  fornecidos pelo modelo de turbulência V2-f com os modelos GGDH e SGDH, para  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^9$  em uma cavidade quadrada com paredes isotérmicas e fonte volumétrica de calor.

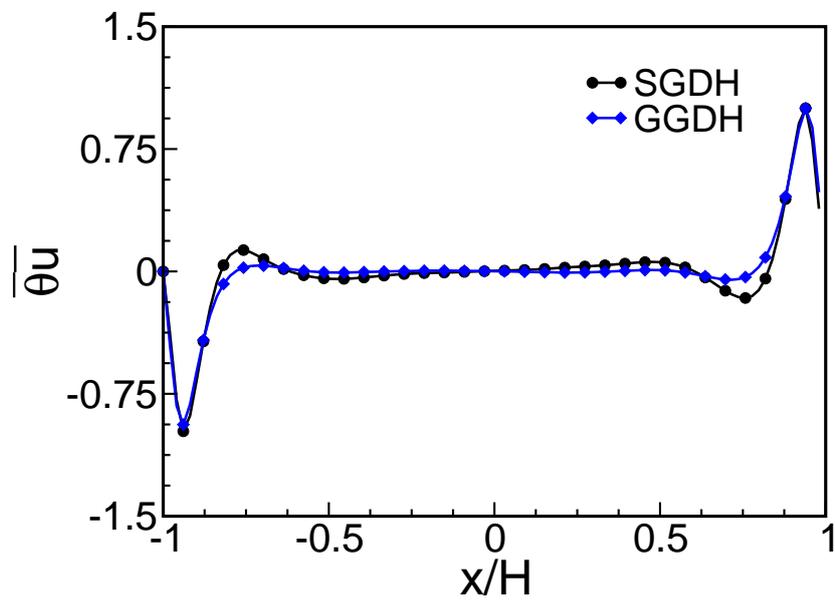


Figura 6.25: Distribuição local da média temporal do componente horizontal dos fluxos de calor turbulentos ( $\overline{\theta u}$ ) ao longo de uma linha horizontal central.

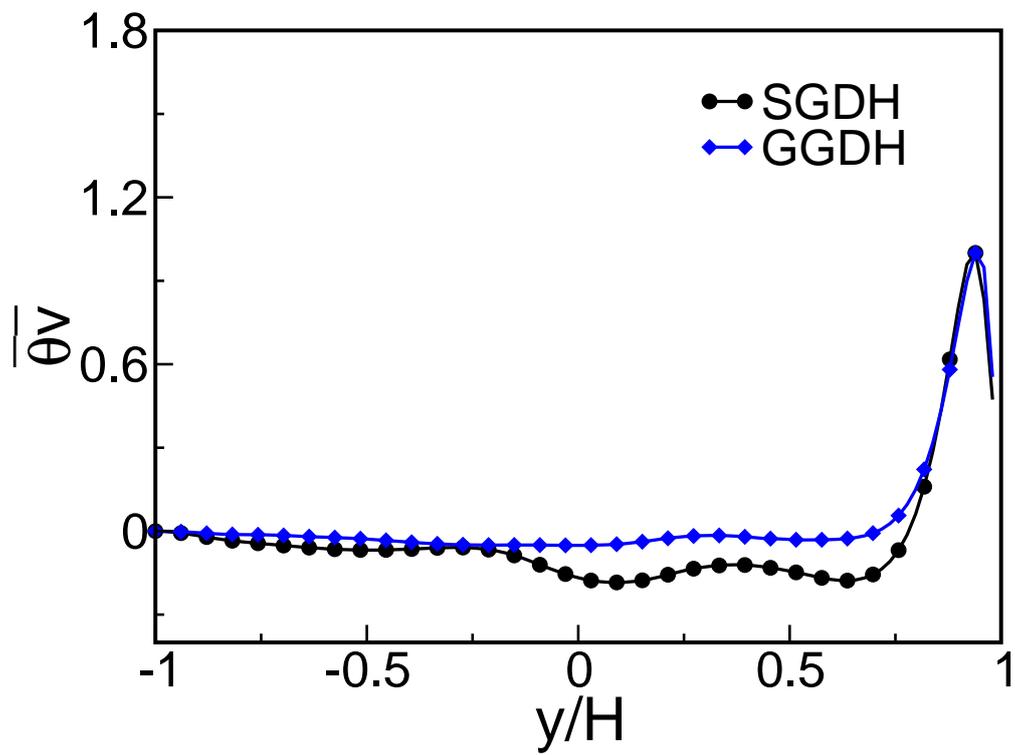


Figura 6.26: Distribuição local da média temporal do componente vertical dos fluxos de calor turbulentos ( $\overline{\theta v}$ ) ao longo de uma linha vertical central.

## Capítulo 7

# Simulações de validação em geometria representativa do experimento BALI

Dentre vários experimentos já realizados em geometrias representativas do plenum inferior do vaso de pressão, como o experimento UCLA (Asfia e Dhir, 1996, Asfia et al., 1996), LIVE (Buck et al., 2010), ACOPO (Theofanous et al., 1997a), COPO II-AP (Halle et al., 1999), SIMECO (Gubaidullin, 2002), RASPLAV (Asmolov et al., 2001) e SIGMA SC (Lee e Suh, 2003), o experimento BALI (Bonnet, 1999) foi o selecionado, visto que o mesmo forneceu dados locais de temperatura em condições de acidente severo com  $Ra_i$  na faixa de  $10^{15} - 10^{17}$ , os quais se mostraram adequados para validação do modelo V2-f juntamente com o modelo SGDH para o tratamento dos fluxos turbulentos de calor em uma faixa de regime de escoamento altamente turbulento.

A geometria do experimento BALI, metade de um semicírculo (mostrada pela Figura 7.1), foi reproduzida tanto com a razão de aspecto ( $H/R$ ) 1 : 1, BALI-1 (Figura 7.2-a) quanto 1 : 2, BALI2 (Figura 7.2-b). Três malhas foram analisadas em simulações de convergência de malha na cavidade BALI-2 com  $Ra_i = 10^{12}$ , todas com refinamento nas regiões próxima à parede. As malhas foram geradas no programa ICEM-12.0 e importadas pelo OpenFOAM por meio da utilidade *fluentMeshToFoam*.

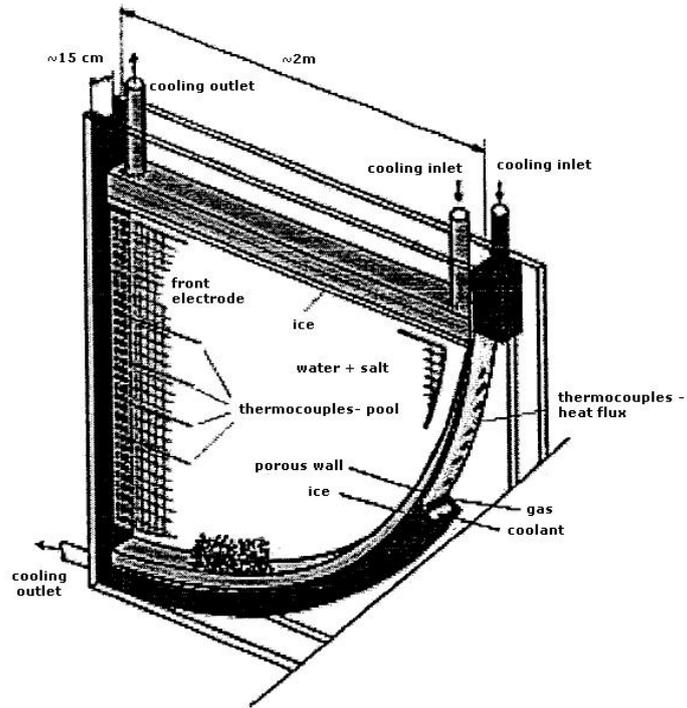


Figura 7.1: Esboço do experimento BALI (Bernaz et al., 2001).

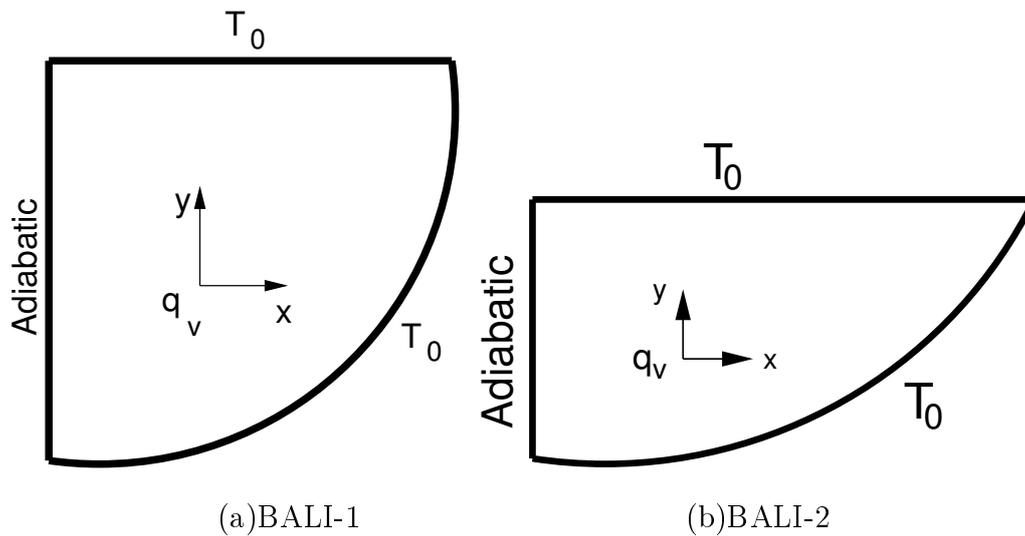


Figura 7.2: Esquemas das geometrias representativas do experimento BALI (Vieira et al., 2013).

Os dados estatísticos das malhas analisadas, assim como os valores globais de  $\overline{Nu}_{dn}$ , os quais foram utilizados nos mesmos cálculos feitos nas análises de convergência de malha na cavidade quadrada (apresentados no capítulo 5) são mostrados pela tabela 7.3. De acordo com a Figura 7.3 e a tabela 7.3 observou-se que as soluções foram independentes da malha, estiveram na faixa assintótica de convergência, visto que  $c_a$  apresentou um valor de aproximadamente um e forneceram baixos valores estimados de erros fracionais ( $E_1$  e  $E_2$ ), os quais demonstram boa acurácia. A malha M-2 foi a selecionada para as simulações tanto na geometria BALI-1 quanto BALI-2.

Tabela 7.1: Sensibilidade de malha com o modelo V2-f e SGDH, na cavidade BALI-2 contendo fluido com  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{12}$ : dados das malhas e valores globais de  $\overline{Nu}_{dn}$

Malha	Nós	Elementos	$\overline{Nu}_{dn}$
M-1	298602	148603	28,3944
M-2	383402	190903	35,9111
M-3	560522	279323	34,1049

Tabela 7.2: Sumário dos critérios avaliados na análise de sensibilidade de malha com o modelo V2-f e SGDH, na cavidade BALI-2 contendo fluido com  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{12}$ .

$f_{ex}$	$c_a$	$E_1$	$E_2$
34,6762	0,9497	0,01675	0,06621

As condições de contorno de ambas geometrias, BALI-1 e BALI-2 foram paredes isotérmicas ( $T = 273K$ ), representando a camada de óxido que se forma ao redor do corium em contato com as paredes do vaso de pressão, a qual foi reproduzida como uma camada de gelo presente em todas as paredes da piscina do experimento. As simulações na geometria BALI-1 foram realizadas em uma faixa de  $Ra_i$  de  $10^8 - 10^{16}$ , enquanto que na geometria BALI-2, a faixa de  $Ra_i$  analisada foi de  $10^8 - 10^{15}$ .

Em ambas geometrias, simulações laminares ocorreram na faixa de  $Ra_i = 10^8 - 10^{11}$ . Os casos laminares foram simulados com passo de tempo de  $10^{-2}s$  e atingiram

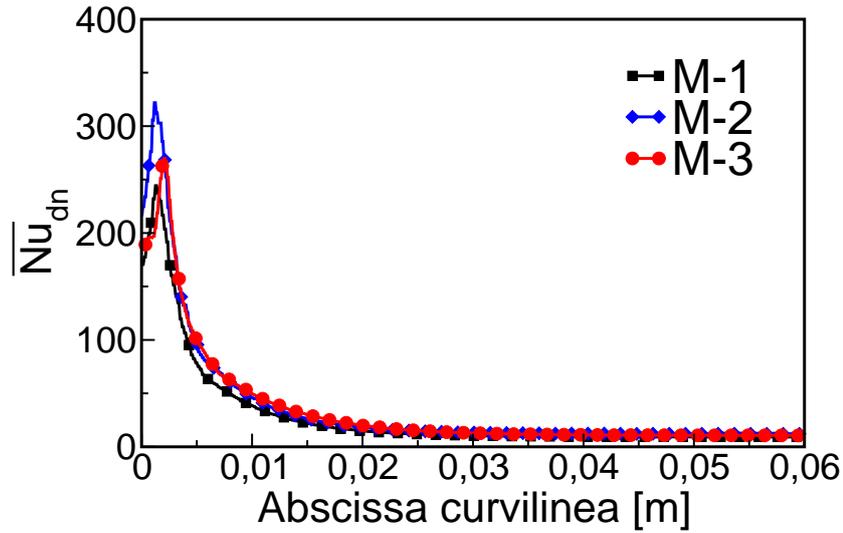


Figura 7.3: Distribuição de  $\overline{Nu}_{dn}$  ao longo do fundo da cavidade BALI-2, para  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{12}$ , fornecido pelo modelo V2-f com SGDh.

o regime estatisticamente estacionário após um período de aproximadamente 3h. Com o aumento do número de  $Ra_i$ , houve a necessidade de reduzir o passo de tempo para  $10^{-3}$ s, aumentando o tempo de simulação para  $\approx 8$ h e, chegando à 5 dias, para os valores mais altos de  $Ra_i$  ( $10^{16}$  para a geometria BALI-1 e  $10^{15}$  para a geometria BALI-2). A integração temporal foi realizada pelo método implícito de Euler, os termos convectivos foram tratados pelo método de segunda ordem upwind e o termos laplacianos foram discretizados por diferença central.

A malha M-3 foi utilizada nas simulações com  $Ra_i > 10^{13}$ , as quais foram realizadas em paralelo. O OpenFOAM apresenta diferentes métodos de partição do domínio e distribuição de cada parte da geometria nos processadores. O método *hierarchical*, o qual divide o domínio em pedaços para cada direção cuja ordem de divisão é especificada pelo usuário, foi o utilizado por esse trabalho, e definido no dicionário *decomposerDict*, localizado no diretório *system*. Por meio da utilidade *decomposePar*, as simulações foram particionadas em 6 processadores.

O desenvolvimento da camada limite térmica ao longo da abscissa curvilínea (direção indicada pela Figura 7.4) foi analisado tanto para a geometria BALI-1 e

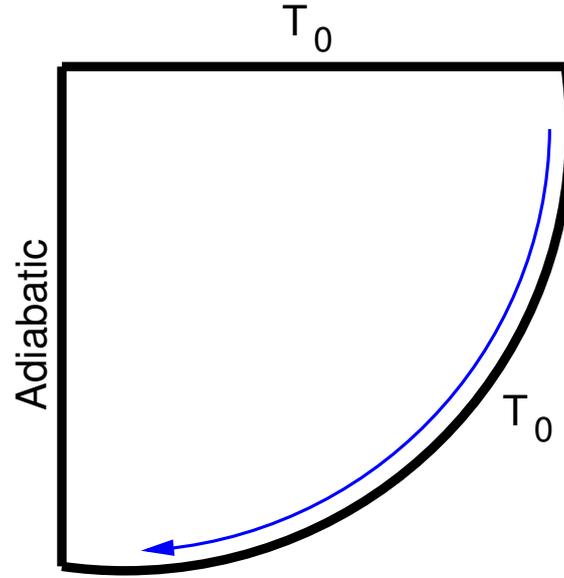


Figura 7.4: Direção da abscissa curvilínea (Vieira et al., 2013).

BALI-2. A espessura da camada limite térmica ( $\delta_{th}$ ) foi calculada com base nos valores de  $\overline{Nu}_{dn}$ , conforme mostrado pelas equações (7.1), (7.2) e (7.3).

$$\delta_{th} = \frac{\lambda}{h}, \quad (7.1)$$

sendo  $\lambda$  a condutividade térmica e  $h$  o coeficiente de transferência de calor, o qual se relaciona com o número de Nusselt ( $Nu$ ) da seguinte forma,

$$h = \frac{\overline{Nu}_{dn}\lambda}{H}, \quad (7.2)$$

Substituindo a equação (7.2) na equação (7.1), obtém-se a relação de  $\delta_{th}$  com  $\overline{Nu}_{dn}$ ,

$$\delta_{th} = \frac{H}{\overline{Nu}_{dn}}, \quad (7.3)$$

Observa-se pela Figura 7.5 que o comportamento da camada limite térmica foi semelhante tanto na geometria BALI-1, quanto na geometria BALI-2, ou seja, com o aumento do número de  $Ra_i$ ,  $\delta_{th}$  tornou-se menos espessa, proporcionando um aumento na transferência de calor, conforme é mostrado na Figura 7.6.

Comparando-se os valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelas simulações nas geometrias BALI 1 e 2, de acordo com os dados mostrados na tabela 7.3, observa-se que, para

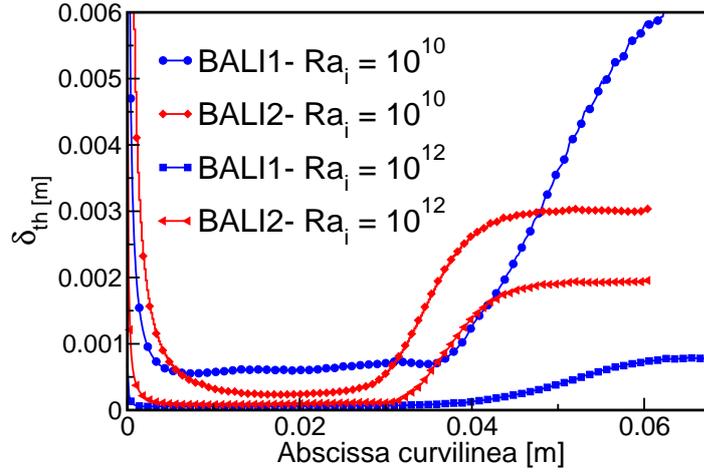


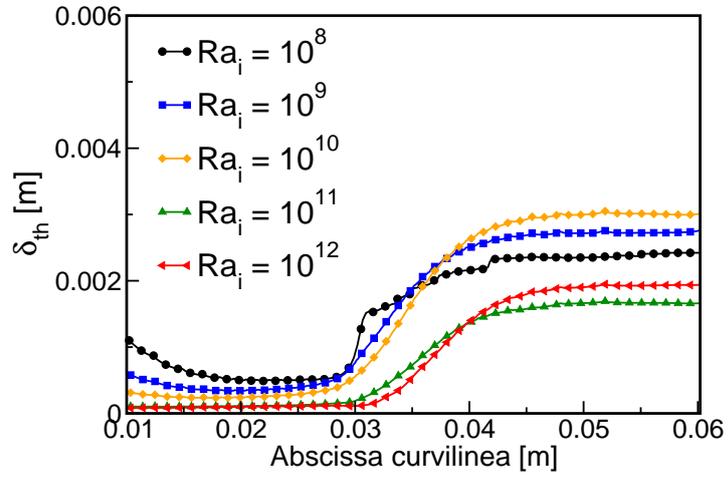
Figura 7.5: Desenvolvimento da camada limite térmica ao longo da abscissa curvilínea nas geometrias BALI1 e BALI2, para  $Ra_i = 10^{10}$  e  $10^{12}$ .

os valores de  $Ra_i$  na faixa de regime laminar e baixa turbulência, a razão de aspecto não apresentou muita influência na transferência de calor (os valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  foram próximos para cada uma das geometrias analisadas, ligeiramente maiores para a geometria com maior razão de aspecto). Todavia, quando o regime tornou-se altamente turbulento, a razão de aspecto apresentou uma maior influência no comportamento térmico do fluido, visto que, para a geometria com menor razão de aspecto (BALI-2), a transferência de calor foi mais intensa que na geometria BALI-1.

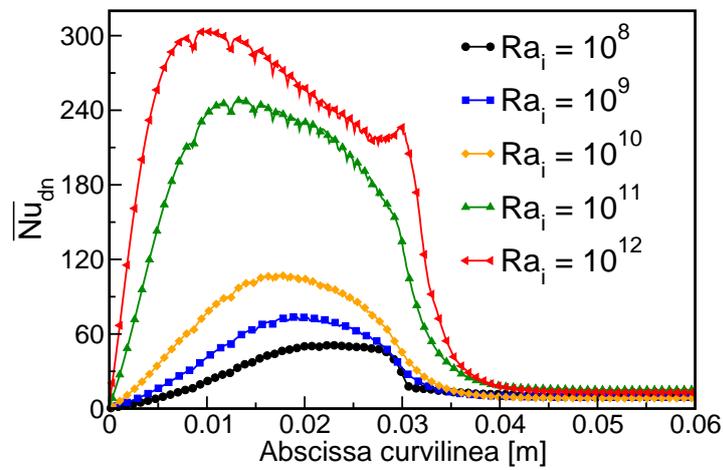
Tabela 7.3: Análise da razão de aspecto:  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelas simulações nas geometrias BALI-1 e BALI-2, com o modelo V2-f e SGDH, na faixa de  $Ra_i$  de  $10^{10}$  à  $10^{14}$ .

$Ra_i$	BALI-1 ( $H/R = 1$ )	BALI-2 ( $H/R = 0,5$ )
$10^{10}$	16,535508	13,78563
$10^{11}$	28,8406	27,14984
$10^{12}$	47,92628	44,427578
$10^{14}$	161,4883	248,8360

A análise dos modelos anisotrópicos GGDH e AFM para o tratamento dos fluxos de calor turbulentos também foi realizada, em dois casos de turbulência com



(a)



(b)

Figura 7.6: (a) Espessura da camada limite térmica em função de  $Ra_i$  e (b) distribuição de  $\overline{Nu}_{dn}$  ao longo da parede do fundo da cavidade BALI-2, na faixa de  $Ra_i = 10^8 - 10^{12}$ .

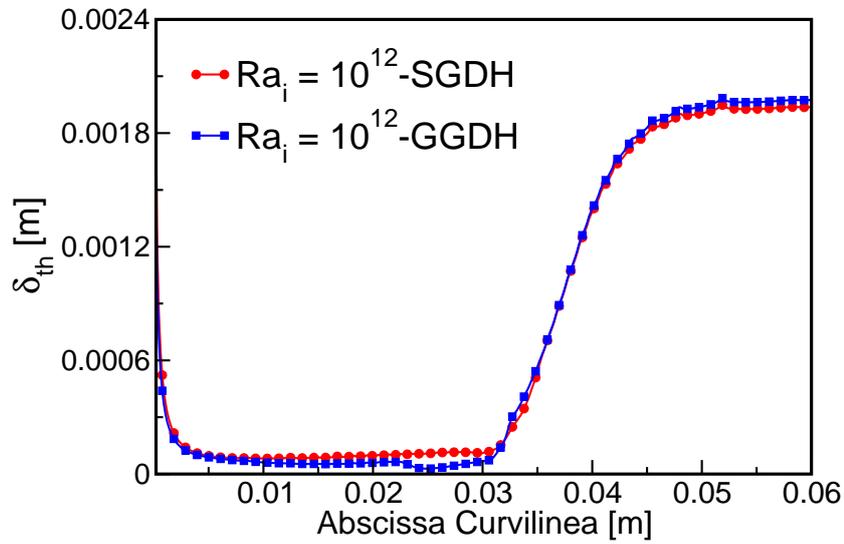
$Ra_i = 10^{11}$  e  $10^{12}$  na cavidade BALI-2. O modelo AFM não apresentou um bom desempenho e resultou em divergência, mesmo aumentando o refinamento da malha, reduzindo o passo de tempo e modificando os coeficientes da Equação (3.75).

O modelo GGDH mostrou-se mais estável em relação ao modelo AFM e apresentou convergência de solução, utilizando-se a malha M-2 e passo de tempo de 0,01s, para os valores de  $Ra_i \leq 10^{12}$ . O regime estatisticamente estacionário (cuja oscilações do escoamento apresentam frequências próximas umas das outras, conforme mostrado na Figura 7.8) foi atingido após  $\approx 2h$  de simulação, porém, após uma hora do mesmo ter sido atingido, a simulação apresentou um pico nos gradientes de temperatura na região próxima do fundo da cavidade, ocasionando em divergência da solução e, valores próximos de  $\overline{Nu}_{dn}$ , para o caso de  $Ra_i = 10^{12}$ , comportamento que pode ser observado pela Figura 7.7-b. Tal pico pode ter sido ocasionado pela malha, a qual possivelmente precisa ser mais refinada para os modelos anisotrópicos, quanto a um grande passo de tempo, por exemplo, deixando claro que os modelos anisotrópicos requerem um cuidado maior quanto a tais detalhes de simulação, em comparação com o modelo isotrópico SGDh.

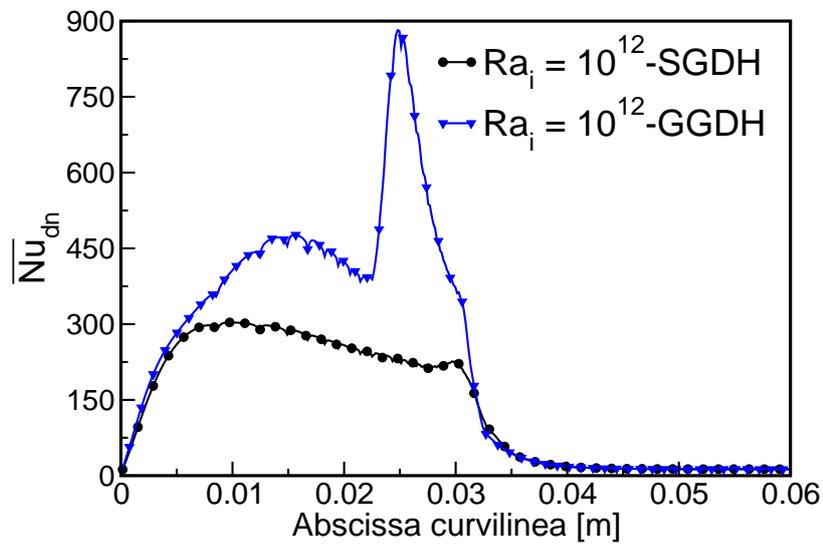
Os valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelo modelo GGDH foram ligeiramente superiores aos fornecidos pelo modelo SGDh, de acordo com os dados mostrados pela tabela 7.4. Tanto o modelo GGDH e SGDh apresentaram o mesmo comportamento do desenvolvimento da camada limite térmica, conforme visto pela Figura 7.7-a. As simulações com  $Ra_i > 10^{13}$  apresentaram convergência de solução somente com o modelo SGDh, reforçando a observação de que os modelos anisotrópicos não apresentam um bom desempenho para convecção natural gerada por fonte volumétrica de calor.

Tabela 7.4: Comparação dos resultados de  $\overline{Nu}_{dn}$  fornecidos pelo modelo V2-f-SGDh e V2-f-GGDH, em simulações na geometria BALI-2, com  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{11}$  e  $10^{12}$ .

	$Ra_i = 10^{11}$		$Ra_i = 10^{12}$	
	SGDH	GGDH	SGDH	GGDH
$\overline{Nu}_{dn}$	20,0403	30,87	42,3839	54,8389



(a)



(b)

Figura 7.7: (a) Espessura da camada limite térmica e (b) distribuição local dos valores  $\overline{Nu}_{dn}$  ao longo da superfície do fundo da cavidade BALI-2, fornecidas por simulações com o modelo V2-f-SGDH e V2-f-GGDH, para  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{12}$ .

Todas as simulações discutidas nesse capítulo atingiram o regime estatisticamente estacionário, conforme visualizado pela Figura 7.8, a qual mostra o histórico temporal dos valores médios de Nusslet ao longo do fundo da cavidade fornecidos pelos casos com  $Ra_i = 10^{14}$ ,  $10^{15}$  e  $10^{16}$ .

Os valores globais de  $\overline{Nu}_{dn}$  foram comparados com dados obtidos de correlações empíricas e numéricas apresentadas no relatório apresentado por Rempe et al. (2008). De acordo com a Figura 7.9, os resultados fornecidos pelo modelo V2-f-SDGH estiveram em boa concordância com os outros trabalhos, tanto para a geometria BALI-1 quanto para a geometria BALI-2. Os resultados numéricos fornecidos pelas simulações com o modelo de turbulência V2-f com o modelo SGDh forneceram correlações de  $\overline{Nu}_{dn}$  em função de  $Ra_i$ , conforme mostrados pelas equações (7.4) e (7.5), as quais apresentam um coeficiente de determinação de 0,99, indicando uma boa representação dos dados obtidos.

- Correlação numérica gerada pelos resultados na cavidade BALI-1.

$$\overline{Nu}_{dn} = 0,01Ra_i^{0,3778} \quad (7.4)$$

- Correlação numérica gerada pelos resultados na cavidade BALI-2.

$$\overline{Nu}_{dn} = 0,01Ra_i^{0,3123} \quad (7.5)$$

A distribuição local da temperatura média temporal ao longo da profundidade da cavidade BALI-2 foi comparada com os dados experimentais fornecidos por Bonnet (1999). Tanto os dados experimentais quanto os numéricos foram obtidos ao longo de uma linha vertical localizada a 10 cm da parede adiabática. A Figura 7.10 mostra uma boa concordância com os dados experimentais, apesar de que na região próxima do fundo, observa-se uma certa diferença entre ambos. Tal diferença possivelmente deve-se à uma interferência na medida da temperatura provocada pela camada de gelo formada ao longo das paredes, próximas às termopás.

De forma geral, foi possível concluir que o modelo de turbulência V2-f mostrou-se adequado para as análises de convecção natural altamente turbulentas ( $Ra_i > 10^{14}$ ), assim como o modelo SGDh para os cálculos dos fluxos de calor turbulentos.

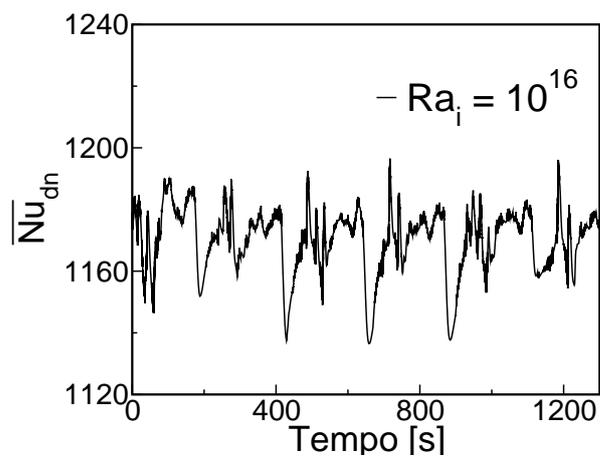
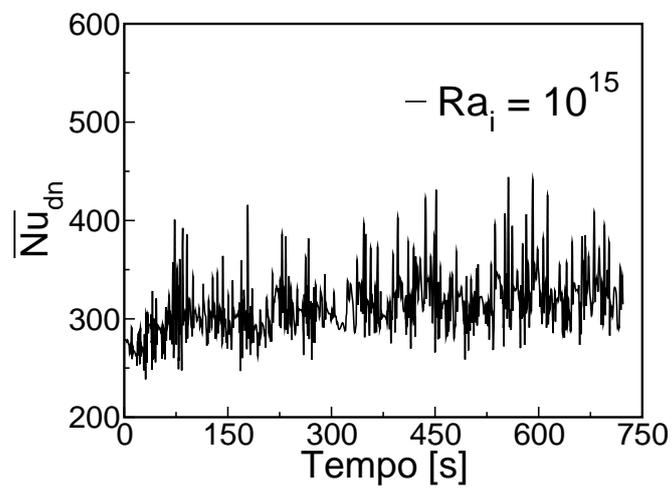
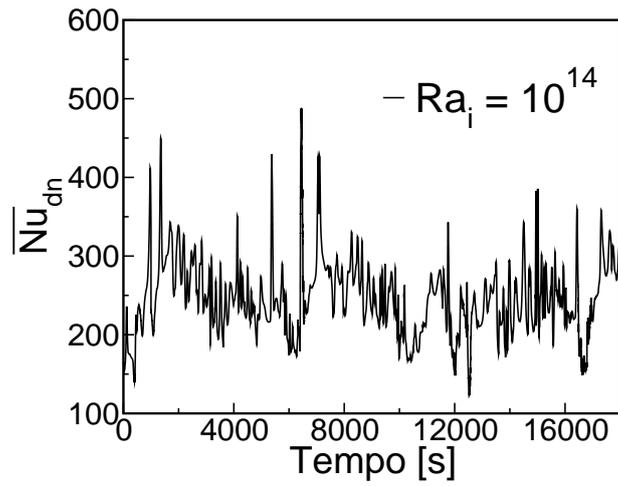
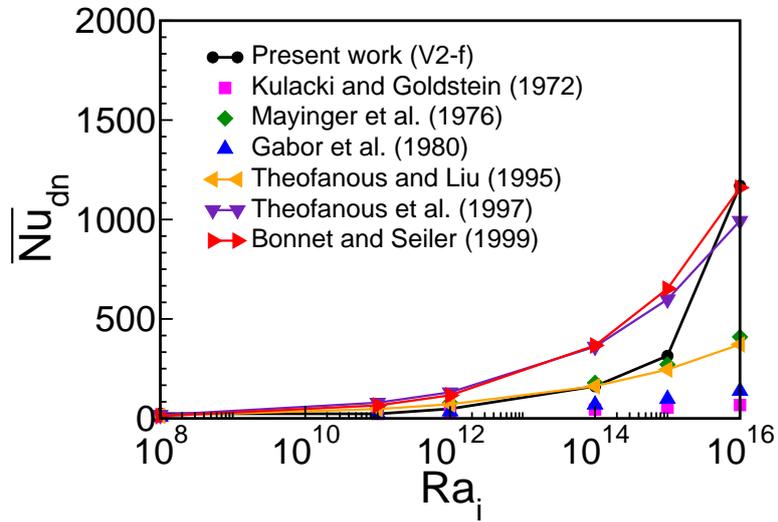
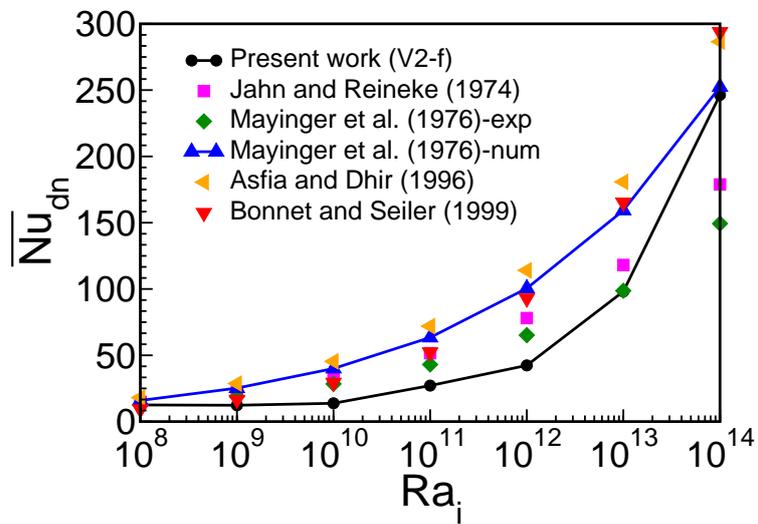


Figura 7.8: Histórico temporal da média espacial do número de Nusselt ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) ao longo da parede do fundo da cavidade: BALI-2 com (a)  $Ra_i = 10^{14}$ , BALI-1 com (b)  $Ra_i = 10^{15}$  e (c)  $Ra_i = 10^{16}$



(a)



(b)

Figura 7.9: Número de Nusselt ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) global em função do número de Rayleigh interno ( $Ra_i$ ): (a) BALI-1 e (b) BALI-2.

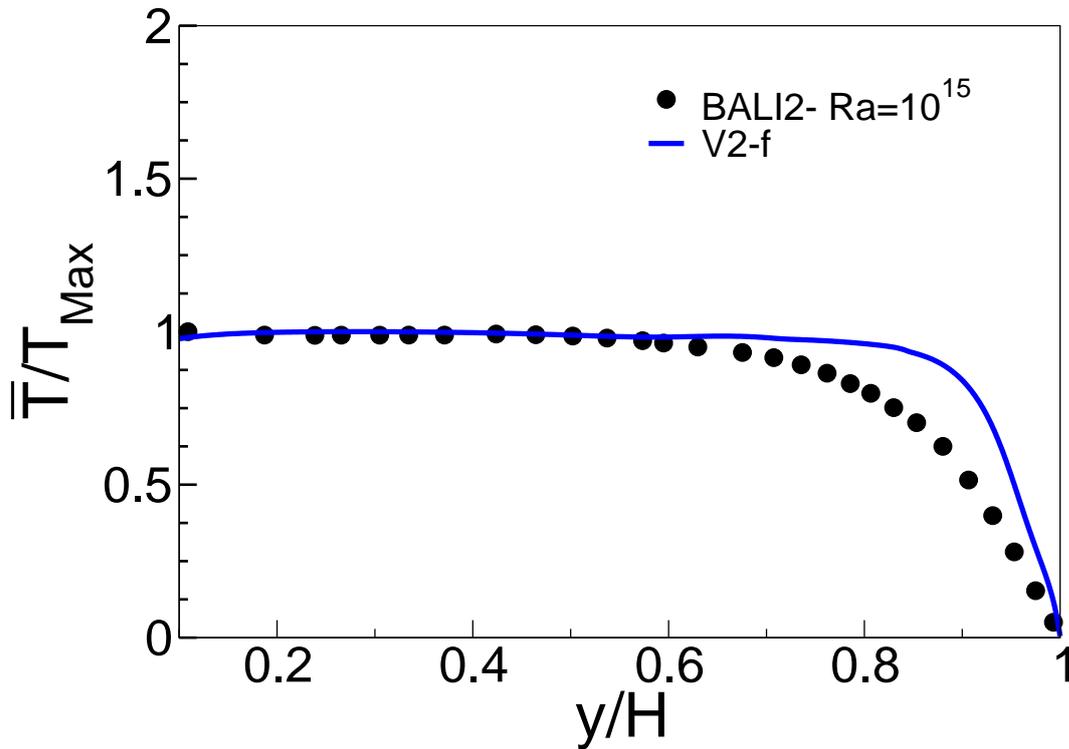
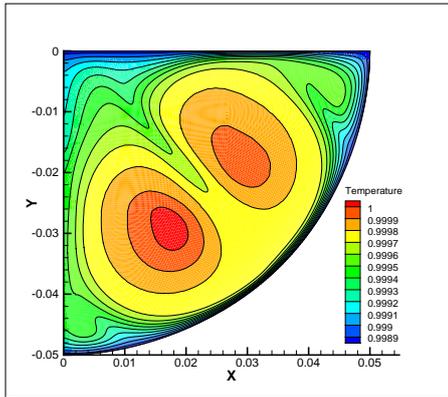
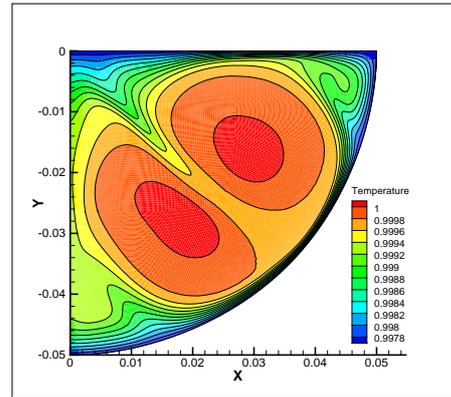


Figura 7.10: Distribuição axial da temperatura ao longo da profundidade para  $Pr = 7,4$  e  $Ra_i = 10^{14}$ .

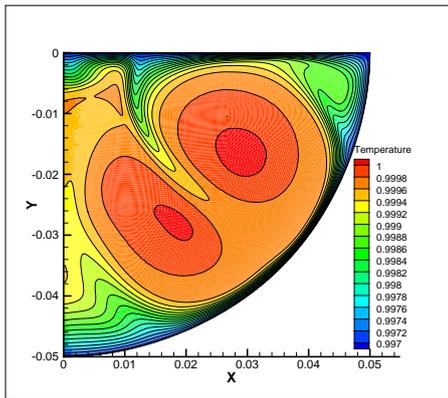
Os campos de temperatura instantâneos gerados em simulações na cavidade BALI-1 com  $Ra_i = 10^8$ ,  $10^{10}$  e  $10^{14}$ , apresentados pelas Figuras 7.11, 7 e 7.13, mostram que, ao aumentar a fonte volumétrica de calor, as camadas de estratificação ficaram mais evidentes, com uma camada de fluido mais quente no topo da cavidade e algumas plumas de fluido mais frio desprendendo da superfície do topo. Os campos instantâneos de velocidade mostrados pela Figura 7.14 apresentam diferentes tamanhos de vórtices e uma faixa estreita de escoamento ao longo da parede do fundo, região que necessitou de maior atenção durante a geração de malha, a fim de evitar divergência da solução provocados por altos gradientes nessa localização.



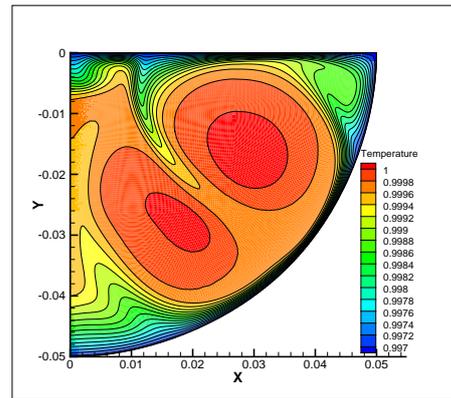
(a)



(b)

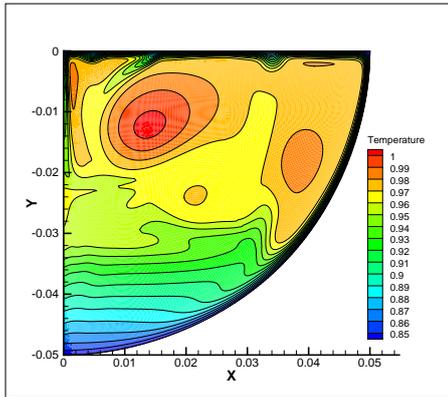


(c)

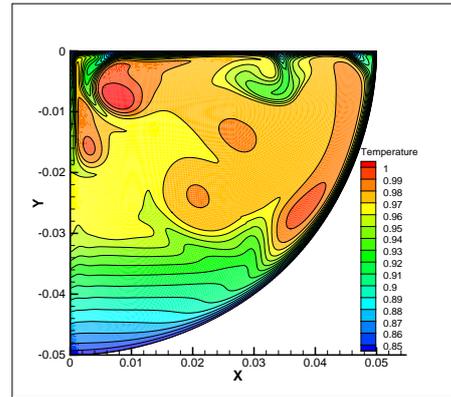


(d)

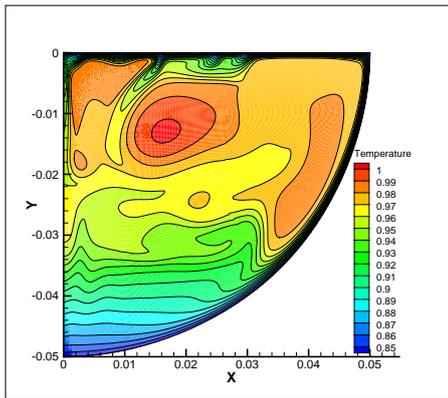
Figura 7.11: Campos adimensionais de temperatura fornecidos por simulação laminar com  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^8$ , após (a) 1000s, (b) 6000s (c) 16000s e (d) 20000s de simulação.



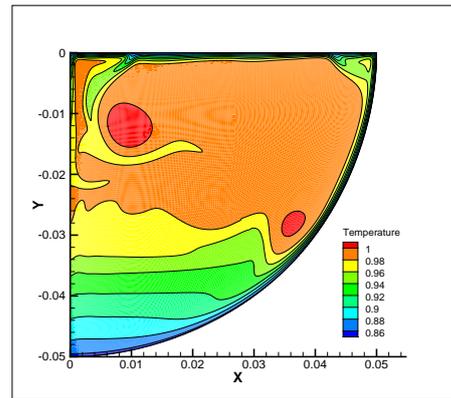
(a)



(b)

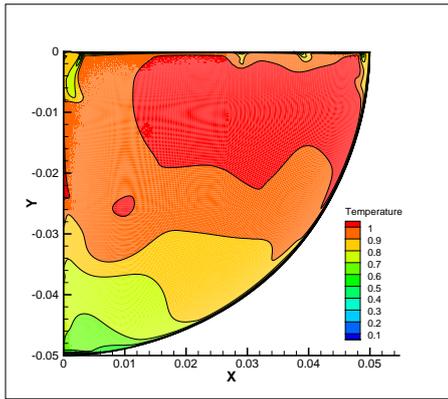


(c)

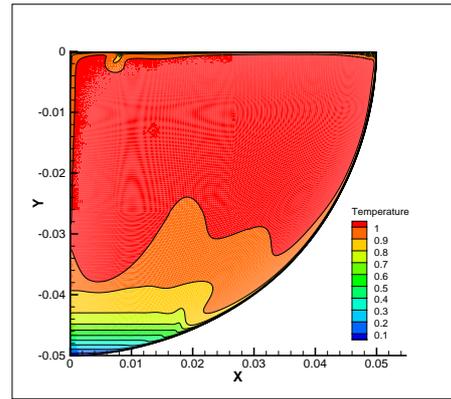


(d)

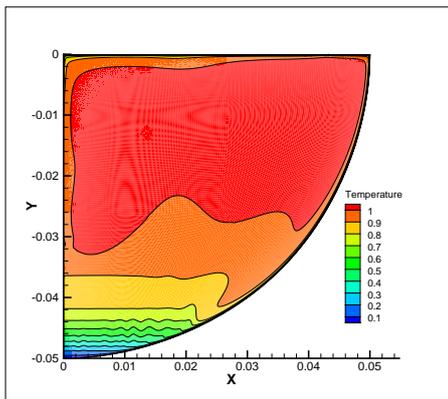
Figura 7.12: Campos adimensionais de temperatura fornecidos por simulação laminar com  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{10}$ , após (a) 12000s, (b) 30000s, (c) 37000s e (d) 60000s de simulação.



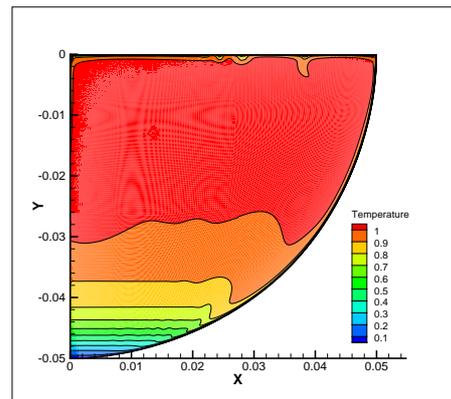
(a)



(b)

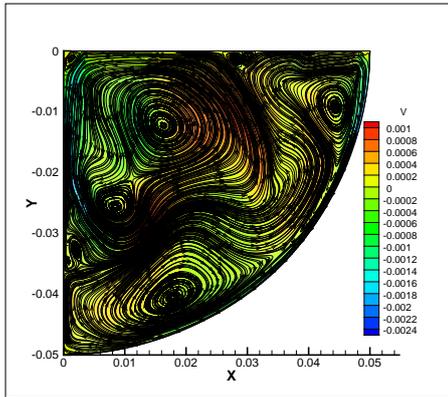


(c)

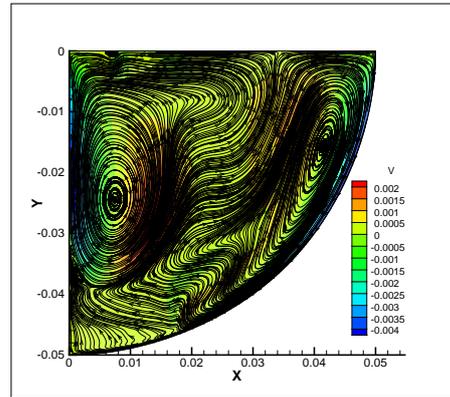


(d)

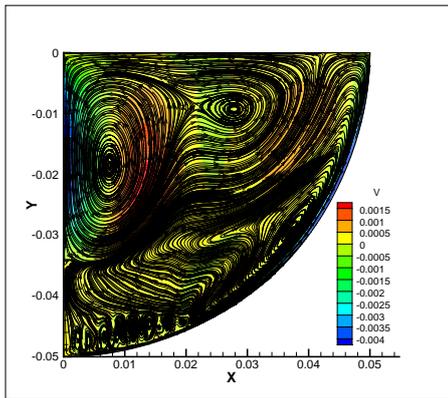
Figura 7.13: Campos adimensionais de temperatura fornecidos pelo modelo V2-f-SGDH com  $Pr = 7,0$  e  $Ra_i = 10^{14}$ , após (a) 200s, (b) 520s (c) 620s e (d) 720s.



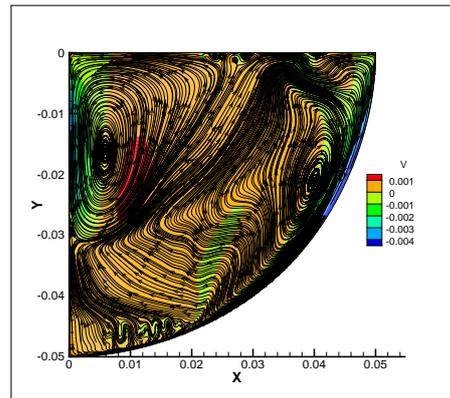
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 7.14: Campos adimensionais de velocidade fornecidos pelo modelo V2-f-SGDH com  $Pr = 7,0$  e  $Ra = 10^{14}$ , após (a) 200s, (b) 520s (c) 620s e (d) 720s de simulação.

## Capítulo 8

# Análises tridimensionais em uma cavidade semi-esférica

Uma semi-esfera com raio ( $R$ ) e profundidade ( $H$ ) iguais a 0,2183m (Figura 8.1) foi gerada pelo programa ANSYS ICEM-12.0, assim como a malha, a qual depois foi convertida para o formato *foam* por meio da utilidade *fluentMeshToFoam*. Fazendo uso do modelo de turbulência V2-f com o modelo SGDh para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos, simulações de convecção natural turbulenta foram realizadas com o mesmo fluido ( $R = 113$ , triclorofluoretano,  $Pr = 8,52$ ) e condições de contorno utilizadas no experimento feito por Asfia et al. (1996). Esse experimento foi reproduzido devido ao fato do mesmo ter sido realizado em uma cavidade tridimensional representativa do plenum inferior, com fonte uniforme de calor equivalente à  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ , o qual forneceu dados locais de transferência de calor, adequados para a validação dos resultados numéricos fornecidos pelas simulações numéricas aqui apresentadas.

As condições de contorno para as paredes foram  $U_i = 0$ ,  $T = T_0 = 293,5K$ ,  $\varepsilon = 2\nu k/y_n^2$  (calculado por meio dos valores de  $k$  obtidos no primeiro centro da célula próxima à parede),  $f = 0$ ,  $\overline{v^2} = 0$ ,  $k = 0$ . Em todos os casos, resíduos médios inferiores à  $10^{-6}$  foram estipulados para todas as equações resolvidas. Fatores de relaxação de 0,7 foram utilizados para velocidade, temperatura, energia cinética turbulenta, dissipação da energia cinética turbulenta e flutuações da velocidade normais ao escoamento, já para pressão, foi utilizado um fator de relaxação de 0,3.

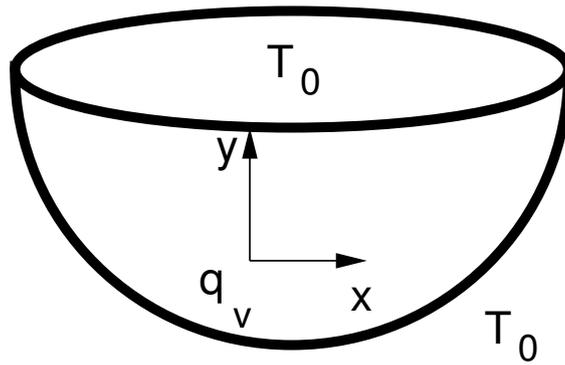


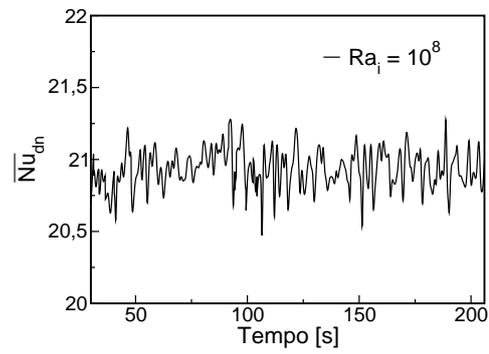
Figura 8.1: Geometria semiesférica com todas as paredes isotérmicas e fonte volumétrica de calor, utilizada nas simulações tridimensionais.

Simulações laminares transientes forneceram soluções convergidas para uma faixa de  $Ra_i = 10^8$  à  $10^{10}$ . Uma vez que o número de  $Ra_i$  aumentou para  $10^{10}$ , a utilização de modelo de turbulência foi necessária e o passo de tempo foi reduzido uma ordem de magnitude do passo de tempo utilizado para casos laminares (0, 1s).

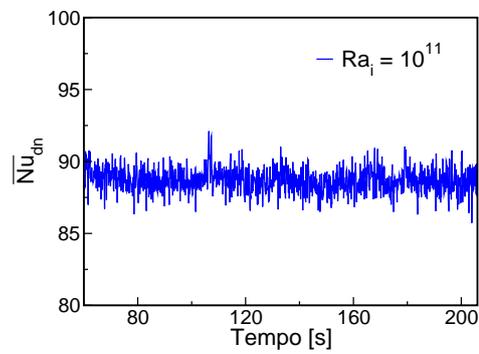
De acordo com os históricos temporais apresentados pelas Figuras 8.2 e 8.3, observa-se que, mesmo para o mais baixo valor de  $Ra_i$  analisado, oscilações com alta frequência estiveram presentes na transferência de calor na parede do topo e fundo da cavidade.

Os valores de coeficientes de transferência de calor locais ( $h$ ) fornecidos pelas simulações com o modelo V2-f foram comparados com os dados experimentais apresentados por Asfia et al. (1996), a fim de avaliar a acurácia dos resultados em simulações tridimensionais. O cálculo de  $h$  foi baseado nos valores de média temporal dos fluxos de calor ao longo da parede do fundo da semi-esfera ( $q_w$ ), da temperatura da parede ( $T_w$ ) e média temporal da temperatura dentro do domínio ( $T_{ave}$ ), conforme apresentado pela equação (8.1):

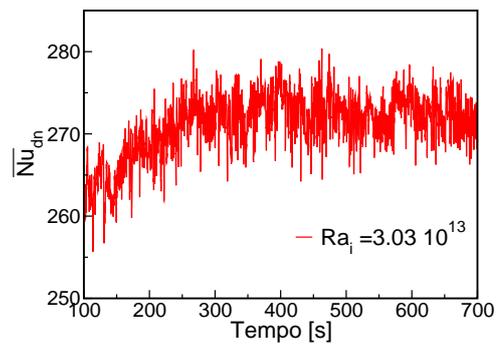
$$h = \frac{q_w}{T_w - T_{ave}}. \quad (8.1)$$



(a)

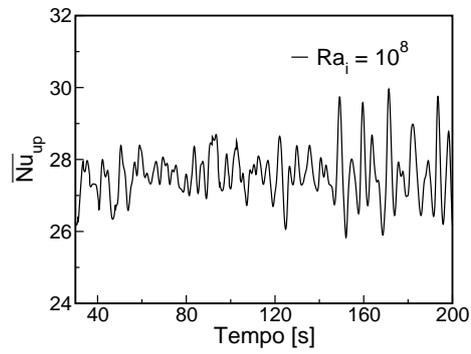


(b)

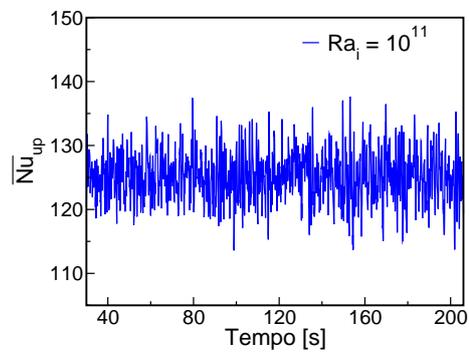


(c)

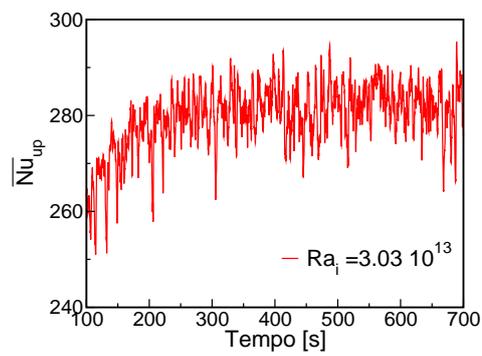
Figura 8.2: Histórico temporal dos valores médios de Nusselt ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) ao longo da parede do fundo da cavidade hemisférica contendo fluido com  $Pr = 8,52$  e (a)  $Ra_i = 10^8$ , (b)  $Ra_i = 10^{11}$  e (c)  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ .



(a)



(b)



(c)

Figura 8.3: Histórico temporal dos valores médios de Nusselt ( $\overline{Nu}_t$ ) ao longo da parede do topo da cavidade hemisférica contendo fluido com  $Pr = 8,52$  e (a)  $Ra_i = 10^8$ , (b)  $Ra_i = 10^{11}$  e (c)  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ .

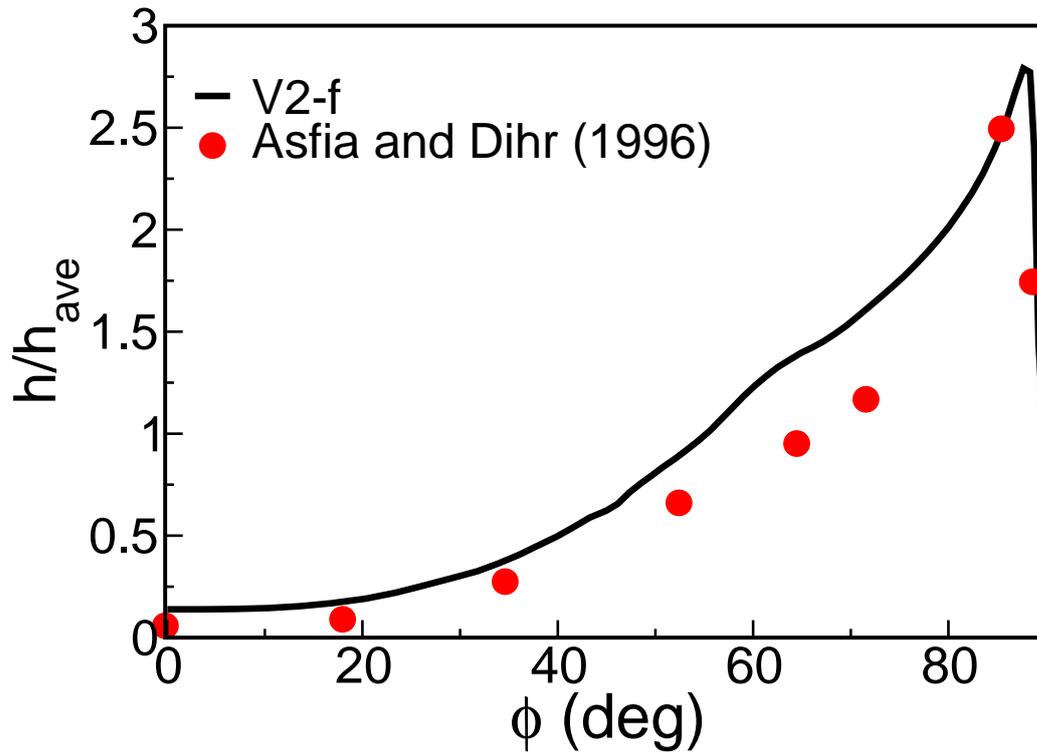


Figura 8.4: Distribuição global do número de Nusselt em função do ângulo.

Uma boa concordância com os dados experimentais foi obtida, conforme pode ser visto pela Figura 8.4. Pode-se observar que valores mais altos de  $h$  (normalizados com os valores médios dos coeficientes de calor  $h_{ave}$ ) foram encontrados no ângulo de 90 graus, justamente embaixo da superfície do topo. Os contornos dos fluxos de calor instantâneos ao longo da parede do fundo (normalizados com o valor máximo do fluxo de calor ao longo da parede do fundo,  $q_{wmax}$ ), mostrados pela Figura 8.5, também mostram esse comportamento do fluxo de calor, tanto para  $Ra_i = 10^8$  quanto  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ , o qual é não uniforme devido à geração interna de calor e à presença de fluidos quentes e frios ao longo da parede.

A Figura 8.6 mostra os campos instantâneos de temperatura para  $Ra_i = 10^{11}$ , no qual pode-se observar camadas de fluido no fundo da cavidade, assim como plumas de fluido mais frio destacando-se da superfície do topo e fluidos descendentes tentando alcançar a região mais profunda da cavidade. Nourgaliev et al. (1997) explicaram que, quanto maior o número de Prandtl do fluido, maior é a resistência encontrada pelos escoamentos descendentes em quebrar as camadas estratificadas nas regiões periféricas, devido à alta viscosidade do fluido. Uma vez que o fluido utilizado nas simulações aqui apresentadas apresenta um considerável  $Pr$  elevado, tanto para o  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$  pode-se observar a presença de camadas estratificadas no fundo da cavidade, conforme mostrado pela Figura 8.7-a.

De acordo com o campo de velocidade, mostrado pela Figura 8.7-b, pode-se observar uma fina camada limite hidrodinâmica, a qual descende ao longo da parede curva, local que mereceu mais atenção durante a geração da malha, a qual apresentou  $y^+ \approx 0,98$  nessa região, a fim de evitar divergência causada por altos gradientes de velocidade e também temperatura. A Figura 8.8 mostra de forma mais detalhada o comportamento do fluido na região próxima à parede do topo, a qual é caracterizada por um escoamento completamente caótico, sem presença de camadas de estratificação.

Os números de Nusselt médios temporais ao longo da parede do fundo ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) e do topo ( $\overline{Nu}_t$ ) foram comparados com correlações numéricas e empíricas obtidas com a mesma ordem de magnitude de número de  $Pr$  utilizado nas presentes simu-

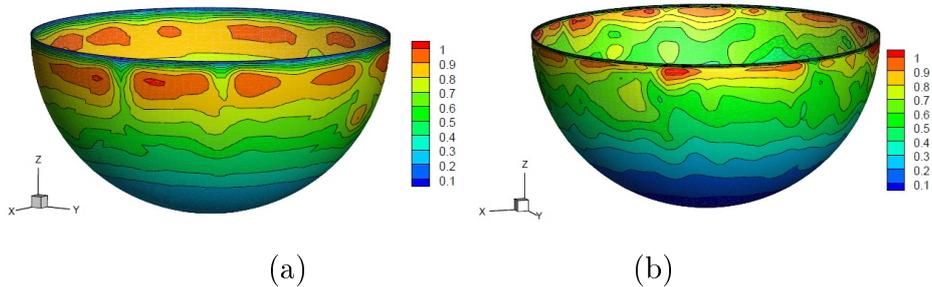


Figura 8.5: Contornos dos fluxos de calor distribuídos nas paredes do fundo da cavidade hemisférica fornecidos pelas simulações com (a)  $Ra_i = 10^8$  e (b)  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ .

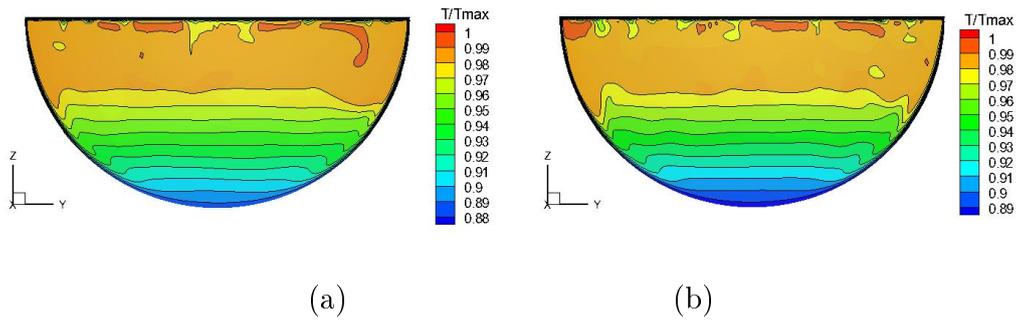


Figura 8.6: Campos de temperatura obtidos por simulações turbulentas com o modelo de turbulência V2-f, para fluido com  $Pr = 8,52$  e  $Ra_i = 10^8$ , nos instantes (a) 1000s e (b) 1420s.

lações, as quais podem ser encontradas no relatório apresentado por Rempe et al. (2008). Conforme observado pela Figura 8.9, os resultados de  $\overline{Nu}_{dn}$  estiveram em boa concordância com outras correlações, inclusive com a correlação fornecida por Asfia et al. (1996). Os resultados de  $\overline{Nu}_t$  apresentaram diferenças com os valores provenientes das correlações, possivelmente devido à aplicação de um tratamento isotrópico dos fluxos de calor turbulentos visto que, no caso tridimensional, os efeitos anisotrópicos na região do topo é mais predominante que em um caso bidimensional, como o da geometria BALI.

Os resultados de  $\overline{Nu}_{dn}$  resultaram em correlação numérica com 0,9987 de coeficiente de determinação, a qual mostra uma boa representação dos mesmos, conforme

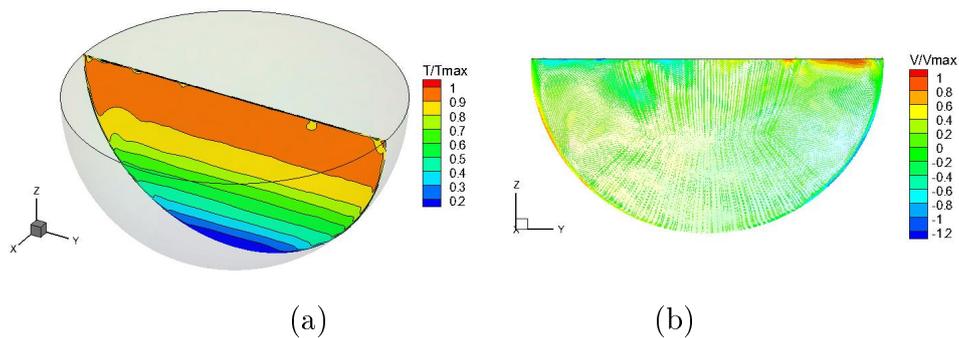


Figura 8.7: (a) Campos de temperatura e (b) velocidade obtidos por simulações turbulentas com o modelo de turbulência V2-f para o caso de  $Pr = 8,52$  e  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ .

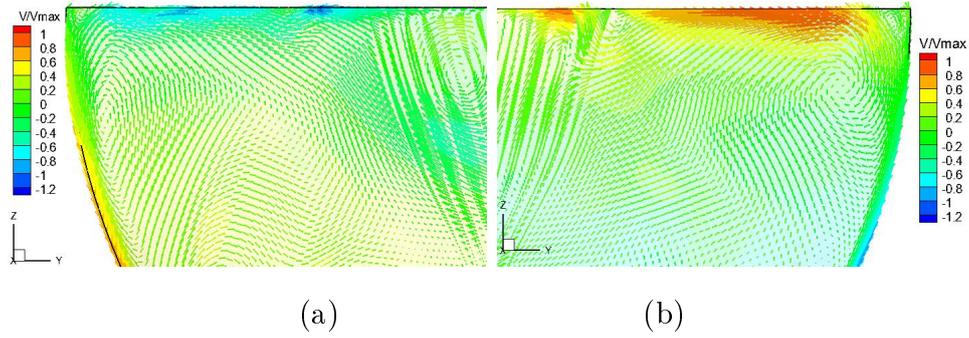
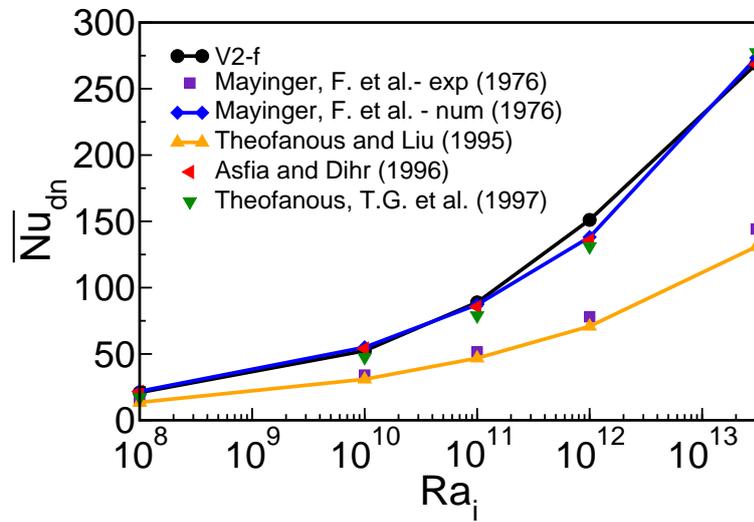


Figura 8.8: Campos de velocidade nas regiões próximas ao topo: (a) canto esquerdo e (b) canto direito, obtidos por simulações turbulentas com o modelo de turbulência V2-f para o caso de  $Pr = 8,52$  e  $Ra_i = 3,03 \times 10^{13}$ .

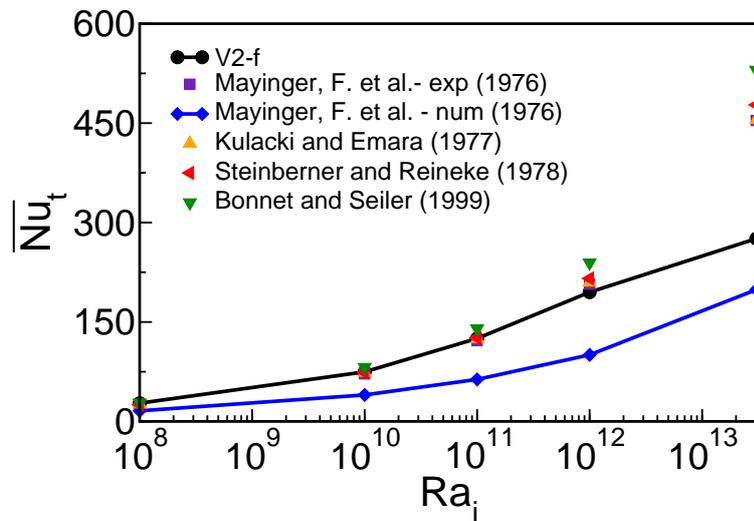
mostrado pela Equação (8.2).

$$\overline{Nu}_{dn} = 0,47411 Ra_i^{0,2059}. \quad (8.2)$$

Embora o modelo de turbulência V2-f tem mostrado uma boa performance em análises de transferência de calor em jatos de colisão e convecção natural gerada por aquecimento diferenciado, pouco tem sido encontrado sobre a aplicação desse modelo no estudo de convecção natural gerada por fonte interna de calor. As simulações tridimensionais com o modelo de turbulência V2-f juntamente com a abordagem SGDh para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos mostraram que tal modelo de turbulência não apenas apresenta um bom desempenho para análises de convecção turbulenta com geração volumétrica de calor, mas também mostrou-se um modelo robusto e também acurato para tais análises.



(a)



(b)

Figura 8.9: Valores da média temporal e espacial dos números de Nusselt em função de  $Ra_i$ : (a) ao longo da parede do fundo ( $\overline{Nu}_{dn}$ ) e (b) ao longo da parede da parede do topo ( $\overline{Nu}_t$ ), fornecidos pelo modelo V2-f com SGDh.

# Capítulo 9

## Conclusões e Sugestões para Futuros trabalhos

### 9.1 Conclusões

Tendo-se em mente a importância do estudo de convecção natural na área de engenharia nuclear, no sentido de contribuir para melhoria e formulação de métodos aplicados no gerenciamento de acidentes severos, essa tese foi gerada com base em análises numéricas de escoamentos turbulentos em fluidos incompressíveis com empuxo, presentes em cavidades fechadas com fonte volumétrica de calor.

As simplificações levadas em consideração, como fluido homogêneo, incompressível, Newtoniano e sem mudança de fase, provaram serem válidas para as análises dos casos de convecção natural turbulenta estudados por esse trabalho.

O objetivo de investigar a convecção natural sob condições de acidente severo ( $Ra_i = 10^{16}$ ) em escoamentos altamente turbulentos por meio de simulações realizadas no OpenFOAM foi alcançado com sucesso, visto que, não apenas foi possível o estudo de diferentes modelos de turbulência já presentes na biblioteca de modelos do próprio OpenFOAM-1.7.1, mas também foi possível implementar novos modelos e solvers. O fato do OpenFOAM tratar-se de um código aberto que permite ao usuário livre acesso e modificação do código foi a característica principal que levou à escolha desse programa de CFD, pois o mesmo permitiu a prática de implementação, verificação e validação de modelos durante a realização dessa tese.

Em uma cavidade quadrada de simples geometria, simulações para análises de quatro modelos RANS ( $k$ - $\varepsilon$ , Launder-Sharma, V2-f e SST) foram realizadas com fluido de  $Pr = 0,6$  e  $Ra_i = 10^6 - 10^{11}$ . Essas simulações mostraram que o modelo  $k$ - $\varepsilon$  não apresentou uma boa performance e gerou constantes divergências numéricas, as quais se tornaram mais perceptivas com o aumento do número de  $Ra_i$ . O modelo de baixo número de Reynolds, Launder-Sharma, mostrou que o termo de empuxo nas equações de  $k$  e  $\varepsilon$  foi de essencial importância para que tal modelo prescrevesse a turbulência, mas o mesmo também apresentou problemas de divergência para o caso com  $Ra_i = 10^{11}$ .

De todos os modelos, o modelo V2-f, implementado e validado previamente em simulações em um canal de escoamento, foi o que apresentou melhor robustez, sem a necessidade de reduzir fatores de relaxação para garantir convergência e também com resultados em boa concordância com as correlações utilizadas como comparação. O modelo SST também mostrou-se adequado para as análises de convecção natural turbulenta, também com boa acurácia e robustez.

Durante a revisão bibliográfica, notou-se que a maioria dos trabalhos numéricos utilizou modelos isotrópicos (SGDH) baseados no número de Prandtl turbulento para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos. Portanto, foram investigados dois modelos anisotrópicos, AFM e GGDH, para análises de convecção natural com fonte interna de calor. Tais modelos foram implementados em solvers aplicados para escoamentos incompressíveis com empuxo, denominados de *buoyantBoussinesqAFM* e *buoyantBoussinesqGGDH*. As simulações de validação foram realizadas em uma cavidade retangular com paredes diferentemente aquecidas, semelhante à cavidade e condições de contorno em que os dados experimentais de Cheesewright e King (1990) e numéricos de Kenjereš (1998), utilizados como comparação, foram obtidos. Tais simulações mostraram que o modelo AFM foi o que forneceu melhores resultados do componente vertical dos fluxos de calor turbulentos, componente fundamental pela produção da turbulência, em caso de convecção gerada por aquecimento diferenciado. Também concluiu-se que o modelo de turbulência V2-f apresentou uma melhor performance com os modelos anisotrópicos que o modelo SST.

Todavia, ao aplicar o modelo V2-f juntamente com os modelos AFM e GGDH

para casos de convecção natural gerada por fonte interna de calor, as simulações mostraram-se muito instáveis e não forneceram convergência para  $Ra_i > 10^9$ , na cavidade quadrada e,  $Ra_i > 10^{11}$ , na cavidade de 1/4 de círculo (representativa do experimento BALI). O modelo SST também foi testado, mas não apresentou melhoria em relação ao modelo V2-f. Portanto, concluiu-se com essas simulações que os modelos anisotrópicos AFM e GGDH apresentam um bom desempenho em convecção natural gerada por aquecimento diferenciado, mas para casos com geração interna de calor, o modelo isotrópico SGDH apresenta uma melhor performance.

O modelo de turbulência V2-f juntamente com o modelo SGDH foi testado em simulações com números de  $Ra_i$  na faixa de acidente severo,  $10^{15} - 10^{16}$ , em simulações na cavidade com mesma geometria e condições de contorno do experimento BALI, o qual foi escolhido dentre outros, justamente por ter fornecido dados locais de distribuição da temperatura em altos valores de  $Ra_i$ , que puderam ser utilizados para validar os resultados aqui apresentados. Além da validação do modelo V2-f e SGDH, as simulações na cavidade BALI mostraram a influência da razão de aspecto na transferência de calor, o comportamento da camada limite térmica ao longo da superfície do fundo da cavidade e a influência que a mesma apresenta na transferência de calor ao longo dessa parede. Com o aumento do número de Rayleigh, a razão de aspecto mostrou-se mais influente nos valores de  $\overline{Nu}_{dn}$  e a transferência de calor tornou-se mais intensa devido à redução da espessura da camada limite térmica.

As simulações na cavidade tridimensional hemisférica, de mesma geometria e condição de contorno do experimento realizado por Asfia et al. (1996) forneceram resultados com boa concordância aos dados experimentais e, assim como as simulações na cavidade quadrada e BALI, resultaram em correlações numéricas que podem ser aplicadas para comparações de outros trabalhos.

Muito se encontra sobre a boa aplicação do modelo V2-f para estudos de jatos de colisão com transferência de calor e convecção natural em fluidos confinados em cavidades com aquecimento diferenciado nas paredes, mas pouco se encontra sobre a aplicação do mesmo no estudo de convecção natural gerada por fontes volumétricas de calor. Essa tese mostrou que tal modelo de turbulência, juntamente com o modelo SGDH para os cálculos dos fluxos de calor turbulentos, não apenas é viável para o

estudo desse tipo de problema físico, mas também trata-se de um modelo robusto e acurato.

## 9.2 Sugestões para futuros trabalhos

Para dar continuidade ao presente trabalho, sugere-se as seguintes propostas para trabalhos futuros:

1. Simulações numéricas diretas (DNS) e simulação de grandes escalas (LES) em geometrias tridimensionais para comparar com os resultados fornecidos com os modelos RANS.
2. Investigação da influência da razão de aspecto da cavidade hemisférica, para o regime de escoamento e comportamento de transferência de calor visto que, para diferentes razões de aspectos, os fenômenos físicos podem ser bem distintos, considerando-se uma mesma combinação de  $Pr$  e  $Ra_i$ .
3. Análise de diferentes condições de contorno na geometria hemisférica como condição de superfície livre e parede do fundo com escoamento em ebulição ao redor, visando investigar o problema de transferência de calor conjugado.
4. Simulação com número de  $Pr$  inferior à 0,1, em cavidades quadrada e semi-circular, utilizando-se os modelos anisotrópicos AFM e GGDH, tanto com o modelo de turbulência V2-f e SST, com a finalidade de verificar se tais modelos apresentam um melhor desempenho em relação à simulações de convecção natural com fonte interna de calor.

# Referências Bibliográficas

- Acharya, S. (1983). Natural convection in an externally heated vertical or inclined square box containing internal energy sources. *Journal of Heat Transfer*, 107:855–866.
- Acharya, S. e Goldstein, R. (1983). Natural convection in an externally heated vertical or inclined square box containing internal energy sources. *Journal of Heat Transfer*, 107:855–866.
- Ampofo, F. e Karayiannis, T. G. (2003). Experimental benchmark data for turbulent natural convection in an air filled square cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(19):3551–3572.
- Anderson, J., Menter, F., Dick, E., Degrez, G., e Vierendeels, J. (2013). Introduction to computational fluid dynamics. *Annual Lecture Series*.
- Aounallah, M., Addad, Y., Benhamadouche, S., Imine, O., Adjlout, L., e Laurence, D. (2007). Numerical investigation of turbulent natural convection in an inclined square cavity with a hot wavy wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50:1683–1693.
- Asfia, F. e Dhir, V. (1994). Natural convection heat transfer in volumetrically heated spherical pools. *Proc. Workshop large molten pool heat transfer*.
- Asfia, F. J. e Dhir, V. K. (1996). An experimental study of natural convection in a volumetrically heated spherical pool bounded on top with a rigid wall. *Nuclear Engineering and Design*, 163:333–348.

- Asfia, F. J., Frantz, B., e Dhir, V. K. (1996). Experimental investigation of natural convection heat transfer in volumetrically heated spherical segments. *Journal of Heat Transfer-Transactions of the Asme*, 118(1):31–37.
- Asmolov, V., Ponomarev-Stepnoy, N., Strizhov, V., e Sehgal, B. (2001). Challenges left in the area of in-vessel melt retention. *Nuclear Engineering and Design*, 209:87–96.
- Bai, L., Shi, W., Zhou, L., e Lu, W. (2013). Numerical simulation and uncertainty estimation in a deep-well centrifugal pump. *6th International Conference on Pumps and Fans with Compressors and Wind Turbines*, 52:1–7.
- Bernaz, L., Bonnet, J.M. Spindler, B., e Villermaux, C. (1998). Thermalhydraulic phenomena in corium pools: numerical simulation with tolbiac and experimental validation with bali. *Third International Conference on Multiphase Flow, ICMF98*, páginas 1–8.
- Bernaz, L., Bonnet, J., e Seiler, J. (2001). Investigation of natural convection heat transfer to the cooled top boundary of a heated pool. *Nuclear Engineering and Design*, 204:413–427.
- Billard, F. e Laurence, D. (2012). A robust  $k-\varepsilon-\overline{v^2}/k$  elliptic blending turbulence model applied to near-wall, separated buoyant flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 33:45–58.
- Bonnet, J. (1999). Thermal hydraulic phenomena in corium pools: Bali experiment. *Proceeding of Workshop on Severe Accident Research*, páginas 79–86.
- Boudjemadi, R., Maupu, V., Laurence, D., e Le Quéré, P. (1996). Direct numerical simulation of natural convection in a vertical channel, a tool for second moment closure modeling. *International Engineering Turbulence Modeling and Experiments*, 3:3948.
- Boussinesq, J. (1877). Théorie de l'Écoulement tourbillant. *Mémoires présentés par divers savants à l'Académie des Sciences*, 23(1):1–680.

- Buck, M., Burger, M., Miassoedov, A., Gaus-Liu, X., Palagin, A., Jacqmin-Godin, L., Tran, C., Ma, W., e Chudanov, V. (2010). The live program - results of test 11 and joint analyses on transient molten pool thermal hydraulics. *Progress in Nuclear Energy*, 52:46–60.
- Casey, M. e Wintergerste, T. (2000). Best practice guidelines. *European Research Community on Flow, Turbulence and Combustion*, página 26.
- Cheesewright, R. e King, K. (1990). Stress distributions in turbulent natural convection in a rectangular air cavity. *In Proceedings 9<sup>th</sup> International Heat Transfer Conference*.
- Choi, S., Kim, E., Wi, M., , e Kim, S. (2004). Computation of a turbulent natural convection in a rectangular cavity with the low-reynolds-number differential stress and flux model. *KSME International Journal*, 18:1782–1798.
- Craft, T., Graham, J., e Launder, B. (1993). Impinging jet studies for turbulence model assessment ii. an examination of the performance of four turbulence models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36:2685.
- Daly, B. e Harlow, F. (1970). Transport equations in turbulence. *Physics of Fluid*, 13:2634–2649.
- Darioush, G. B. (2004). *DNS and LES of turbulent natural convection boundary layer*. PhD thesis, Chalmers University of Technology.
- Davidson, L., Nielsen, P., e Veningsson, A. (2003). Modifications of the  $\overline{v^2}$ -f model for computing the flow in a 3d wall jet. *In: Fourth International Symposium on Turbulence Heat and Mass Transfer*.
- Dinh, T. e Nourgaliev, R. (1997). On turbulence modelling for large volumetrically heated liquid pools. *Nuclear Engineering and Design*, 169:131–150.
- Dol, H. S., Hanjalić, K., e Kenjere, S. (1997). A comparative assessment of the second-moment differential and algebraic models in turbulent natural convection. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 18:4–14.

- Durbin, P. (1993). Application of a near-wall turbulence model to boundary layers and heat transfer. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 14(4).
- Durbin, P. A. (1991). Near-wall turbulence closure modeling without 'damping functions'. *International Journal of Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 3:1–13.
- Eça, L. e Hoekstra, M. (2014). A procedure for estimation of the numerical uncertainty of cfd calculations based on grid refinement studies. *Journal of Computational Physics*, 262:104–130.
- Fay, J. e Ridell, F. (1958). Theory of stagnation point heat transfer in dissociated air. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 25(2):73–85.
- Ferziger, J. (1996). Recent advances in large-eddy simulation. *Engineering Turbulence Modelling and Experiments 3*, Elsevier:163.
- Frantz, B. e Dhir, V. (1992). Experimental investigation of natural convection in spherical segments of volumetrically heated pools. *Proc. National Heat Transfer Conference*.
- Fukasawa, M., Hyakawa, S., e Saito, M. (2008). Thermal-hydraulic analysis for inversely-stratified molten corium in lower vessel. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 45:873–888.
- Fusegi, T., Hyun, J. M., e Kuwahara, K. (1992). Numerical study of natural-convection in a differentially heated cavity with internal heat-generation - effects of the aspect ratio. *Journal of Heat Transfer-Transactions of the Asme*, 114(3):773–777.
- Gabor, J., Ellison, P., e Cassulo, J. (1980). Heat transfer from internally heated hemispherical pools. *19th National Heat Transfer Conference*.
- Garon, A. e Goldstein, R. (1973). Velocity and heat transfer measurements in thermal convection. *Physics of Fluids*, 16.

- Goldstein, R. e Tokuda, S. (1980). Heat transfer by thermal convection at high rayleigh numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 23.
- Gubaidullin, A. A. (2002). Natural convection heat transfer in two-fluid stratified pools with internal heat sources. *Royal Institute of Technology*.
- Hall, H., Eschenroeder, A., e Marrone, P. (1962). Blunt-nose inviscid airflows with coupled non equilibrium processes. *Journal of the Aerospace Sciences*, 29(9):1038–1051.
- Halle, M., Kymalainen, O., e Tuomisto, H. (1999). Experimental copo ii data on natural convection in homogeneous and stratified pools. *In: Proc. NURETH 9, San Francisco, California*.
- Hanjalić, K. (2002). One point closure models for buoyancy driven turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 34:32147.
- Hanjalić, K., Kenjereš, S., Tummers, M., e Jonker, H. J. (2012). Analysis and modelling of physical transport phenomena. *VSSD*, páginas 150–155.
- Hofmann, P. (1999). Current knowledge on core degradation phenomena, a review. *Journal of Nuclear Materials*, 270:194–211.
- Horvat, A., Kljenak, I., e Marn, J. (2001). Two-dimensional large-eddy simulation of turbulent natural convection due heat generation. *Heat and Mass Transfer*, 44:3985–3995.
- IAEA (2009). *Severe Accident Management Programmes for Nuclear Power Plants*. Número 15 em IAEA Safety Standards Series. Vienna.
- Ince, N. Z. e Launder, B. (1989). On the computation of buoyancy-driven turbulent flows in rectangular enclosures. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 10:110–117.
- Jahn, M. e Reineke, H. (1974). Free convection heat transfer with internal heat sources. *Proc. 5th Int. Heat Transfer Conference.*, Paper NC2.8.

- Kenjereš, S. (1998). Numerical modeling of complex buoyancy-driven flows. *Ph.D. Thesis, Delft University of Technology, Delft, The Netherlands.*
- Kenjereš, S., Gunarjo, S., e Hanjalić, K. (2005). Contribution to elliptic relaxation modelling of turbulent natural and mixed convection. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 26:569–586.
- Kenjereš, S. e Hanjalić, K. (1995). Prediction of turbulent thermal convection in concentric and eccentric annuli. *International Journal of Heat Fluid Flow*, páginas 429–439.
- Kim, J. e Moin, P. (1989). Transport of passive scalars in a turbulent channel flow. *Turbulent Shear Flows*, 6:85–95.
- Kolmogorov, A. (1942). Equations of turbulent motion of an incompressible fluid. *Izvestia Academy of Sciences, USSR*, 6:56–58.
- Kopal, Z. (1947). Tables of supersonic flow around cones. *Department of Electrical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge.*
- Kretzschmar, F. e Fluhrer, B. (2008). Behavior of the melt pool in the lower plenum of the reactor pressure vessel - review of experimental programs and background of the live program. *Relatórios Científicos FZKA 7382*, páginas 1–66.
- Kulacki, F. e Emara, A. (1977). Steady and transient thermal convection convection in a fluid layer with uniform volumetric energy sources. *Journal of Fluid Mechanics*, 83(2):375–395.
- Kulacki, F. A. e Nagle, M. E. (1975). Natural-convection in a horizontal fluid layer with volumetric energy-sources. *Journal of Heat Transfer-Transactions of the Asme*, 97(2):204–211.
- Kymalainen, O., Tuomisto, H., Hongisto, O., e Theofanous, T. (1994). Heat flux distribution from a volumetrically heated pool with high rayleigh number. *Nuclear Engineering and Design*, 149:401–408.

- Kymalainen, O., Tuomisto, H., e Theofanous, T. (1997). In-vessel retention of corium at loviisa plant. *Nuclear Engineering and Design*, 169:109–130.
- Launder, B., Reece, G., e Rodi, W. (1975). Progress in the development of a reynolds-stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 68:537–566.
- Launder, B. e Spalding, D. (1972). Mathematical models of turbulence. *Academic Press, London*.
- Launder, B. E. e Sharma, B. I. (1974). Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1(2):131–138.
- Laurence, D. R., Uribe, J. C., e Utyuzhnikov, S. (2004). A robust formulation of the  $v^2 - f$  model. *Flow, Turbulence and Combustion*, 73:169–185.
- Le Quéré, P. e Behnia, M. (1998). From onset of unsteadiness to chaos in a differentially heated square cavity. *Journal of Fluid Mechanics*, 359:81–107.
- Lee, J. e Goldstein, R. (1988). An experimental study on natural convection heat transfer in an inclined square enclosure containing internal energy sources. *Journal of Heat Transfer*, 110:345–349.
- Lee, S., Lee, J. K., e Suh, K. (2007). Natural convection thermo fluid dynamics in a volumetrically heated rectangular pool. *Nuclear Engineering and Design*, 237:473–483.
- Lee, S. e Suh, K. Y. (2003). Natural convection heat transfer in two-dimensional semicircular slice pool. *Journal of Nuclear and Technology*, 40:775–782.
- Leseieur, M. e Metais, O. (1996). New trends in large-eddies simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28:45.
- Lien, F. e Durbin, P. (1996). Non-linear  $k-\varepsilon-\overline{v^2}$  modeling with application to high lift. *In: Proceedings of the Summer Program, Center of Turbulence Research*, páginas 5–26.

- Lien, F. S. e Kalitzin, G. (2001). Computations of transonic flow with the  $v^2 - f$  turbulence model. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 22:53–61.
- Mahaffy, J., Chung, B., Dubois, F., Ducros, F., Graffard, E., Heitsch, M., Henriksen, M., Komen, E., Moretti, F., Morii, T., Mühlbauer, P., Rohde, U., Scheuerer, M., Smith, B. L., Song, C., Watanabe, T., e Zigh, G. (2007). Nuclear Energy Agency Committee on the Safety of Nuclear Installations.
- Manceau, R., Parneix, S., e Laurence, D. (2000). Turbulent heat transfer predictions using the  $\overline{v^2}$ -f model on unstructured meshes. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 21:320–328.
- May, H. O. (1991). A numerical study on natural convection in an inclined square enclosure containing internal heat sources. *Heat and Mass Transfer*, 34:919–928.
- Mayinger, F., Jahn, M., Reineke, H., e Steinbrenner, U. (1976). Examination of thermalhydraulic processes and heat transfer in a core melt. *BMFT RS*, 48/1.
- Menter, F. R. (1993). Zonal two equation  $k-\omega$  turbulence models for aerodynamic flows. *AIAA Paper 93-2906*.
- Nourgaliev, R., Dinh, T., e Sehgal, B. (1997). Effect of fluid prandtl number on heat transfer characteristics in internally heated liquid pools with rayleigh numbers up to  $10^{12}$ . *Nuclear Engineering and Design*, 169:165–184.
- Otic, I., Groetzbach, G., e Worner, M. (2005). Analysis and modelling of the temperature variance equation in turbulent natural convection for low-prandtl-number fluids. *Fluid Mechanics*, páginas 237–261.
- Paolucci, S. (1990). Direct numerical-simulation of 2-dimensional turbulent natural-convection in an enclosed cavity. *Journal of Fluid Mechanics*, 215:229.
- Patankar, S. (1980). Numerical heat transfer and fluid flow. páginas 139–146.
- Patterson, J. e Imberger, J. (1980). Unsteady natural-convection in a rectangular cavity. *Journal of Fluid Mechanics*, 100:65–86.

- Petrangeli, G. (2006). Nuclear safety. 3:53–62.
- Prandtl, L. (1925). Bericht über untersuchungen zur ausgebildeten turbulenz. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, 5:136–139.
- Prandtl, L. (1945). Über ein neues formelsystem für die ausgebildete turbulenz. *Nachrichten von der Akad. der wissenschaften in Gottingen*, página 619.
- Rahman, M. e Sharif, M. A. R. (2003). Numerical study of laminar natural convection in inclined rectangular enclosures of various aspect ratios. *Numerical Heat Transfer*, 44:355–373.
- Ralf, J. e Roberts, D. (1974). Free convection heat transfer measurements in horizontal liquid layers with internal heat generation. *AERE–R784, UKAEA Research Group Harwell*.
- Ravi, M. R., Henkes, R., e Hoogendoorn, C. J. (1994). On the high-rayleigh-number structure of steady laminar natural-convection flow in a square enclosure. *Journal of Fluid Mechanics*, 262:325–351.
- Rempe, J. L., Suh, K. Y., Cheung, F. B., e KIM, S. B. (2008). In-vessel retention of molten corium: Lessons learned and outstanding issues. *Nuclear Technology*, 161:210–267.
- Reynolds, O. (1895). On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 186:123.
- Roache, P. (1998). Hermosa Publishers. Albuquerque, New Mexico.
- Rundle, C. e Lighstone, M. (2007). Validation of turbulence in a square cavity for application of cfd modelling to heat transfer and fluid flow in atria geometries.
- Saffman, P. (1970). A model for inhomogeneous turbulent flows. *Proceedings of the Royal Society of London*, páginas 417–433.

- Saury, D., Benkhelifa, A., e Penot, F. (2012). Experimental determination of first bifurcations to unsteady natural convection in a differentially-heated cavity tilted from  $0^\circ$  to  $180^\circ$ . *Experimental Thermal and Fluid Science*, 38:74–84.
- Sehgal, B., Giri, A., Chikkanagoudar, U., e Karbojian, A. (2006). Experiments on-in vessel melt coolability in the ec-forever program. *Nuclear Engineering and Design*, 236:2199–2210.
- Sehgal, B., Theerthan, A., Giri, A., Karbojian, A., Willschutz, H., Kymalainen, O., Vandroux, S., Bonnet, Seiler, J., Ikkonen, K., Sairanen, R., Bhandari, S., Burger, M., Buck, M., Widmann, W., Dienstbier, J., Techy, Z., Kostka, P., Taubner, R., Theofanous, T., e Dinh, T. (2003). Assessment of reactor vessel integrity (arvi). *Nuclear Engineering and Design*, 221:23–53.
- Seiler, J. M., Tourniaire, B., Defoort, F., e Froment, K. (2007). Consequences of material effects on in-vessel retention. *Nuclear Engineering Design*, 237:1752–1758.
- Shim, Y. e Hyun, J. (1997). Transient confined natural convection with internal heat generation. *Heat and Fluid Flow*, 18:328–333.
- Silva, L. (2008). Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre. *Tese de Doutorado, UFRJ*, páginas 81–82.
- Speziale, C., Sakar, S., e Gataski, T. (1991). Modelling the pressure-strain correlation of turbulence an invariant dynamical systems approach. *Journal of Fluid Mechanics*, 227:245–272.
- Steinberner, U. e Reineke, H. (1978). Turbulent buoyancy convection heat transfer with internal heat sources. *Proceedings of the Sixth Internal Heat Transfer Conference*, 2:305–310.
- Sveningsson, A. (2003). *Analysis of the performance of different  $v^2 - f$  turbulence models in a stator vane passage flow*. PhD thesis, Dept. of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Gothenburg.

- Theofanous, T. (1989). Some considerations on severe accidents at loviisa. *IVO Proprietary Rep., Theofanous e Co.*
- Theofanous, T., Liu, C., Additon, S., Angelini, S., Kymalainen, O., e Salmassai, T. (1997a). In-vessel coolability and retention of a core melt. *Nuclear Engineering and Design*, 169:1–48.
- Theofanous, T., Maguire, M., Angelini, S., e Salmassi, T. (1997b). The first results from acopo experiment. *Nuclear Engineering and Design*, 169:49.
- Theofanous, T., Tu, J., Salmassi, T., e Dinh, T. (2002). Quantification of limits to coolability in ulpu-2000 iv. *Reference for AP1000 Probabilistic Risk Assessment*.
- Thielen, L., Hanjalić, K., Jonker, H., e Manceau, R. (2005). Predictions of flow and heat transfer in multiple impinging jets with an elliptic-blending second-moment closure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48:1583–1598.
- Tran, C. T. e Dinh, T. N. (2009a). The effective convectivity model for simulation of melt pool heat transfer in a light water reactor pressure vessel lower head. part i: Physical processes, modeling and model implementation. *Progress in Nuclear Energy*, 51(8):849–859.
- Tran, C.-T. e Dinh, T.-N. (2009b). The effective convectivity model for simulation of melt pool heat transfer in a light water reactor pressure vessel lower head. part ii: Model assessment and application. *Progress in Nuclear Energy*, 51(8):860–871.
- Tran, C. T., Kudinov, P., e Dinh, T. N. (2010). An approach to numerical simulation and analysis of molten corium coolability in a boiling water reactor lower head. *Nuclear Engineering and Design*, 240(9):2148–2159.
- Tsai, W. e Lin, W. (2000). Computational of enhanced turbulent heat transfer in a channel with periodic ribs. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 10(1):47–66.
- Versteeg, H. K. e Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics*, volume 5.

- Versteegh, T. e Nieuwstadt, F. (1998). Turbulent budgets of natural convection in an infinite, differentially heated vertical channel. *International Journal of Heat Fluid Flow*, 19:135-149.
- Vieira, C., Ničeno, B., e Su, J. (2013). Computational simulation of turbulent natural convection in a corium pool. 2013 *International Nuclear Atlantic Conference - INAC2013*.
- Vieira, C., Ničeno, B., e Su, J. (2014). Computational simulation of turbulent natural convection in a volumetrically heated hemispherical cavity. *Proceedings of 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering*.
- Walsh, P. C. e Leong, W. H. (2004). Effectiveness of several turbulence models in natural convection. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 14(5-6):633-648.
- Wilcox, D. (1988). Reassessment of the scale determining equation for advanced turbulence models. *AIAA Journal*, 26(11):1299-1310.
- Wilcox, D. (1989). Wall matching, a rational alternative to wall functions. *AIAA Paper 89-611*.
- Wilcox, D. (2006). *Turbulence Modeling for CFD*. D C W Industries; 3rd edition.

# Apêndice A

## Implementações realizadas no OpenFOAM

### A.1 Modelo de turbulência V2-f

```

/*-----*\
=====
  \ \ / /   F i e l d           |   OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
  \ \ / /   O p e r a t i o n    |
  \ \ / /   A n d                |   Copyright (C) 1991-2005 OpenCFD Ltd.
  \ \ / /   M a n i p u l a t i o n |
-----*\

```

License

This file is part of OpenFOAM.

OpenFOAM is free software; you can redistribute it and/or modify it under the terms of the GNU General Public License as published by the Free Software Foundation; either version 2 of the License, or (at your option) any later version.

OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License for more details.

You should have received a copy of the GNU General Public License along with OpenFOAM; if not, write to the Free Software Foundation, Inc., 51 Franklin St, Fifth Floor, Boston, MA 02110-1301 USA

```

/*-----*\

```

```

#include "buoyantV2f.H"
#include "addToRunTimeSelectionTable.H"
// #include "wallFvPatch.H"
#include "backwardsCompatibilityWallFunctions.H"
// #include "backwardsCompatibilityWallFunctions.H"
// #include "fixedInternalValueFvPatchField.H"

```

```

// * * * * * Static Data Members * * * * * //

```

```

namespace Foam
{
namespace incompressible
{
namespace RASModels
{

```

```

// * * * * * Static Data Members * * * * * //

```

```

defineTypeNameAndDebug(buoyantV2f, 0);
addToRunTimeSelectionTable(RASModel, buoyantV2f, dictionary);

```

```

// * * * * * Private Member Functions * * * * * //

```

```

tmp<volScalarField> buoyantV2f::T() const
{
    volScalarField yStar_ = pow(CmuKE_, 0.25) * sqrt(k_) * yw_ / nu();
    return max(k_ / (epsilon_ + epsilonSmall_),
               pos(yStarLim_ - yStar_) * 6.0 * sqrt(nu() / (epsilon_ + epsilonSmall_)));
}

```

```

tmp<volScalarField> buoyantV2f::L() const
{
    volScalarField yStar_ = pow(CmuKE_, 0.25) * sqrt(k_) * yw_ / nu();
    return
        CL_ * max(pow(k_, 1.5) / (epsilon_ + epsilonSmall_),
                  pos(yStarLim_ - yStar_)
                    * CEta_ * pow(pow(nu(), 3.0) / (epsilon_ + epsilonSmall_), 0.25));
}

```

```

// * * * * * Constructors * * * * * //

```

```

// from components
buoyantV2f::buoyantV2f
(
    const volVectorField& U,
    const surfaceScalarField& phi,
    transportModel& lamTransportModel
)
:
    RASModel(typeName, U, phi, lamTransportModel),

    Cmu_
    (
        dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
        (
            "Cmu",
            coeffDict_,
            0.22
        )
    ),

    CmuKE_
    (
        dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
        (
            "CmuKE",
            coeffDict_,
            0.09
        )
    ),

    Ceps10_
    (
        dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
        (
            "Ceps10",
            coeffDict_,
            1.40
        )
    ),

    Ceps11_
    (
        dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
        (
            "Ceps11",
            coeffDict_,
            0.05
        )
    ),

    Ceps2_
    (
        dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
        (
            "Ceps2",
            coeffDict_,
            1.90
        )
    ),

    C1_
    (
        dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
        (

```

```

        "C1",
        coeffDict_,
        1.40
    )
),

C2_
(
    dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
    (
        "C2",
        coeffDict_,
        0.30
    )
),

CL_
(
    dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
    (
        "CL",
        coeffDict_,
        0.23
    )
),

CEta_
(
    dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
    (
        "CEta",
        coeffDict_,
        70.0
    )
),

oneOnSigmaK_
(
    dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
    (
        "oneOnSigmaK",
        coeffDict_,
        1.0
    )
),

oneOnSigmaEps_
(
    dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
    (
        "oneOnSigmaEps",
        coeffDict_,
        0.76923
    )
),

yStarLim_
(
    dimensioned<scalar>::lookupOrAddToDict
    (
        "yStarLim",
        coeffDict_,
        30.0
    )
),

```

```
f0_("f0small", dimless/dimTime, SMALL),
```

```
yw_(mesh_),
```

```
k_
```

```
(  
  IOobject  
  (  
    "k",  
    runTime_.timeName(),  
    mesh_,  
    IOobject::MUST_READ,  
    IOobject::AUTO_WRITE  
  ),  
  mesh_  
)
```

```
epsilon_
```

```
(  
  IOobject  
  (  
    "epsilon",  
    runTime_.timeName(),  
    mesh_,  
    IOobject::MUST_READ,  
    IOobject::AUTO_WRITE  
  ),  
  mesh_  
)
```

```
v2_
```

```
(  
  IOobject  
  (  
    "v2",  
    runTime_.timeName(),  
    mesh_,  
    IOobject::MUST_READ,  
    IOobject::AUTO_WRITE  
  ),  
  mesh_  
)
```

```
f_
```

```
(  
  IOobject  
  (  
    "f",  
    runTime_.timeName(),  
    mesh_,  
    IOobject::MUST_READ,  
    IOobject::AUTO_WRITE  
  ),  
  mesh_  
)
```

```
nut_
```

```
(  
  IOobject  
  (  
    "nut",  
    runTime_.timeName(),  
    mesh_,  
    IOobject::NO_READ,  
    IOobject::AUTO_WRITE  
  ),  
)
```

```

        autoCreateLowReNut("nut", mesh_)
    )
}
// Calculate viscosity (with Davidson correction - 2003)
nut_ = (min(CmuKE_*sqr(k_)/(epsilon_ + epsilonSmall_),
            Cmu_*v2_*T()));
nut_.correctBoundaryConditions();

printCoeffs();
}

// * * * * * Member Functions * * * * * //

tmp<volSymmTensorField> buoyantV2f::R() const
{
    return tmp<volSymmTensorField>
    (
        new volSymmTensorField
        (
            IOobject
            (
                "R",
                runTime_.timeName(),
                mesh_,
                IOobject::NO_READ,
                IOobject::NO_WRITE
            ),
            ((2.0/3.0)*I)*k_ - nut_*2*symm(fvc::grad(U_)),
            k_.boundaryField().types()
        )
    );
}

tmp<volSymmTensorField> buoyantV2f::devReff() const
{
    return tmp<volSymmTensorField>
    (
        new volSymmTensorField
        (
            IOobject
            (
                "devRhoReff",
                runTime_.timeName(),
                mesh_,
                IOobject::NO_READ,
                IOobject::NO_WRITE
            ),
            -nuEff()*dev(twoSymm(fvc::grad(U_)))
        )
    );
}

tmp<fvVectorMatrix> buoyantV2f::divDevReff(volVectorField& U) const
{
    return
    (
        - fvm::laplacian(nuEff(), U)
//      - fvc::div(nuEff()*dev(T(fvc::grad(U))))
        - fvc::div(nuEff()*dev(fvc::grad(U)).T())
    )
}

```

```
);  
}
```

```
bool buoyantV2f::read()  
{  
    if (RASModel::read())  
    {  
        Cmu_.readIfPresent(coeffDict());  
        CmuKE_.readIfPresent(coeffDict());  
        Ceps10_.readIfPresent(coeffDict());  
        Ceps11_.readIfPresent(coeffDict());  
        Ceps2_.readIfPresent(coeffDict());  
        C1_.readIfPresent(coeffDict());  
        C2_.readIfPresent(coeffDict());  
        CL_.readIfPresent(coeffDict());  
        CEta_.readIfPresent(coeffDict());  
        oneOnSigmaK_.readIfPresent(coeffDict());  
        oneOnSigmaEps_.readIfPresent(coeffDict());  
        yStarLim_.readIfPresent(coeffDict());  
        return true;  
    }  
  
    else  
    {  
        return false;  
    }  
}
```

```
void buoyantV2f::correct()  
{  
    transportModel_.correct();  
  
    if (!turbulence_)  
    {  
        return;  
    }  
  
    RASModel::correct();  
  
    volScalarField S2 = 2*magSqr(symm(fvc::grad(U_)));  
  
    volScalarField G = nut_*S2;  
  
    volScalarField T_ = T();  
    volScalarField Ceps1_ =  
    Ceps10_* (scalar(1.0)+Ceps11_*min(sqrt(k_/v2_), scalar(10.0)));  
  
    /*** Buoyancy production term ***/  
  
    volScalarField E = 2.0*nu()*nut_*fvc::magSqrGradGrad(U_);  
    volScalarField D = 2.0*nu()*magSqr(fvc::grad(sqrt(k_)));  
  
    volScalarField T = U_.db().lookupObject<volScalarField>("T");  
  
    dimensionedVector gv("gv", dimensionSet(0,1,-2,0,0,0,0), vector(0.0,-9.81,  
0.0));  
    // dimensionedScalar beta("beta", dimensionSet(0,0,0,-1,0,0,0), scalar(0.0032));  
    //Cavity with vertical heated sides  
  
    dimensionedScalar beta("beta", dimensionSet(0,0,0,-1,0,0,0), scalar(0.0002));  
    //BALI case
```

```

// dimensionedScalar beta("beta", dimensionSet(0,0,0,-1,0,0,0), scalar(0.004)); //
Square cavity

volScalarField Gb = beta*(gv & (fvc::grad(T)))*nut_/0.9; // BN: Camila wrote this

// Dissipation rate equation

tmp<fvScalarMatrix> epsEqn
(
    fvm::ddt(epsilon_)
    + fvm::div(phi_, epsilon_)
    - fvm::laplacian(DepsilonEff(), epsilon_)
    ==
    Ceps1_*G/T_
    + Ceps1_*fvm::SuSp(Gb/(T_*epsilon_), epsilon_)
    - fvm::SuSp(Ceps2_/T_, epsilon_)
);

epsEqn().relax();
solve(epsEqn);
bound(epsilon_, epsilon0_);

// Turbulent kinetic energy equation

tmp<fvScalarMatrix> kEqn
(
    fvm::ddt(k_)
    + fvm::div(phi_, k_)
    - fvm::laplacian(DkEff(), k_)
    ==
    G
    + fvm::SuSp(Gb/k_, k_)
    - fvm::SuSp(1.0/T_, k_)
);

kEqn().relax();
solve(kEqn);
bound(k_, k0_);

// f equation
volScalarField L_ = L();

tmp<fvScalarMatrix> fEqn
(
    - fvm::laplacian(f_)
    ==
    - fvm::SuSp(1.0/sqr(L_), f_)
    - ((C1_-scalar(6.0))*v2_/k_ - 2.0/3.0*(C1_-scalar(1.0)))/(sqr(L_)*T_)
    + C2_*G/(k_*sqr(L_))
    + (C2_/(k_*sqr(L_)))*fvm::SuSp(Gb/f_, f_)
);

fEqn().relax();
solve(fEqn);
bound(f_, f0_);

// v2 equation

tmp<fvScalarMatrix> v2Eqn
(
    fvm::ddt(v2_)
    + fvm::div(phi_, v2_)
    - fvm::laplacian(DkEff(), v2_)
);

```

```

==
//      k_f
// Davidson correction - 2003
//      min(k_f,
//          -((C1_scalar(6.0))*v2_- - 2.0/3.0*k_*(C1_scalar(1.0)))/T_+ + C2_*G)
// - fvm::SuSp(6.0*epsilon_/k, v2_)
// - fvm::SuSp(6.0*1/T_, v2)

);

v2Eqn().relax();
solve(v2Eqn);
bound(v2_, k0);

// Re-calculate viscosity (with Davidson correction - 2003)
nut_ = min(CmuKE_*sqr(k)/(epsilon_ + epsilonSmall),
           Cmu_*v2_*T);
}

// * * * * *

} // End namespace RASModels
} // End namespace incompressible
} // End namespace Foam

// *****

```

## A.2 Condição de contorno para $\varepsilon$ , requerida pelo modelo V2-f

```

/*-----*\
=====
\\      /  F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\    /    O peration  |
\\  /      A nd        | Copyright (C) 1991-2010 OpenCFD Ltd.
  \/      M anipulation |
-----*\

```

License

This file is part of OpenFOAM.

OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it under the terms of the GNU General Public License as published by the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or (at your option) any later version.

OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License for more details.

You should have received a copy of the GNU General Public License along with OpenFOAM. If not, see <<http://www.gnu.org/licenses/>>.

```

\*-----*\

```

```

#include "fixedInternalF.H"
#include "fvPatchFieldMapper.H"
#include "fvMatrix.H"
#include "wallFvPatch.H"
#include "volFields.H"
#include "RASModel.H"
#include "addToRunTimeSelectionTable.H"

```

```

namespace Foam
{

```

```

// * * * * * Constructors * * * * * //

```

```

Foam::fixedInternalF::fixedInternalF
(
    const fvPatch& p,
    const DimensionedField<scalar, volMesh>& iF
)
:
    zeroGradientFvPatchField<scalar>(p, iF)
{}

```

```

Foam::fixedInternalF::fixedInternalF
(
    const fixedInternalF& ptf,
    const fvPatch& p,
    const DimensionedField<scalar, volMesh>& iF,
    const fvPatchFieldMapper& mapper
)
:
    zeroGradientFvPatchField<scalar>(ptf, p, iF, mapper)
{}

```

```

Foam::fixedInternalF::fixedInternalF
(
    const fvPatch& p,
    const DimensionedField<scalar, volMesh>& iF,
    const dictionary& dict

```

```

)
:
zeroGradientFvPatchField<scalar>(p, iF, dict)
{}

```

```

Foam::fixedInternalF::fixedInternalF
(
    const fixedInternalF& fivpf
)
:
zeroGradientFvPatchField<scalar>(fivpf)
{}

```

```

Foam::fixedInternalF::fixedInternalF
(
    const fixedInternalF& fivpf,
    const DimensionedField<scalar, volMesh>& iF
)
:
zeroGradientFvPatchField<scalar>(fivpf, iF)
{}

```

```

// * * * * * Member Functions * * * * * //

```

```

void Foam::fixedInternalF::manipulateMatrix
(
    fvMatrix<scalar>& matrix
)
{
    const volScalarField& nu_ = db().lookupObject<volScalarField>("nu");
    const volScalarField& epsilon_ = db().lookupObject<volScalarField>("epsilon");
    const volScalarField& k_ = db().lookupObject<volScalarField>("k");
    const volScalarField& v2_ = db().lookupObject<volScalarField>("v2");

    const incompressible::RASModel& rasModel =
db().lookupObject<incompressible::RASModel>("RASProperties");
    const scalarField& y = rasModel.y()[patch().index()];

    const fvPatchScalarField& v2w = v2_.boundaryField()[this->patch().index()];
    const fvPatchScalarField& ew = epsilon_.boundaryField()[this->patch().index()];
    const fvPatchScalarField& kw = k_.boundaryField()[this->patch().index()];

    const scalarField& nuw = nu_.boundaryField()[this->patch().index()];

        this->patchInternalField() = -
20.0*(pow(nuw,2))*v2w.patchInternalField()/(ew.patchInternalField()*pow(y,4));

        Info << " f = " << -
20.0*(pow(nuw,2))*v2w.patchInternalField()/(ew.patchInternalField()*pow(y,4)) <<
endl;

    // Apply the patch internal field as a constraint in the matrix
    matrix.setValues(this->patch().faceCells(), this->patchInternalField());
}

makePatchTypeField

```

```
(
    fvPatchScalarField,
    fixedInternalF
);
}

// ***** //
```

### A.3 Modelos anisotrópicos para o cálculo dos fluxos de calor turbulentos - AFM e GGDH

```

{
    volScalarField kappaLam("kappaLam", turbulence->nu()/Pr);
    volScalarField kappaTur("kappaTur", turbulence->nut()/Prt);
    kappaTur.correctBoundaryConditions();
    volScalarField kappaEff("kappaEff", kappaLam + kappaTur);

    fvScalarMatrix TEqn
    (
        fvm::ddt(T)
        + fvm::div(phi, T)
        - fvm::laplacian(kappaEff, T)
        + fvc::div(thf)
        ==
        - fvc::laplacian(kappaEff, T)
        + fvc::laplacian(kappaLam, T)
        + q
    );

    TEqn.relax();
    TEqn.solve(mesh.solver(T.select(finalIter)));

    rhok = 1.0 - beta*(T - TRef);
}

```

```

{
    volScalarField kappaTheta("kappaTheta", turbulence->nu() + turbulence-
>nut()/sigmatheta);

//***** Invariant of Reynolds stress *****//

    aij = turbulence->R()/turbulence->k() - (2.0/3.0)*I;

//***** Update the time scale *****//

    // tau = max(turbulence->k()/turbulence->epsilon(), CT*sqrt(turbulence-
>nu()/turbulence->epsilon()));

//***** Dissipation rate of temperature variance (etheta) ****//
    volScalarField A2 = aij && aij; //Second Reynolds stress anisotropy invariant
    volScalarField A3 = aij && (aij & aij); //Third Reynolds stress anisotropy
invariant

    volScalarField At = 1.0 - (9.0/8.0)*(A2 - A3);

    volScalarField A2theta = 0.0 * magSqr(thf)/(thetaSquare*turbulence->k()); //Scalar
flux invariant
    volScalarField R1 = 0.0 * max(sqrt(A2)/(1.0+A2theta), 0.6*At); //Thermal to
mechanical time-scale ratio
    volScalarField Ptheta = 0.0 * (-thf) & fvc::grad(T); //Thermal production term

//    volVectorField Pm = 0.0 * fvc::grad(U) & thf;

//***** Algebraic turbulent heat flux (thf) *****//

    int thfOuterCorr = 60;
    double underRelaxation = 0.05;
    for(int thfCorr=0; thfCorr<thfOuterCorr; thfCorr++)
    {

        thf = (1.0-underRelaxation) * thf
            + underRelaxation * (
                - 0.15*(turbulence->k()/turbulence->epsilon())*(
                    1.0*(turbulence->R() & fvc::grad(T))
                    + xi*(fvc::grad(U) & thf)
                    + etal*beta*g*thetaSquare
                )
                //      + Ctheta1*(aij & thf)
            );

    }

/* //***** GGDH (thf) *****//

    int thfOuterCorr = 60;
    double underRelaxation = 0.05;
    for(int thfCorr=0; thfCorr<thfOuterCorr; thfCorr++)
    {

        thf = (1.0-underRelaxation) * thf
            + underRelaxation * (
                - 0.15*(turbulence->k()/turbulence->epsilon())*(
                    1.0*(turbulence->R() & fvc::grad(T))
                )
            );

    }

*/

```

```

/* //***** SGDH (thf) *****/
double underRelaxation = 0.5;
thf = (1.0-underRelaxation) * thf
      + underRelaxation * ((-turbulence->nut()/Prt)*fvc::grad(T)); //SGDH
*/

//***** Dissipation rate of temperature variance (etheta) *****/
A2theta = (1.0 - underRelaxation) * R1
          + underRelaxation * (magSqr(thf)/(thetaSquare*turbulence->k())); //Scalar
flux invariant

R1 = 0.5; //Thermal to mechanical time-scale ratio

Ptheta = (1.0 - underRelaxation) * Ptheta
          + underRelaxation * (-thf & fvc::grad(T)); //
Thermal production term

//***** Variance temperature transport equation *****/
fvScalarMatrix thetaSquareEqn
(
    fvm::ddt(thetaSquare)
  + fvm::div(phi, thetaSquare)
  - fvm::laplacian(kappatheta, thetaSquare)
  ==
    2.0*Ptheta
  - fvm::Sp((turbulence->epsilon()/(R1 * turbulence->k())), thetaSquare)
);

thetaSquareEqn.relax();
thetaSquareEqn.solve();
bound(thetaSquare, thetaSquare0);

}

```