

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTO TURBULENTO EM SUBCANAL DE PWR USANDO OPENFOAM

Pamela María Dahl

Dissertação de Mestrado 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 Mestre
em Engenharia Nuclear.

Orientador: Su Jian

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2015

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTO TURBULENTO EM
SUBCANAL DE PWR USANDO OPENFOAM

Pamela María Dahl

DISSERTAÇÃO 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 MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Su Jian, D.Sc.

Dr. José Luiz Horácio Faccini, D.Sc.

Prof. An Chen, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
FEVEREIRO DE 2015

Dahl, Pamela María

Simulação computacional de escoamento turbulento em subcanal de PWR usando OpenFOAM/Pamela María Dahl. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XV, 61 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Su Jian

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 59 – 61.

1. nuclear. 2. subchannel. 3. CFD. I. Jian, Su. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*À minha família pelo amor e
paciência!*

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Prof. Su Jian pelos conselhos, pela generosidade e pelo tempo investido para me acompanhar. E pela coragem de aceitar uma estrangeira para orientar...Obrigada!

Agradeço ao Laboratório de Simulação e Métodos em Engenharia (LASME), pelo suporte físico computacional, e aos meus colegas pelo suporte cotidiano e as discussões interessantes.

Agradeço ao Pessoal do PEN, pelos conselhos e pela ajuda.

Agradeço aos Professores do Curso, pela formação recebida e pelo suporte constante.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro(FAPERJ) pelo suporte financeiro.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTO TURBULENTO EM SUBCANAL DE PWR USANDO OPENFOAM

Pamela María Dahl

Fevereiro/2015

Orientador: Su Jian

Programa: Engenharia Nuclear

Apresenta-se uma análise dos efeitos das condições simuladas do regime turbulento no escoamento de um subcanal de PWR (arranjo quadrangular), visando uma compreensão básica do comportamento fluidodinâmico do escoamento em condições operacionais normais. São analisadas a convergência de malha e a escolha de modelo de turbulência em relação à qualidade dos resultados obtidos. A análise é baseada em resultados obtidos de simulações de CFD (Fluido Dinâmica Computacional), utilizando o código aberto OpenFOAM.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

COMPUTATIONAL SIMULATION OF TURBULENT FLOW IN A PWR
SUBCHANNEL USING OPENFOAM

Pamela María Dahl

February/2015

Advisor: Su Jian

Department: Nuclear Engineering

We present an analysis of the effects of turbulent flow conditions simulated in a PWR square subchannel, with the intent of understanding the basics of flow hydraulics behaviour in normal operating conditions. The choices of mesh size and turbulence model are discussed with relation to the quality of the obtained results. The analysis is based on results obtained from CFD simulations using open-source code OpenFOAM.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
Lista de Símbolos	xiii
Lista de Abreviaturas	xv
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivo	3
1.3 Organização do texto	4
2 Revisão Bibliográfica	6
3 Formulação Matemática	10
3.1 Equações governantes	11
3.1.1 Equações de Conservação tridimensionais	11
3.2 As equações de médias de Reynolds - RANS	13
3.3 Modelos de turbulência	16
4 Metodologia: CFD	20
4.1 OpenFOAM	22
5 Resultados e Discussões	26
5.1 Testes em malhas simples: tubo circular	27
5.1.1 Regime laminar	27
5.1.2 Regime turbulento	29

5.2	Simulações em malha de 1/8 de subcanal	35
5.2.1	Regime laminar	35
5.2.2	Regime turbulento	37
6	Conclusões e Sugestões	56
6.1	Conclusões	56
6.2	Sugestões	57

Lista de Figuras

1.1	Balanco transversal	3
1.2	Arfagem (movimento linear em sentido vertical)	3
3.1	Movimentos elementares possíveis no ambiente marino	10
3.2	Arranjo de 4 varetas	11
5.1	Malha tipo “wedge”.	28
5.2	Malha de 1/8 de tubo.	28
5.3	Pressão média na área vs comprimento do tubo, regime laminar. . . .	30
5.4	Velocidade: Sim. N° 2 (Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$), Sim. N° 8 ($\kappa - \epsilon$), Sim. N° 26 ($\kappa - \omega$)	32
5.5	Pressão: Sim. N° 2 (Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$), Sim. N° 8 ($\kappa - \epsilon$), Sim. N° 26 ($\kappa - \omega$)	33
5.6	Viscosidade turbulenta: Sim. N° 2 (Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$), Sim. N° 8 ($\kappa - \epsilon$), Sim. N° 26 ($\kappa - \omega$)	33
5.7	Pressão média na área vs comprimento do tubo	34
5.8	Sem refino na parede	35
5.9	Com refino na parede	35
5.10	Pressão média na área vs comprimento do subcanal	38
5.11	Planos considerados para calcular a média da pressão, a cada 0.1 m .	39
5.12	Campo de pressão no domínio da simulação	39
5.13	Pressão média na área vs comprimento do subcanal	41
5.14	Velocidade [m/s] vs distância [m] à parede na diagonal da saída . . .	45
5.15	Velocidade [m/s] vs distância [m] à parede na reta horizontal inferior da saída	46

5.16	Velocidade [m/s] vs distância [m] no plano de simetria vertical direito da saída	47
5.17	Velocidade: 10 ($\kappa - \omega$), 17 (Launder-Gibson RSTM), 29 (SST $\kappa - \omega$), 47 (SST $\kappa - \omega$)	48
5.18	Componentes da velocidade, sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$	49
5.19	Componentes do tensor de tensões de Reynolds, sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$	50
5.20	Variáveis turbulentas, sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$	51
5.21	Componentes da velocidade, sim N° 15, modelo Launder-Gibson RSTM	52
5.22	Componentes do tensor de tensões de Reynolds, sim N° 15, modelo Launder-Gibson RSTM	53
5.23	Variáveis turbulentas, sim N° 15, modelo Launder-Gibson RSTM	54
5.24	Tensão de parede normalizada, dados experimentais e de simulação.	55
5.25	Energia cinética turbulenta normalizada, na diagonal, dados experimentais e de simulação.	55

Lista de Tabelas

5.1	Parâmetros dos testes realizado com tubo circular.	28
5.2	Simulações realizadas com geometria circular, regime laminar.	29
5.3	Simulações realizadas com geometria circular, regime turbulento.	31
5.4	Parâmetros dos casos realizados de subcanal quadrangular, regime laminar.	36
5.5	Simulações com geometria 1/8 subcanal quadrangular, regime laminar.	37
5.6	Parâmetros dos casos realizados de subcanal quadrangular, regime turbulento.	40
5.7	Simulações realizadas para 1/8 de subcanal quadrangular, regime turbulento.	42
5.8	Simulações realizadas para 1/8 de subcanal quadrangular, regime turbulento, continuação.	43

Lista de Símbolos

A_z	Área transversal, normal à direção do eixo z [m^2], p. 34
D_e	Diâmetro equivalente [m], p. 26
D_i	Diâmetro interno [m], p. 26
G_m	Vazão mássica por unidade de área [$kg/m^2.s$], p. 26
P_w	Perímetro molhado [m], p. 34
U_i	Componente média da velocidade na direção i [m/s], p. 16
β	Aceleração angular, p. 14
ω	Velocidade angular, p. 14
$\mathbf{r}$	Vetor rádio ou posição, p. 14
δ_{ij}	Delta de Kronecker, p. 16
μ	Viscosidade dinâmica [$kg/m.s$], p. 26
μ_t	Viscosidade turbulenta [kg/m.s], p. 16
$\dot{m}$	Vazão mássica [k/s], p. 26
ρ	Densidade [kg/m^3], p. 16
τ_{ij}	Tensor de tensões de Reynolds, p. 16
k	Energia cinética turbulenta por unidade de massa [m^2/s^2], p. 16
u'_i	Componente flutuante da velocidade na direção i [m/s], p. 16

x_i Coordenada espacial na direção i [m], p. 16

Lista de Abreviaturas

BC	Condições de Contorno, p. 26
CEH	Comprimento de entrada hidrodinâmico, p. 26
CFD	Fluido Dinâmica Computacional, p. 1
DES	Detached Eddy Simulation, p. 15
DNS	Direct Numerical Simulation, p. 15
LES	Large Eddy Simulation, p. 6
PWR	Pressurized Water Reactor, p. 1
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes, p. 15
RSM	Reynolds Stress Model, p. 6
URANS	Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes, p. 6

Capítulo 1

Introdução

Os parâmetros de escoamento e de transferência de calor num canal aquecido de um Reator à Água Pressurizada (PWR: Pressurized Water Reactor) têm o potencial de mudar apreciavelmente, quando o canal é submetido a um ambiente marinho, devido às forças adicionais atuando sobre o dito canal, geradas pela movimentação pulsante das ondas oceânicas.

Existe a probabilidade de uma forte transferência transversal de massa e energia entre canais, devido à natureza pulsante das movimentações oceânicas e da limitada restrição das paredes, a não ser canais fechados como um tubo de secção circular ou canal de secção quadrada. Interessa pesquisar as consequências desses movimentos, utilizando CFD (Fluido Dinâmica Computacional), por constituírem uma metodologia já amplamente avaliada pela sua confiabilidade, economia de recursos, e viabilidade quando a alternativa experimental física é impossível ou envolve um risco significativo.

1.1 Motivação

Os reatores nucleares podem ser necessários em um navio por diferentes motivos. Um deles é a necessidade de energia das plantas de desalinização que provém água potável nas regiões costeiras. O recente interesse nestas plantas é porque tornam-se uma solução custo-efetiva quando comparadas as usinas terrestres, pois os períodos de construção são menores, têm a possibilidade de serem transportadas para onde forem necessárias, têm um desenho antisísmico mais simples, e têm vantagens no

procedimento de decomissionamento (Kostin et al., 2007). Outro caso, mais perto dos brasileiros, é a propulsão dos submarinos nucleares, com os atuais desenvolvimentos em relação à construção do Submarino Nuclear Brasileiro SNB 'Álvaro Alberto' SN10. Estes desenvolvimentos preconizam uma futura necessidade de métodos de avaliação das condições operativas e de segurança de plantas nucleares em flotação ou navegação.

Para isso, é preciso contar com a caracterização básica do escoamento do fluido refrigerante em condições operacionais normais. Desde o ponto de vista da mecânica dos fluidos, a maior diferença entre um reator nuclear montado sobre terra firme e outro em flotação ou navegação, é a influência das oscilações das ondas marinhas neste último caso. O comportamento termo-hidráulico dos reatores marinhos são influenciados por diferentes movimentos como balanço transversal, balanço longitudinal, e arfagem, entre outros. As oscilações mudam as forças efetivas atuantes no fluido refrigerante, e induzem flutuações no escoamento, que resultam em mudanças nos parâmetros de transferência de massa, momento e energia (Pendyala et al., 2008).

Nos escoamentos turbulentos dentro de tubos circulares e canais quadrangulares fechados de dimensões pequenas (aprox. 10 mm de diâmetro), verifica-se que o fluxo perpendicular ao sentido principal do escoamento é fortemente limitado pelas paredes do tubo do canal, mesmo em ambiente oceânico, e sendo submetido às forças adicionais resultantes das ondas marinhas.

Mas em subcanais abertos de arranjos quadrangulares, já se tem pesquisado que no referente aos parâmetros de escoamentos turbulentos e a distribuição de transferência de calor, se evidencia uma forte não uniformidade da temperatura e do fluxo mássico do refrigerante no arranjo de varetas de combustível. Isto produz um forte intercâmbio de massa e energia entre sub-canais, que afetam a distribuição no local dos parâmetros de escoamento locais dentro de cada sub-canal e, por conseguinte, também ao coeficiente local de transferência de calor. (Cheng et al., 2003)

No caso de um reator nuclear em ambiente marinho, se adiciona a complexidade de que o subcanal não pode ser considerado como um sistema inercial, devido às acelerações que produzem as ondas marinhas atuando sobre ele. O comportamento termo-hidráulico é influenciado pelos diferentes movimentos no mar: balanço transversal, balanço longitudinal, e arfagem (ou em sentido vertical) (figuras 1.1 e 1.2).

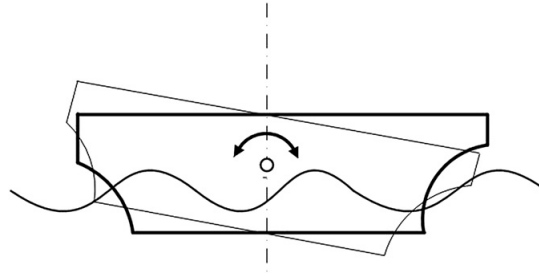


Figura 1.1: Balanço transversal

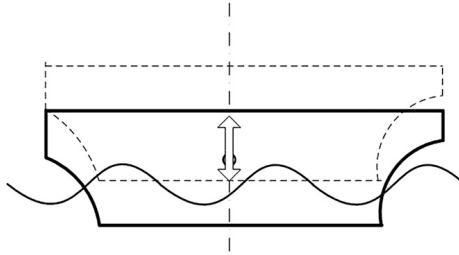


Figura 1.2: Arfagem (movimento linear em sentido vertical)

Tendo em conta a escassa literatura sobre os efeitos dos movimentos oceânicos sobre os parâmetros de escoamento e de transferência de calor nos subcanais típicos de reatores nucleares, visa-se analisar estes efeitos utilizando o método de Fluidodinâmica Computacional (CFD).

1.2 Objetivo

O objetivo deste trabalho é investigar os parâmetros do escoamento (como o fator de fricção) num subcanal de arranjo quadrangular. Mais especificamente a influência do movimento de arfagem, visando a aplicação de métodos numéricos da fluido dinâmica computacional (CFD) como ferramenta para o estudo desse problema.

O foco do trabalho é analisar o comportamento transiente do escoamento turbulento do refrigerante, utilizando modelos de turbulência apropriados no código aberto OpenFOAM.

O estudo envolve as seguintes etapas, não necessariamente consecutivas:

- escolha do tipo de repartição de malha mais apropriado para atingir resultados independentes de um ulterior refino de malha, visando obter uma definição apropriada em zonas de maiores gradientes, para obtenção da precisão desejada, com o menor custo computacional associado possível;

- análise de modelos de turbulência apropriados para dar conta da não-inercialidade do sistema, tendo em conta os seguintes fatores: existência do modelo em OpenFOAM ou necessidade de sua implementação, melhor exatidão, e menor custo computacional;
- análise dos métodos matemáticos utilizados mais apropriados (linear solvers), que irão influenciar na exatidão e representatividade da solução e no custo computacional (ou tempo de rodada x número de CPUs) derivado do número de iterações necessárias;
- simulações tridimensionais em um elemento de comprimento pequeno, para teste dos itens anteriores, com menor número de células (e, por conseguinte, menor tempo de rodada) que facilite a avaliação correta dos itens anteriores.
- simulações tridimensionais em elemento de comprimento definitivo representativo, com a repartição e refino de malha, modelos de turbulência e métodos matemáticos escolhidos, em estado estacionário e em estado transiente.

Uma vez que o interesse desse trabalho encontra-se na modelagem da turbulência em sistemas não inerciais (por conta das acelerações produzidas por movimentos tais como arfagem e balanço transversal), é importante investigar a correta representação das forças adicionais na equação de transporte de quantidade de movimento (por exemplo, assumir uma velocidade média pulsante na entrada e adicionar uma força adicional pulsante como termo fonte), objetivando-se uma melhor compreensão da influência de tais termos no cálculo numérico de convecção forçada.

1.3 Organização do texto

Neste primeiro capítulo foi apresentada de forma geral a necessidade de obter parâmetros confiáveis do escoamento em um subcanal entre vareta de combustível, considerando regime turbulento, e as implicações do ambiente marinho sobre o escoamento.

O segundo capítulo apresenta uma revisão bibliográfica sobre trabalhos teóricos, experimentais, e de simulações em CFD realizados no intuito de investigar e avaliar

diferentes situações de escoamentos em subcanais, em regimes laminares e turbulentos, e em ambientes marinhos.

O capítulo terceiro trata-se da formulação matemática das equações governantes do problema. O capítulo quarto, da metodologia (CFD) e a ferramenta computacional (OpenFOAM) utilizadas para a obtenção dos resultados. Nestes dois capítulos trata-se também das hipóteses adotadas, dos modelos de turbulência considerados e suas equações, e dos métodos numéricos adotados.

No capítulos quinto apresentam-se os resultados e a discussão dos mesmos.

O último capítulo, o capítulo sexto, apresenta as principais conclusões da dissertação, e propostas para trabalhos futuros relacionados à influência de forças externas pulsantes sobre o escoamento turbulento.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Uma acurada modelagem do escoamento em subcanais é necessária para os códigos de análise dos ditos subcanais terem boa previsibilidade no projeto de reatores nucleares.

O movimento dos turbilhões nas fendas entre subcanais é o elemento dominante no intercâmbio de momento e energia através das fendas. Em canais fechados como tubos circulares, onde o escoamento é muito limitado pelas paredes, seria apropriado utilizar os modelos de turbulência de primeira ordem, os quais assumem um comportamento isotrópico da turbulência. Mas nos canais não limitados completamente por paredes, tais como os subcanais de um arranjo de varetas de combustível, pode ocorrer um comportamento anisotrópico da turbulência e aparecerem escoamentos secundários.

Recentemente, observou-se por CFD que a distribuição da transferência de calor em um subcanal é fortemente não uniforme. Consequentemente, devido à distribuição não uniforme da temperatura do refrigerante e de sua vazão mássica no arranjo de varetas, existe um forte intercâmbio de massa e energia entre subcanais. O dito intercâmbio afeta os parâmetros locais do escoamento dentro de cada subcanal, e também, do coeficiente de transferência de calor local (Cheng, Schulenberg, Bittermann, and Rau, 2003).

Nas aplicações de engenharia, os diâmetros dos tubos utilizados são relativamente pequenos, da ordem de 10 mm. Nesses casos, o escoamento está muito limitado pela parede, mesmo em um ambiente oceânico. Assim, o efeito dos movimentos marinhos sobre as características do escoamento e a transferência de calor é bem limitado. No entanto, em um subcanal de reator nuclear de tipo aberto, a mistura turbulenta entre

subcanais não pode ser desestimada. O escoamento transversal dentro da grade pode ser afetado pelas forças adicionais decorrentes das ondas marinhas.

O escoamento em regime laminar é, por natureza, o mais regular, e pode ser analisado teoricamente, estabelecendo modelos matemáticos para sua descrição (Yan et al., 2009, 2010a).

Qualquer movimento em condições oceânicas pode-se decompor em seis movimentos, três de translação e três de rotação segundo os eixos de coordenadas, e considerados como mutuamente independentes.

No entanto, em condições normais operativas o escoamento é quase sempre turbulento, e, portanto, dificilmente analisável pelo método teórico e descritível matematicamente em forma completa.

Yan et al. (2011e) analisaram as características do escoamento e da transferência de calor em arranjos típicos de 4 e 7 varetas submetidos a ambiente marinho, mediante CFD, utilizando o código FLUENT. Eles encontraram que o efeito das forças adicionais perpendiculares à direção do escoamento nos arranjos de 7 varetas é muito leve devido à restrição das paredes dos subcanais, enquanto o efeito nos parâmetros do escoamento e a transferência de calor é bem maior no arranjo de 4 varetas devido a uma menor restrição das paredes.

Yan et al. (2011c) analisaram os efeitos do balanço transversal nos parâmetros do escoamento e do intercâmbio de calor num subcanal típico quadrangular em regime turbulento, mediante LES e URANS, utilizando o código comercial Fluent. Em URANS, utilizaram um modelo de turbulência de tensor de tensões de Reynolds (RSM), por a sua capacidade de descrever o anisotropismo do escoamento. Em LES, as pequenas escalas filtradas foram modeladas com o modelo de Smagorinsky-Lilly. Os esquemas de discretização e numéricos utilizados foram os seguintes: método dos volumes finitos, esquemas de segunda ordem (“cell-centered”), com “upwind” no termo convectivo. Com respeito ao tempo, utilizaram um esquema implícito de 2ª ordem. O algoritmo utilizado foi PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators). A força adicional, utilizada para descrever os efeitos do balanço transversal, foi dividida em seus dois efeitos: 1) a força no sentido axial, que afeta só à velocidade do escoamento, e produz oscilações no perfil de velocidades, e 2) a força transversal, a única que incluíram dentro da equação de conservação do momento. Tanto neste

trabalho como em Yan et al. (2011d), eles encontraram que ao diminuir o período das oscilações, o fator de atrito e a tensão na parede média aumentam.

Yan et al. (2011g) analisaram os efeitos de mistura entre subcanais triangulares devido às oscilações transversais no escoamento por movimentos de balanço transversal, e aos efeitos no transporte de calor e momento neste tipo de arranjo de varetas combustíveis. Também utilizaram o código comercial Fluent para fazer as simulações, com o algoritmo PISO, discretização temporal com esquema Euler implícito, e do termo convectivo com o esquema Quadratic Upstream Interpolation of Convective Kinematics (QUICK). O modelo de turbulência utilizado foi o RSM, dentro das equações URANS, e utilizaram a Lei da Parede, mantendo $30 < y^+ < 100$. Encontraram que o dito modelo pode simular adequadamente ao escoamento, concordando com os dados experimentais. A melhor concordância foi para a velocidade no sentido principal do escoamento e a temperatura da parede (com diferenças de menos de 5%) que para a tensão na parede. Acharam que o escoamento é altamente afetado pelas pulsações dos grandes vórtices, os maiores responsáveis pela transferência de calor e momento nas janelas entre subcanais, mas que os efeitos do balanço transversal nos parâmetros termohidráulicos foram fracos.

Horváth and Dressel (2012) analisaram os efeitos do refinamento da malha e dos modelos de turbulência em simulações computacionais feitas com o código comercial StarCD v.4.12 para a obtenção dos campos do escoamento num subcanal quadrangular, procurando encontrar um equilíbrio entre resultados acurados e a utilização racional dos recursos computacionais. Eles fizeram simulações para geometrias com duas relações pitch sobre diâmetro de vareta (P/D): 1,194 e 1,326, utilizando os resultados experimentais de Hooper (1980) para comparar os resultados das simulações com a primeira relação P/D . Testaron quatro modelos de turbulência: RNG $k - \epsilon$, SST $k - \omega$, o Speziale-Sarkar-Gatski RSM, e o Gibson & Launder RSM, utilizando Leis de Parede convencionais, um esquema de segunda ordem para a discretização dos termos convectivos, e o algoritmo SIMPLE. Os resultados calculados com o modelo Gibson & Launder RSM concordaram melhor com os resultados experimentais, tendo a vantagem de poder representar o comportamento anisotrópico das tensões normais. Adicionalmente, encontraram que os resultados obtidos com a geometria com a relação P/D de 1,326 evidenciam um escoamento mais similar ao axissimétrico

típico interno de tubo.

Hooper (1980) realizou estudos experimentais do escoamento monofásico turbulento em um subcanal de arranjo quadrático, com duas relações P/D : 1,194 e 1,107. Ele obteve medições da distribuição da velocidade média, da variação da tensão de parede, e do tensor de tensões de Reynolds, encontrando que o afastamento do comportamento do escoamento turbulento axissimétrico de tubo interno depende fortemente da relação P/D . A maior variação da tensão de parede com o ângulo azimutal ocorre para o P/D menor, indicando um maior afastamento do escoamento axissimétrico. Adicionalmente encontrou que a variação da tensão de parede aparenta ser independente do número de Reynolds do escoamento. A distribuição de velocidade concorda muito bem com a Lei da Parede. As medições das tensões de Reynolds sugerem que a estrutura do escoamento na diagonal principal do subcanal é a mais similar com a do escoamento axissimétrico do tubo.

Hooper and Wood (1984) fizeram medições da velocidade média axial, da tensão de parede e do tensor de tensões de Reynolds em escoamento plenamente desenvolvido de subcanal de arranjo quadrático de relação P/D 1,107, para vários números de Reynolds. Em todos os casos, as velocidades médias do escoamento secundário não atingiram o limite de detecção de 1% da velocidade axial. As medições da velocidade média axial foram consistentes com a Lei da Parede logarítmica. Mas as viscosidades turbulentas radial e azimutal resultaram bem diferentes, pelo que não pode-se assumir isotropia. As tensões de Reynolds são diferentes das tensões no escoamento tubular, na região do espaçamento entre varetas de combustível.

Hooper and Rehme (1984) mostraram que as intensidades turbulentas axial e azimutal na região do espaçamento entre varetas aumentam fortemente ao dito espaçamento diminuir. Fizeram medições da velocidade média axial, da variação da tensão de parede, da distribuição axial da pressão e das tensões de Reynolds. Também não detectaram velocidades médias de escoamento secundário maiores ao 1% da velocidade axial local, indicando assim uma ausência de componentes significativas de dito escoamento secundário. E encontraram uma forte anisotropia dos procesos de transporte turbulento na região do espaçamento entre varetas, característica a se ter em conta em modelos numéricos do escoamento no subcanal.

Capítulo 3

Formulação Matemática

O ambiente marino envolve seis graus de liberdade, três de traslação e três de rotação, segundo os três eixos de coordenadas (figura 3.1). A maioria dos movimentos é resultado de uma combinação linear destes seis tipos de movimentos. Sendo assim, pode-se analisar o efeito sobre o escoamento de um movimento de traslação, arfagem (*heaving*) ou um movimento de rotação, balanço transversal (*rolling*).

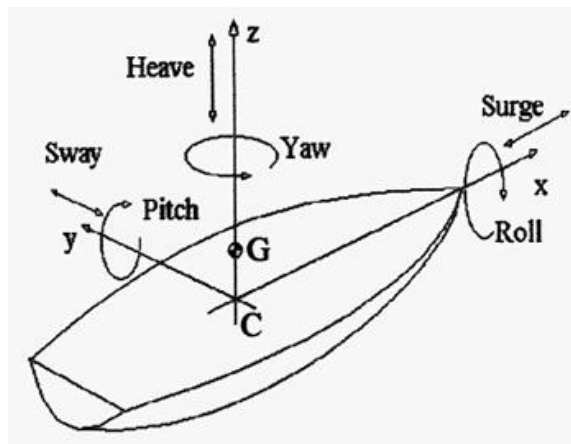


Figura 3.1: Movimentos elementares possíveis no ambiente marino

O subcanal considerado é de 4 varetas, no qual o diâmetro das varetas é de 9.5 mm, e o pitch é de 12.6 mm (figura 3.2). O centro de rotação localiza-se no centro da superfície inferior do subcanal. A rotação considerada é ao redor do eixo Y.

No caso de arfagem, a consequência imediata sobre o escoamento é uma variação pulsante na velocidade no sentido principal do escoamento. Este caso pode representar-se especificando uma condição de contorno para a velocidade, de característica pulsante, na superfície de entrada.

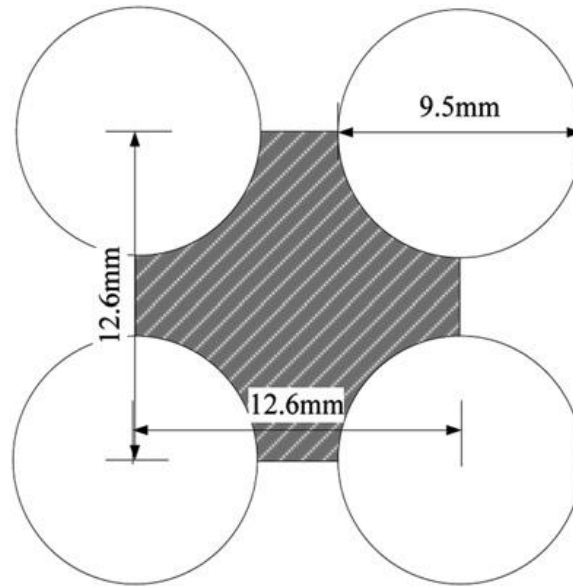


Figura 3.2: Arranjo de 4 varetas

3.1 Equações governantes

As equações que governam o estudo da convecção forçada em ambiente marinho são, de forma geral, as equações de conservação de massa, de momento e de energia. No caso mais geral, precisam-se também de equações de estado para fechar o sistema. No caso de interesse, sendo que o fluido refrigerante (água) é um fluido incompressível, as equações de estado perdem significado e desacopla-se a equação de energia do sistema acoplado de equações de massa e momento. Quando resolvidas numericamente sem introduzir aproximações (modelagem) nem erros (com exceção dos erros numéricos), é o caso das Simulações Numéricas Diretas (DNS), sumamente custosas e demoradas. No presente estudo, aplicaremos as aproximações pertinentes aos modelos RANS, muito utilizados em casos da engenharia. Trataremos o regimes laminar e turbulento, e utilizaremos as equações decorrentes de considerar o fluido incompressível.

3.1.1 Equações de Conservação tridimensionais

As equações de conservação de massa, momentum e energia podem ser escritas, respectivamente, das seguintes formas,

- Equação da continuidade ou conservação de massa

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

- Equações de Navier-Stokes ou conservação de momento

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

sendo f_i o termo fonte, e δ o tensor identidade ou *delta de Kronecker* (no termo que relaciona a parte das tensões viscosas com as deformações volumétricas),

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

- Equação da Temperatura ou conservação de energia

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad (3.3)$$

No caso de escoamentos incompressíveis com fluidos viscosos (newtonianos), as equações de massa e momento podem ser expressadas da seguinte maneira:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\sigma_{ij}}{\rho} + f_i \quad (3.5)$$

onde σ_{ij} representa o tensor de tensões decorrente da soma da pressão e viscosidade definido por

$$\sigma_{ij} = -\frac{p}{\rho} \delta_{ij} + \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.6)$$

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 que foram utilizados nesse trabalho de tese.

3.2 As equações de médias de Reynolds - RANS

Quando interessar investigar as consequências das flutuações turbulentas sobre as propriedades médias do escoamento, modificam-se as equações de conservação introduzindo a decomposição dos parâmetros que caracterizam o escoamento (como velocidade, pressão e temperatura) em uma componente “média” e outra “flutuante”. Dessa forma, o campo da velocidade instantâneo turbulento $\mathbf{u}(x, t)$ é descrito por

$$\mathbf{u}(x, t) = \bar{\mathbf{u}}(x) + \mathbf{u}'(x, t) \quad (3.7)$$

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

Assim, possibilita-se o tratamento de propriedades bem comportadas do escoamento turbulento (componentes médias) e a obtenção de um sistema de equações para elas, e o tratamento das contribuições flutuantes de caráter complexo é realizado separadamente. A parte flutuante carrega a dinâmica do escoamento turbulento, em virtude da sua dependência temporal, e que por sua vez é responsável pela necessidade de modelagem das flutuações características de escoamentos turbulentos.

O componente médio da decomposição é definido por

$$\bar{u}(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T u(x, t) dt \quad (3.8)$$

em que T é um intervalo de tempo o suficientemente longo para que a média seja representativa do comportamento estacionário do escoamento. Tomando a média temporal da decomposição (3.7), e considerando que a média da média é a própria média ($\overline{\overline{u}(x)} = \overline{u(x)}$), tem-se que

$$\overline{u'}(x, t) = 0 \quad (3.9)$$

Aplica-se o mesmo procedimento para os demais parâmetros, como pressão e temperatura.

Interessa a representação dos escoamentos de fluidos incompressíveis por meio das equações de conservação aplicando o procedimento descrito nas variáveis de ditas equações. O objetivo é obter soluções médias bem comportadas e aplicar o tratamento adequado aos termos de flutuação para que sejam representativos da física do

problema.

Tomando a média da equação da continuidade, por linearidade dos operadores, tem-se

$$\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} = 0 \quad (3.10)$$

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

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial(\overline{u_i} + u'_i)}{\partial x_i} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.11)$$

Tomando a média das equações de Navier-Stokes (sem considerar o termo fonte agora) tem-se

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \overline{\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} \quad (3.12)$$

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 no segundo termo, tem-se

$$\frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}[(\overline{u_i} + u'_i)(\overline{u_j} + u'_j)] = \frac{\partial}{\partial x_j}[\overline{u_i u_j} + \overline{u_i u'_j} + \overline{u'_i u_j} + \overline{u'_i u'_j}] \quad (3.13)$$

Aplicando a média temporal na equação 3.13, tem-se

$$\frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}[\overline{\overline{u_i u_j}} + \overline{\overline{u_i u'_j}} + \overline{\overline{u'_i u_j}} + \overline{\overline{u'_i u'_j}}] \quad (3.14)$$

A equação 3.14 apresenta os quatro termos de correlação temporal. Sendo 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 3.14 pode ser reescrita por

$$\frac{\partial \overline{u_j u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}[\overline{\overline{u_i u_j}} + \overline{u'_i u'_j}] \quad (3.15)$$

Substituindo a equação 3.15 na equação 3.12 (sem o termo transiente) obtém-se as equações médias de Reynolds Navier-Stokes (RANS),

$$\overline{u_j} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}[\overline{\sigma_{ij}} + \overline{u'_i u'_j}] \quad (3.16)$$

A equação 3.16 pode ser rescrita para cada um dos componentes da velocidade, conforme mostram as equações 3.17, 3.18 e 3.19, em notação vetorial, considerando um escoamento incompressível e tridimensional, já com as componentes de um termo fonte (forças externas), se houver.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (U\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla \cdot (\nabla(U)) - \left[\frac{\partial \overline{u'^2}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z} \right] + \frac{F_x}{\rho} \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (V\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \nabla \cdot (\nabla(V)) - \left[\frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z} \right] + \frac{F_y}{\rho} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot (W\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla \cdot (\nabla(W)) - \left[\frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} \right] + \frac{F_z}{\rho} \quad (3.19)$$

Podemos expressá-las em forma mais compacta, com notação indicial, por

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \left(\nu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \overline{u_k}}{\partial x_k} \right)}{\partial x_j} + \frac{\partial (-\overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j} + f_i \quad (3.20)$$

f_i , o termo fonte, neste caso estaria definido por,

$$f_i = \mathbf{a} = \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) + 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u} \quad (3.21)$$

O movimento de arfagem envolve só uma movimentação pulsante no eixo vertical. A dita movimentação produz uma força adicional na direção vertical que só afeta a velocidade no sentido do escoamento principal. O efeito é uma oscilação da velocidade na direção vertical (ou seja, do escoamento principal). Não existem forças adicionais na direção perpendicular ao escoamento (Yan and Gu, 2012)

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \overline{\theta u_i} \right) \quad (3.22)$$

As próximas subseções apresentam as principais equações de cada modelo RANS investigado e utilizado nas simulações desse trabalho.

3.3 Modelos de turbulência

Em escoamentos turbulentos, altamente complexos, a resolução das equações governantes requer a utilização de modelos que facilitem o tratamento das mesmas, visando a melhor relação entre os seguintes fatores: esforço computacional mínimo e máxima acurácia. Em virtude da ampla faixa de escalas de comprimento dos turbilhões presentes na turbulência, a primeira abordagem levada em consideração pelos modelos de turbulência é justamente o tratamento numérico dessas escalas, para um posterior 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 tradicionalmente em três grupos (Versteeg and Malalasekera, 2007) (Wilcox, 2006), mas recentemente apareceu um quarto grupo:

- Modelos de turbulência para as equações de médias de Reynolds Navier-Stokes (RANS): Apresentam como foco principal o escoamento médio e os efeitos da turbulência nas propriedades médias, visto que as variáveis envolvidas nas equações são definidas por uma componente média e uma componente flutuante. Antes de aplicar o método numérico, nas equações de Navier-Stokes se faz uma média no tempo. A aplicação dessa consideração leva à geração de termos adicionais, devido às interações entre as várias flutuações turbulentas. Um desses termos é o tensor de tensões de Reynolds, o qual pode ser modelado de diferentes maneiras, de acordo com cada modelo. Alguns dos termos das equações podem ser calculados em forma exata, mas outros devem ser modelados. Na modelagem congruente desses termos, radica a arte e a inserção de maior ou menor erro nos resultados. De forma geral, esses modelos podem ser divididos tendo com base o número de equações de transporte adicionais que precisam ser resolvidas junto com as equações do escoamento RANS:

- 0: nenhuma equação adicional. Exemplo: modelos de comprimento de mistura, onde as tensões são descritas por fórmulas algébricas simples para a viscosidade turbulenta como função da posição.

- 1: uma equação adicional. Exemplo: modelo de Spallart-Allmaras.
- 2: duas equações adicionais. Exemplos: modelos k - ε , k - ω , de tensões algébrico, Launder-Sharma- k - ε e SST (Shear Stress Transport).
- 7: sete equações adicionais. Exemplo: modelos de tensões de Reynolds (Launder, Reece & Rodi; Speziale, Sarkar & Gatski; Launder & Gibson).

Vários modelos se baseiam na existência de uma analogia entre a ação das tensões viscosas e as tensões de Reynolds no escoamento médio. Ambas tensões aparecem no lado direito da equação de momento, e na lei de viscosidade de Newton as tensões viscosas se assumem proporcionais à taxa de deformação. Boussinesq propôs, em 1877, uma relação similar de proporcionalidade entre as tensões de Reynolds e as taxas médias de deformação (“Hipótese de Boussinesq”), sendo o coeficiente de proporcionalidade denominado de “viscosidade turbulenta” μ_t .

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}$$

Isto acarreta uma consequência imediata: a isotropia do escoamento turbulento (a relação entre as tensões de Reynolds e a taxa média de deformação é a mesma em todas as direções).

Também desenvolveram-se modelos baseados em relações não lineares 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.

No caso de uma equação de transporte adicional, ela pode ser uma PDE para a energia cinética turbulenta k , ou para a viscosidade turbulenta (caso do modelo de Spallart-Allmaras). No caso de duas, normalmente há uma equação para k mais uma outra variável turbulenta como ε (taxa de dissipação de energia cinética turbulenta) ou ω (vorticidade, ou taxa de dissipação específica, ou frequência turbulenta). Já no caso dos modelos de sete equações (usualmente denominados de modelos de 2a. ordem de fechamento), eles têm uma equação para uma variável turbulenta (normalmente ε), e o tensor de tensões de Reynolds é calculado com mais uma equação de transporte para cada componente

independente do tensor (6, por ser ele simétrico). Se bem cada uma das componentes do tensor é calculada mediante uma PDE individual, as ditas PDEs não são equações de transporte exatas, pois alguns dos termos delas são modelados, e não calculados exatamente.

Para a maioria dos casos em engenharia não é necessário resolver os detalhes das flutuações turbulentas, e é suficiente com obter informação das propriedades médias no tempo do escoamento. Por isso os modelos RANS são os mais utilizados.

- Simulação de grandes escalas (LES): Filtra espacialmente as equações não-estacionárias de Navier-Stokes, calculando em detalhe os turbilhões maiores que o filtro e modelando as pequenas escalas. Envolve maior esforço computacional em relação às simulações RANS, visto que as equações são resolvidas para os vórtices de maiores escalas, sem médias no tempo.
- Simulação numérica direta (DNS): Resolve diretamente todas as escalas de comprimento dos vórtices de turbulência. As equações de continuidade e de Navier-Stokes são resolvidas por meio da discretização espacial do domínio (suficientemente grande para incluir as escalas maiores) 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. É a técnica de simulação da turbulência que maior esforço computacional e capacidade de armazenamento requer (pode-se provar que as dimensões das malhas necessárias são proporcionais ao $Re^{9/4}$), sendo portanto, a menos aplicada em problemas de fins industriais, pelo alto custo e demora em obter resultados.
- Simulação de vórtices separados da parede (DES: Detached Eddy Simulation): Concebido como um híbrido entre modelagens RANS e LES, as equações do modelo de turbulência em DES se comportam como as equações RANS na região perto da parede, e fazem uma transição para LES na medida que se afastam dela. Começou a ser utilizado recentemente, com aplicação em escoamentos contidos por paredes, nos quais os métodos puramente LES seriam custosos demais.

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 foram discutidos nas seções anteriores.

Capítulo 4

Metodologia: CFD

Adota-se a simulação numérica como método, por ter sido amplamente utilizada com o objetivo de fornecer informações a respeito dos parâmetros de escoamento de fluidos em diversas condições, com a grande vantagem do baixo custo em relação aos custos de trabalhos similares experimentais. Tais trabalhos experimentais são, às vezes, impraticáveis, seja por limitações físicas ou por considerações de segurança.

Na tentativa de favorecer uma visão mais detalhada a respeito do comportamento de fluidos sob acelerações pulsantes enquanto em regime de escoamento turbulento, assim como uma compreensão minuciosa a cerca das propriedades do escoamento como, por exemplo, o campo de velocidade, o campo de pressão, a transferência de calor, etc., entram em ação as técnicas da fluido dinâmica computacional (CFD).

CFD é a análise de sistemas que envolvem escoamento de fluidos, transferência de calor e outros fenômenos associados, tais como reações químicas, por meio de simulações numéricas em computador. É uma técnica potente e sumamente difundida em diversas áreas industriais, tais como aerodinâmica de veículos aeroespaciais e terrestres, hidrodinâmica de navios, combustão em motores de combustão interna, turbinas de gas, turbomáquinas em geral, resfriamento de microcircuitos em engenharia eletrônica, meteorologia, engenharia biomédica (escoamento do sangue em artérias e veias), etc.. Aplicações de simulações de fluidodinâmica abrangem também projetos de reatores nucleares, incluindo falhas de componentes, escoamentos mono e multifásicos, escoamentos em convecção natural e forçada, e acidentes severos em usinas nucleares. Possui a capacidade de obter campos, como os de concentração, velocidade, pressão e temperatura, tanto no espaço como no tempo, por meio de

modelos microscópicos baseados nos princípios de conservação de massa, da energia e da quantidade de movimento. Além disso, permite o cálculo de variáveis específicas (por exemplo a pressão média em seções predefinidas) com base à ditos campos.

Atualmente, CFD é considerada como o terceiro tipo de métodos de pesquisa no campo da mecânica dos fluidos, junto com os métodos teórico e experimental.

Os códigos CFD se estruturam com centro nos algoritmos numéricos que podem resolver problemas de escoamento de fluidos. Todos os códigos comerciais (mas nem sempre os abertos) incluem interfaces sofisticadas para o ingresso dos parâmetros do problema e para o exame dos resultados. Assim, os códigos podem conter três elementos principais:

- Pré-processador: onde se ingressam os parâmetros de um problema de fluidos num programa de CFD por meio de uma interface amigável com o usuário, e a subsequente transformação em um formato utilizável pelo solver. As tarefas que envolvem esta etapa são as seguintes:
 - definição da geometria (o domínio computacional),
 - geração da malha (subdivisão do domínio em pequenas células de volumes de controle),
 - definição dos fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados,
 - definição das propriedades do fluido,
 - definição para rodagem em paralelo (método de descomposição, número de CPUs a serem utilizados),
 - especificação das condições de borde e iniciais apropriadas.
- Solver matemático: a parte principal e indispensável. Existem três correntes principais de técnicas de solução numérica: diferenças finitas, elementos finitos e métodos espectrais. Dentro das diferenças finitas encontra-se o método de volumes finitos, especialmente interessante quando se trabalha com equações de conservação. O algoritmo numérico consiste dos seguintes passos:
 - integração das equações governantes do escoamento do fluido em todos os volumes (finitos) de controle do domínio,

- discretização: conversão das equações integrais resultantes em um sistema matricial de equações algébricas,
 - solução do sistema matricial das equações algébricas por meio de um método iterativo.
- Post-processor: onde se manipulam e visualizam os resultados. Pode incluir as seguintes facilidades:
 - vistas (display) da geometria e grilha,
 - plotagens vetoriais,
 - plotagens sobre linhas,
 - plotagens 2D e 3D,
 - seguimento de partícula,
 - manipulação da vista: translação, rotação, escalamento, etc.,
 - cálculos diversos (médias de propriedades em seções, integrações, etc.),
 - animação para visualização dinâmica.(Versteeg and Malalasekera, 2007)

Entre os programas de simulação numérica de fluido dinâmica computacional, se destacam os pacotes comerciais da ANSYS, como FLUENT e CFX, e também os códigos abertos OpenFOAM, deal.ii, SU2 (Stanford University Unstructured) suite, Mefisto, MFX, etc.. Nem todos os modelos de turbulência estão disponíveis nestes programas, mas OpenFOAM já possui uma grande variedade de modelos implementados, e se algum modelo particular não estiver, tem a vantagem de poder ser adicionado pelo usuário. Esta é uma das razões principais pela qual se adotou OpenFOAM como ferramenta de simulação utilizada neste trabalho.

4.1 OpenFOAM

O OpenFOAM (“Open Source Field Operation and Manipulation”) é fundamentalmente uma “caixa de ferramentas” em C++ que abrange diversos solvers numéricos padrão e permite sua customização para problemas de CFD básica, combustão, modelagem de turbulência, eletromagnetismo, transferência de calor, escoamentos mul-

tifásicos, análise de tensões em mecânica dos sólidos, e inclusive matemática financeira. Possui uma coleção de solvers pré-escritos, aplicáveis a uma ampla faixa de problemas.

O OpenFOAM foi originalmente desenvolvido no início dos anos 90 no Imperial College, Londres, por dois alunos de doutorado na época, Henry Weller e Hrvoje Jasak, baixo o Prof. David Gosman e o Dr. Radd Issa. Weller e Jasak criaram a empresa Nabla Ltd., mas sem sucesso no marketing do produto FOAM (predecessor do OpenFOAM), fecharam em 2004. Weller fundou OpenCFD Ltd. em 2004 e liberou o código para o domínio público por meio da licença geral pública GNU (*GNU General Public License*). OpenCFD Ltd. foi adquirida por Silicon Graphics International (SGI) em 2011, que vendeu-a para o ESI Group em 2012. A fonte de ingressos da empresa OpenCFD Ltd. é, segundo um modelo “Redhat”, pela provisão de suporte, treinamento e serviços de consultoria. Mesmo sendo o OpenFOAM um código aberto, o modelo de desenvolvimento segue um estilo “catedral”, em que as contribuições de código pelos pesquisadores usuários não se incorporam diretamente na distribuição principal, devido a um estrito controle do código base. Periodicamente são liberadas versões com as melhorias no código já verificadas (Chen, Xiong, Morris, Paterson, Sergeev, and Wang, 2014).

O OpenFOAM é escrito na linguagem de C++ e apresenta uma abordagem numérica baseada no método de volumes finitos, especialmente interessante quando trata-se de problemas conservativos. O sistema de equações governantes é segregado em matrizes resolvidas em uma sequência iterativa, cuja solução é definida no centro das células, e monitorada segundo os resíduos dessas equações.

Assim como a maioria dos programas de CFD, o OpenFOAM também está estruturado em três partes principais: 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, os quais podem ser definidas como utilidades e solvers. Os solvers são aplicações designadas à resolver as equações governantes de um determinado problema físico.

A geração de geometria e malha simples podem ser feitas no próprio programa, por meio de utilidades próprias para tal finalidade como o comando *blockMesh*, fa-

zendo as definições de vértices, blocos, faces, arestas retas ou curvas, etc., em uma biblioteca *blockMeshDict*. Geometrias mais complexas podem ser geradas com a utilidade *snappyHexMesh*, ou com programas comerciais como o ICEM-CFD da ANSYS, ou Gambit, e posteriormente convertidas ao formato do OpenFOAM, por exemplo mediante a utilidade *fluentMeshToFoam*.

Na parte principal do programa, da solução, OpenFOAM contém mais de 70 solvers standard, tais como *simpleFoam*, *pisoFoam*, ou *pimpleFoam* (combinação dos dois métodos anteriores). Cada um desses solvers ou aplicações foi desenhado para um tipo de problema físico específico, como combustão, escoamento compressível, eletromagnetismo, transferência de calor, escoamento incompressível, escoamento multifásico, análise tensorial, etc.. Além dos solvers ou aplicações, OpenFOAM contém também mais de 80 utilidades standard para o pré e pós-processamento de dados, rodagem em paralelo, geração de malha, visualização e cálculos complementários utilizando as soluções obtidas. Mas sempre é tarefa do usuário a escolha correta de aqueles solvers, a física e os modelos que sejam apropriados para o problema.

Sendo um código aberto, o OpenFOAM oferece uma alternativa interessante de escolha para os usuários de ferramentas de CFD.

Algumas vantagens que levam à preferência da utilização do OpenFOAM:

- Código aberto, independente do pago de licenças custosas para empresas estrangeiras.
- Extensível a muitas e variadas aplicações customizadas.
- A generalidade das várias bibliotecas de OpenFOAM e suas aplicações permitem ao usuário resolver quase qualquer problema em CFD completamente.
- As interfaces para o pré e o pós-processamento estão bem desenhadas, são potentes e “amigáveis com o usuário”.
- Também podem gerar-se malhas dinâmicas.
- A estratégia de desenvolvimento do código em linguagem orientada para objetos C++ torna-o conveniente para que os usuários possam incorporar os seus próprios submodelos, caso seja necessário, além de que o programa pode ser

continuamente otimizado, aproveitando as partes do código já implementadas e provadas.

- Os algoritmos dos solvers podem ser visualizadas pelo usuário, favorecendo uma melhor compreensão das características físicas do problema.

Mas a grande barreira de entrada para o uso eficiente do OpenFOAM é a demorada curva de aprendizagem, além de ser preciso ter conhecimentos de C++. Até muito recentemente, que foi publicado o livro *The OpenFOAM Technology Primer*, (Maric, Höpken, and Mooney, 2014), existia muito pouco material de referência para atingir uma manipulação medianamente razoável do software, a maioria estando em foros de discussão em Internet. Isto implica buscas muito demoradas para resolver aspectos particulares de um determinado problema. Dentro do escasso material disponível para autoaprendizagem se encontra o Guia do Usuário, com vários tutoriais de casos elementares, com instruções passo a passo para rodá-los desde o princípio até o fim, incluindo as três etapas de pré-processamento, solução e pós-processamento.

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 um dos fatores que contribuíram para a utilização do mesmo. Devido à possibilidade de visualizar o código e de modificá-lo, o OpenFOAM mostrou-se viável para uma possível implementação futura de um termo fonte periódico na equação de momento para, por exemplo, inclusão da forças adicionais por balanço transversal.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

O estudo foi configurado com as seguintes etapas, não necessariamente consecutivas, pois das informações obtidas de alguma etapa foi necessário reformular outras:

- Testes em malhas simples.
- Escolha do tipo de repartição de malha mais apropriado.
- Análise de modelos de turbulência apropriados para dar conta da não-inercialidade do sistema, tendo em conta os seguintes fatores: existência do modelo em OpenFOAM ou necessidade de sua implementação, melhor exatidão, e menor custo computacional.
- Análise dos métodos matemáticos utilizados mais apropriados (linear solvers), que irão influenciar na exatidão e representatividade da solução e no custo computacional (ou tempo de rodada x número de CPUs) derivado do número de iterações necessárias).
- Simulações tridimensionais em um elemento de comprimento pequeno, para teste dos itens anteriores, com menor número de células (e por conseguinte menor tempo de rodada) que facilite a avaliação correta dos itens anteriores.
- Simulações tridimensionais em elemento de comprimento definitivo representativo, com a repartição e refino de malha, modelos de turbulência e métodos matemáticos escolhidos.

Tenta-se sempre obter uma malha com o menor número de células que seja representativa da geometria estudada, considerando o refino necessário para atingir uma

independência dos resultados de um ulterior refino da malha. Neste caso, como é importante obter dados do escoamento perto da parede, é necessário fazer um maior refino perto dela.

5.1 Testes em malhas simples: tubo circular

Inicialmente, testou-se o código em uma geometria simples, um tubo circular. Para esses tipos de casos, OpenFOAM conta com a possibilidade de gerar uma malha para geometrias axissimétricas, onde se define só uma fatia do volume interno do tubo, de uns 5 graus. Desta forma, obtém-se uma grande economia no número de células, resultando em um custo computacional muito menor (1/72 do número de células se considerar o volume total).

Foram feitas simulações em regime laminar e regime turbulento, estacionárias, com o algoritmo iterativo SIMPLE (Semi-Implicit) de acoplamento pressão-velocidade.

5.1.1 Regime laminar

Utilizaram-se os dados da Tabela 5.1 para estabelecer os problemas teste, tentando conservar a maior quantidade de parâmetros similares com respeito à geometria do subcanal quadrangular. Utilizaram-se dois tipos de malha: 1) a malha de uma fatia para geometria axissimétrica (“wedge”), e 2) uma malha de um oitavo da geometria cilíndrica do tubo; com condições de contorno (BC) “wedge”, e de simetria (figuras 5.1 e 5.2). O objetivo foi avaliar se há muita diferença na qualidade dos resultados, tendo em conta a maior economia da malha “wedge”.

Além de fazer simulações com o regime laminar especificado no set up dos casos, também foi testado o modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$, aplicado em condições de escoamento laminar. Para variar o número de Reynolds, mudou-se a viscosidade dinâmica μ .

O fator de fricção teórico é calculado da forma clássica (Todreas and Kazimi, 1993) (9-50), segundo

$$f = 64/Re \quad (5.1)$$

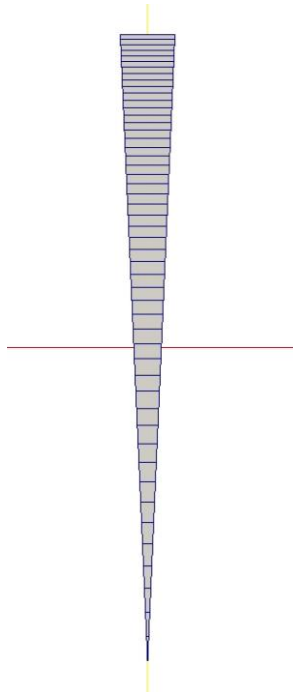


Figura 5.1: Malha tipo “wedge”.

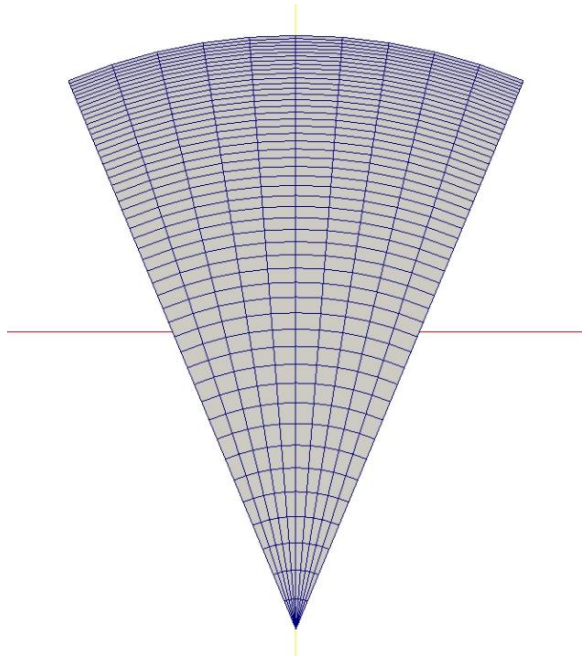


Figura 5.2: Malha de 1/8 de tubo.

Tabela 5.1: Parâmetros dos testes realizado com tubo circular.

Descrição	Símbolo	valor	unidade
Diâmetro interno	D_i	0,011777843	m
Densidade	ρ	704,2	kg/m^3
Vazão mássica	$\dot{m}$	0,42338	kg/s
Área transversal ao eixo z	A_z	0,00010895	m^2
Vazão mássica por unidade de área	G_m	3886,05	$kg/m^2.s$
Comprimento total	L_T	1,0	m

O fator de fricção das simulações foi calculado segundo

$$f = \frac{2\rho}{G_m^2} \cdot \frac{D_i}{L} \cdot \Delta p \quad (5.2)$$

Para Δp se calcularam as pressões médias na área ao longo do comprimento total do tubo de 1 m, a cada 0,1 m, utilizando-se a primeira área depois do comprimento de entrada hidrodinâmico (CEH), necessário para atingir o escoamento plenamente desenvolvido. Estimou-se o CEH, calculado segundo

$$z > Re \cdot D_i / 20 \quad (5.3)$$

Tentou-se discriminar se um refino perto da parede (só na direção normal) tem ou não influencia na acurácia no cálculo do f por CFD, diferenciando-se dois casos:

1) refino 0,1 (a relação entre a dimensão normal à parede da primeira célula perto da parede e da última), e 2) refino 0,2.

Tabela 5.2: Simulações realizadas com geometria circular, regime laminar.

Nº simul.	Nº Re	Modelo	geometria	BC	refino	CEH	f de sim.	erro %
1	499,12	laminar	wedge	wedge	0,2	0,3m	0,1286597	-0,34%
2	499,12	laminar	wedge	wedge	0,2	0,3m	0,1287774	-0,43%
3	499,12	laminar	wedge	wedge	0,2	0,3m	0,1287579	-0,42%
4	499,12	laminar	1/8 tubo	symmetry	0,1	0,3m	0,1281908	0,03%
5	4,9912	$\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	symmetry	0,1	0,1m	12,83190	-0,07%
6	4,9912	$\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	symmetry	0,1	0,1m	12,83190	-0,07%
7	4,9912	laminar	1/8 tubo	symmetry	0,1	0,1m	12,82471	-0,02%
8	49,912	laminar	1/8 tubo	symmetry	0,1	0,1m	1,282460	-0,02%
9	4,9912	$\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	wedge	0,1	0,1m	22,92533	-78,79%

Dos resultados das simulações realizadas em regime laminar (Tabela 5.2) observamos uma boa concordância com os valores obtidos teoricamente, mesmo para a geometria “wedge” de fatia axissimétrica, como para um oitavo de tubo com condições de contorno de plano de simetria. A leve melhoria das simulações com 1/8 de tubo é mais atribuível ao maior refino perto da parede do que a geometria mesma. A utilização do modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ em vez do set-up com modelo laminar tem muito pouca influência, verificando-se a maior importância relativa das propriedades físicas do problema, as quais determinam o regime laminar. A geometria de 1/8 de tubo com condição de contorno “wedge” é incompatível, evidenciado pelo alto erro em relação ao valor teórico. O gráfico das pressões médias na área vs comprimento (figura 5.3) mostram a tendência linear compatível com o cálculo teórico.

5.1.2 Regime turbulento

Com os mesmos parâmetros da Tabela 5.1, simulou-se para $Re = 499120$, com os dois tipos de geometrias (“wedge”, com BC “wedge”, e 1/8 tubo, com BC symmetry), distintos modelos de turbulência e distintos refinamentos (y^+). Adotamos o critério de estabelecimento do comprimento hidrodinâmico (White, 2011) (6.6) para $Re \leq 10^7$,

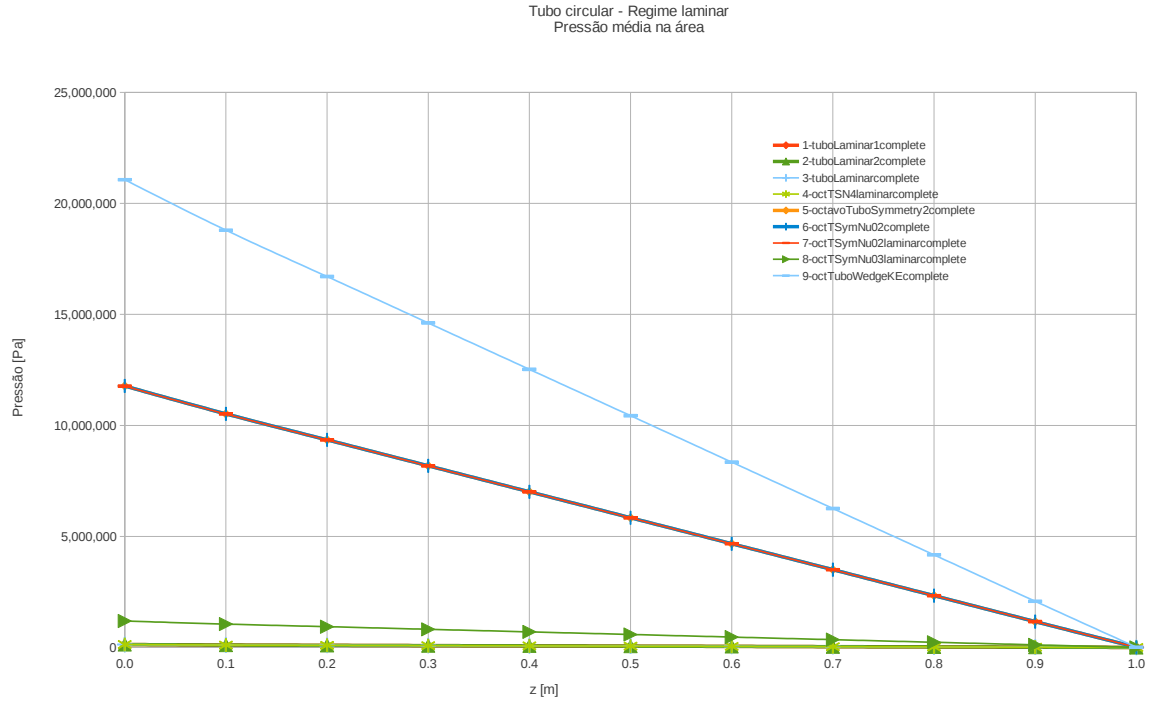


Figura 5.3: Pressão média na área vs comprimento do tubo, regime laminar.

em função do qual descartamos os primeiros 0,5 m para o cálculo do fator de atrito.

$$\frac{L_e}{d} \approx 1.6Re^{1/4} \quad (5.4)$$

Dos resultados na Tabela 5.3 podemos obter as seguintes conclusões: De forma geral, o erro percentual dependerá do refino perto da parede (ou seja, do y^+ resultante), do modelo escolhido (mais ou menos apropriado para obter informações do fator de atrito) e das condições de contorno adotadas. A geometria neste caso não parece ter muita influência, permitindo a utilização da fatia “wedge” com a conseguinte economia no recurso computacional, por permitir malhas com menor número de células.

Se trabalhar com a primeira camada de células na região log-law ($30 < y^+ < 300$), parecem dar melhores resultados aqueles refinamentos que colocam y^+ mais afastado do limite inferior, utilizando aqui a lei da parede como condição de contorno na parede. No caso de $1 < y^+ < 30$, podem ocorrer incertezas devido à condição da parede não estar sempre bem definida nessa região. Os casos do modelo Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$ mostram a diferença nos resultados quando não utilizadas as condições de borda apropriadas (lei da parede em uma região próxima demais da parede, onde devem ser utilizadas as leis assintóticas para baixos números de Reynolds).

Tabela 5.3: Simulações realizadas com geometria circular, regime turbulento.

Nº simul.	Modelo	geometria	y^+_{ave}	refino	f de sim.	erro %
1	$\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	25,62	0,1	0,0128221	2,28%
2	Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	1,21	0,002	0,0130212	0,77%
3	$\kappa - \epsilon$	wedge	37,68	0,2	0,0121809	7,17%
4	$\kappa - \epsilon$	wedge	40,38	0,2	0,0128177	2,32%
5	$\kappa - \epsilon$	wedge	37,69	0,2	0,0121809	7,17%
6	$\kappa - \epsilon$	wedge	28,87	0,4	0,0122903	6,33%
7	$\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	24,08	0,1	0,0123133	6,16%
8	$\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	70,07	0,5	0,0130325	0,68%
9	Launder-Gibson RSTM	wedge	37,33	0,2	0,0102124	22,17%
10	Launder-Gibson RSTM	wedge	37,11	0,2	0,0102152	22,15%
11	Launder-Gibson RSTM	wedge	39,04	0,2	0,0108769	17,11%
12	Realizable $\kappa - \epsilon$	wedge	36,85	0,2	0,0119196	9,16%
13	Realizable $\kappa - \epsilon$	wedge	39,49	0,2	0,0119961	8,58%
14	RNG $\kappa - \epsilon$	wedge	39,46	0,2	0,0121884	7,11%
15	RNG $\kappa - \epsilon$	wedge	39,46	0,2	0,0121885	7,11%
16	RNG $\kappa - \epsilon$	wedge	35,45	0,2	0,0108757	17,12%
17	RNG $\kappa - \epsilon$	wedge	39,46	0,2	0,0121883	7,11%
18	Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$	1/8 tubo	4,80	0,05	0,4066399	-209,90%
19	SST $\kappa - \omega$	wedge	39,59	0,2	0,0122904	6,33%
20	SST $\kappa - \omega$	wedge	39,58	0,2	0,0122904	6,33%
21	SST $\kappa - \omega$	wedge	35,98	0,2	0,0111324	15,16%
22	Launder-Rodi-Reece RSM	wedge	38,08	0,2	0,0137648	-4,90%
23	Launder-Rodi-Reece RSM	wedge	39,15	0,2	0,0124063	5,45%
24	Non Linear $\kappa - \epsilon$ Shih	wedge	27,63	0,2	0,0064624	50,75%
25	Non Linear $\kappa - \epsilon$ Shih	wedge		0,2	0,0063758	51,41%
26	$\kappa - \omega$	wedge	39,82	0,2	0,0126562	3,55%
27	$\kappa - \omega$	wedge	37,57	0,2	0,0119545	8,89%
28	Lien-Cubic $\kappa - \epsilon$	wedge	33,87	0,2	0,0086990	33,70%
29	Spalart Allmaras	wedge	41,44	0,2	0,0138682	-5,69%

Tradicionalmente é esperado que os modelos $\kappa - \omega$ e SST $\kappa - \omega$ sejam bem comportados se o interesse é obter propriedades do escoamento relacionadas com a parede, como é o caso da obtenção do fator de atrito. Mesmo assim modelos mais complexos como os modelos de Tensor de Reynolds de 7 equações (modelo de Launder-Gibson RSTM e modelo Launder-Rodi-Reece RSM). Mas vemos que mesmo o mais simples $\kappa - \epsilon$ pode se comportar muito bem se y^+ estar afastado do limite inferior da região log-law.

A modo de exemplo, vemos gráficos comparativos de velocidade, pressão e viscosidade turbulenta das simulações N° 2 (*Launder - Sharma LowRe* $\kappa - \epsilon$), 8 ($\kappa - \epsilon$) e 26 ($\kappa - \omega$) (figuras 5.4, 5.5 e 5.6). Os dois primeiros são da geometria de um oitavo de tubo, e o terceiro corresponde na fatia “wedge”.

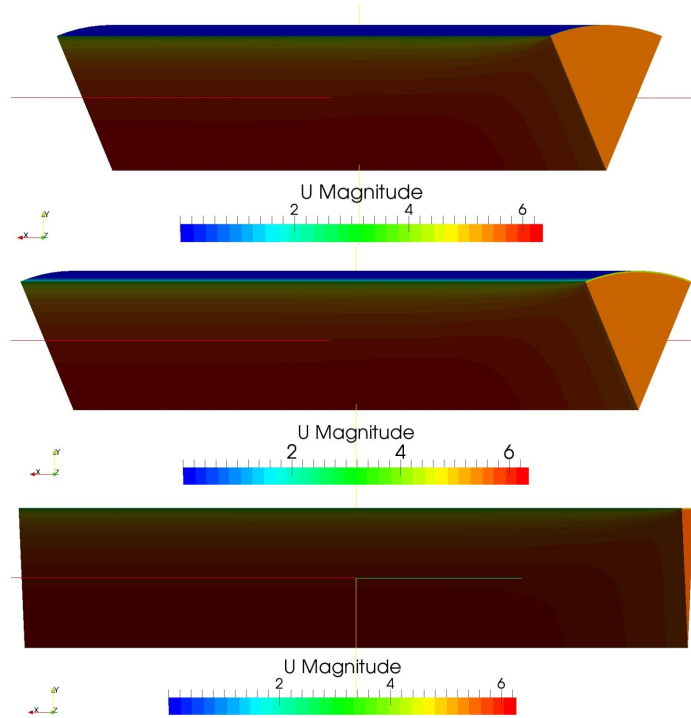


Figura 5.4: Velocidade: Sim. N° 2 (*Launder-Sharma LowRe* $\kappa - \epsilon$), Sim. N° 8 ($\kappa - \epsilon$), Sim. N° 26 ($\kappa - \omega$)

Na Figura 5.7 pode-se observar como a queda de pressão é linear respeito do comprimento do tubo, mesmo depois de uma pequena distância desde a entrada.

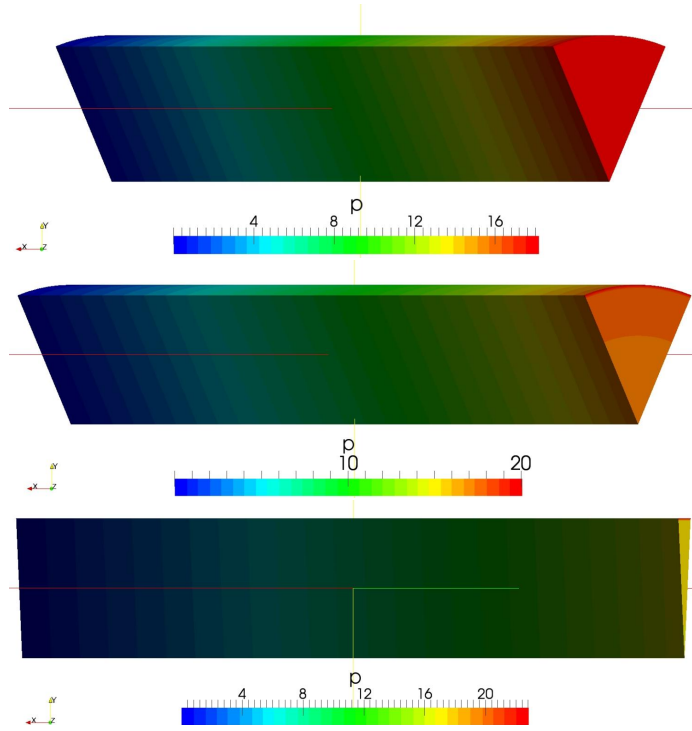


Figura 5.5: Pressão: Sim. N° 2 (Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$), Sim. N° 8 ($\kappa - \epsilon$), Sim. N° 26 ($\kappa - \omega$)

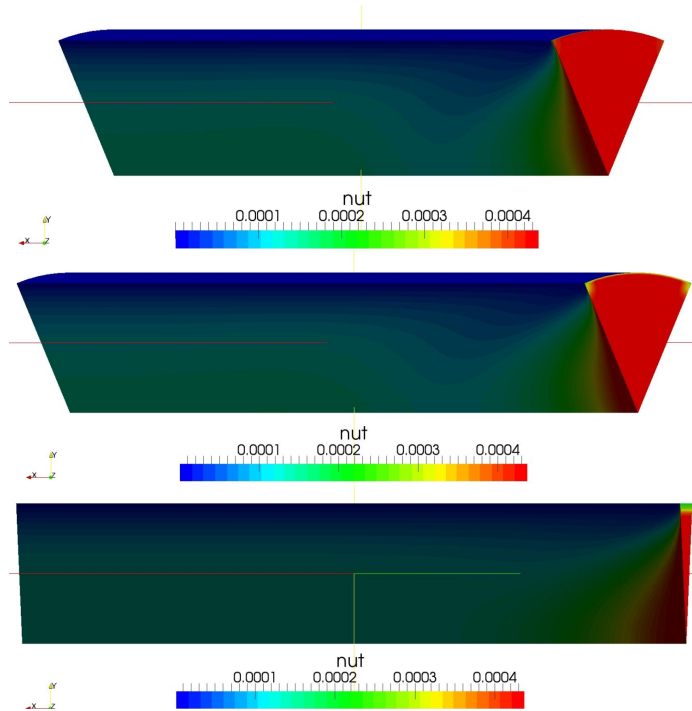


Figura 5.6: Viscosidade turbulenta: Sim. N° 2 (Launder-Sharma LowRe $\kappa - \epsilon$), Sim. N° 8 ($\kappa - \epsilon$), Sim. N° 26 ($\kappa - \omega$)

Tubo circular - Regime turbulento

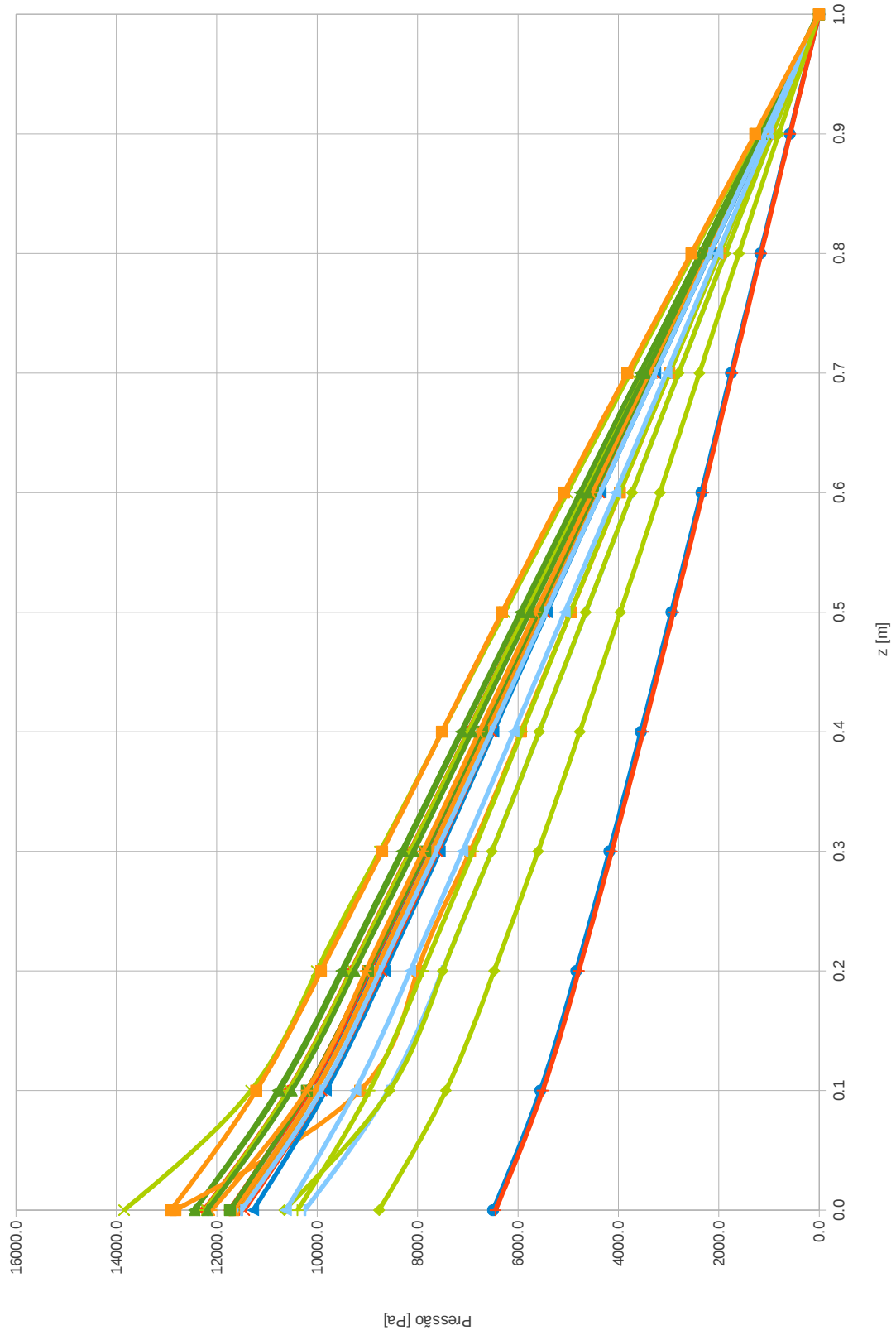


Figura 5.7: Pressão média na área vs comprimento do tubo

5.2 Simulações em malha de 1/8 de subcanal

Posteriormente, realizaram-se simulações na geometria definitiva do subcanal, mas em um oitavo do volume propriamente dito do subcanal, sendo que as fronteiras podem se definir com condições de contorno de tipo de simetria, quando consideramos um escoamento principal não perturbado na direção do eixo z . Assim, consegue-se uma poupança interessante no custo computacional.

Se apresentam as simulações feitas para regime laminar e para regime turbulento, de tipo estacionário, com o algoritmo iterativo SIMPLE (Semi-Implicit) de acoplamento pressão-velocidade.

5.2.1 Regime laminar

Utilizaram-se os dados da Tabela 5.4 para estabelecer os casos laminares do subcanal quadrangular.

Utilizaram-se dois tipos de malhas, ambas da mesma geometria de um oitavo de subcanal, de $50 \times 50 \times 100$: 1) malha sem refino na parede, com células de dimensões da mesma ordem nos três eixos, e 2) malha com refino na parede: a dimensão normal à parede da primeira célula é de $1/25$ da mesma dimensão da última célula. As outras dimensões são mantidas iguais (figuras 5.8 e 5.9). O objetivo foi avaliar a diferença na qualidade dos resultados, por conta do refino na parede.

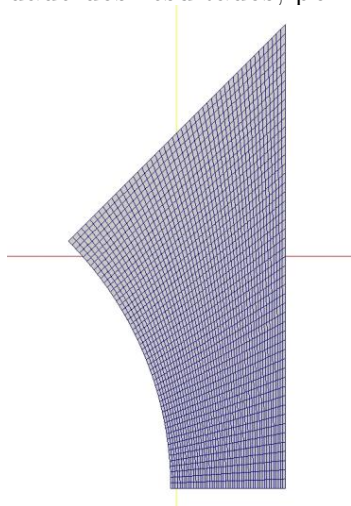


Figura 5.8: Sem refino na parede

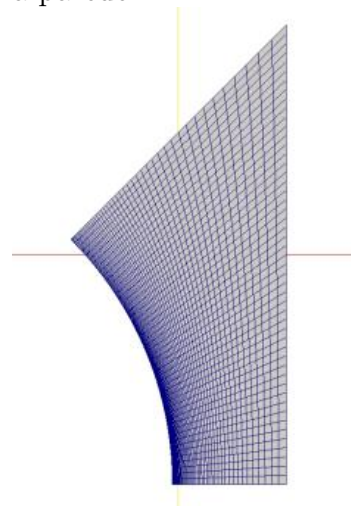


Figura 5.9: Com refino na parede

Para variar o número de Reynolds, mudou-se nestes casos, a velocidade média na entrada, mantendo-se constante a viscosidade dinâmica μ .

Tabela 5.4: Parâmetros dos casos realizados de subcanal quadrangular, regime laminar.

Descrição	Símbolo	Valor	Unidade
Diâmetro de vareta combustível	OD	0,0095	m
Pitch (centro a centro de varetas)	P	0,0126	m
Densidade	ρ	704,2	kg/m^3
Viscosidade Dinâmica	μ	0,7042	$kg/m.s$
Viscosidade Cinemática	ν	0,001	m^2/s
Área transversal ao eixo z	A_z	0,00010895	m^2

Os dados experimentais do fator de atrito em regime laminar para subcanais (Rehme, 1971) foram regressionados em polinômios de segundo grau em função de P/D (pitch/diâmetro de vareta) por Cheng and Todreas (1986) segundo

$$C'_L = a + b_1(P/D - 1) + b_2(P/D - 1)^2 \quad (5.5)$$

$$f_L = \frac{C'_L}{Re_L^n} \quad (5.6)$$

O expoente n do Número de Reynolds é 1 quando o escoamento é laminar. Os coeficientes a , b_1 e b_2 são obtidos de tabelas dependendo do tipo de arranjo (hexagonal ou quadrangular), do regime de escoamento (laminar ou turbulento), da relação P/D , e da localização do subcanal (interno, no canto ou no borde) (Todreas and Kazimi, 1993).

O fator de atrito das simulações, da mesma forma que nos casos do tubo circular, foi calculado segundo

$$f = \frac{2\rho}{G_m^2} \cdot \frac{D_e}{L} \cdot \Delta p \quad (5.7)$$

Onde agora

$$D_e = 4A/P_w \quad (5.8)$$

Assim como no caso do tubo circular, para obter Δp se calcularam as pressões médias na área ao longo do comprimento total do tubo de 1 m, a cada 0,1 m, desestimando-se o comprimento de entrada hidrodinâmico (CEH) necessário segundo o Número de Reynolds de cada simulação.

Tabela 5.5: Simulações com geometria 1/8 subcanal quadrangular, regime laminar.

Nº simul.	Nº Re	Modelo	refino	CEH	f de sim.	erro %
1	1	laminar	25	0,0006m	99,631695	1,69%
2	1	laminar	1	0,0006m	99,594526	1,73%
3	10	laminar	25	0,0059m	9,965911	1,67%
4	10	laminar	1	0,0059m	9,963229	1,69%
5	100	laminar	25	0,0589m	0,997809	1,54%
6	100	laminar	1	0,0589m	0,998644	1,46%
7	1000	laminar	25	0,5889m	0,098459	2,85%
8	1000	laminar	1	0,5889m	0,098368	2,94%

Dos resultados das simulações efetuadas (Tabela 5.5) observamos uma muito boa concordância com os valores obtidos da regressão de Cheng e Todreas. O refino perto da parede não parece ter maior influência na qualidade dos resultados. Isto é importante na hora de realizar simulações transientes, pois o refino afetará o Número de Courant. O Número de Courant é inversamente proporcional à dimensão espacial e diretamente proporcional à dimensão temporal, e para mantê-lo abaixo de valores que permitam simulações estáveis, o passo do tempo permitido terá de seguir a ordem da menor dimensão espacial. Quando o refino não é necessário para obter maior acurácia na simulação, o passo do tempo em simulações transientes pode ser maior, o que influirá notavelmente no custo computacional.

O gráfico das pressões médias na área vs comprimento (figura 5.10) verificam a tendência linear compatível com o cálculo teórico. As diferentes inclinações evidenciam os diferentes Números de Reynolds das simulações.

5.2.2 Regime turbulento

Com os parâmetros da Tabela 5.6, simulou-se para $Re = 499120$ constante, com geometria de um oitavo de subcanal. Utilizaram-se diferentes números totais de células, diferentes refinamentos na direção normal à parede (para poder ubicar y^+ , idealmente, dentro da zona $y^+ < 1$, resolvendo a parede, ou $30 < y^+ < 300$, dentro da zona “log-law”), diferentes modelos de turbulência e diferentes condições na parede para as variáveis turbulentas, e diferentes esquemas numéricos e tolerâncias para os

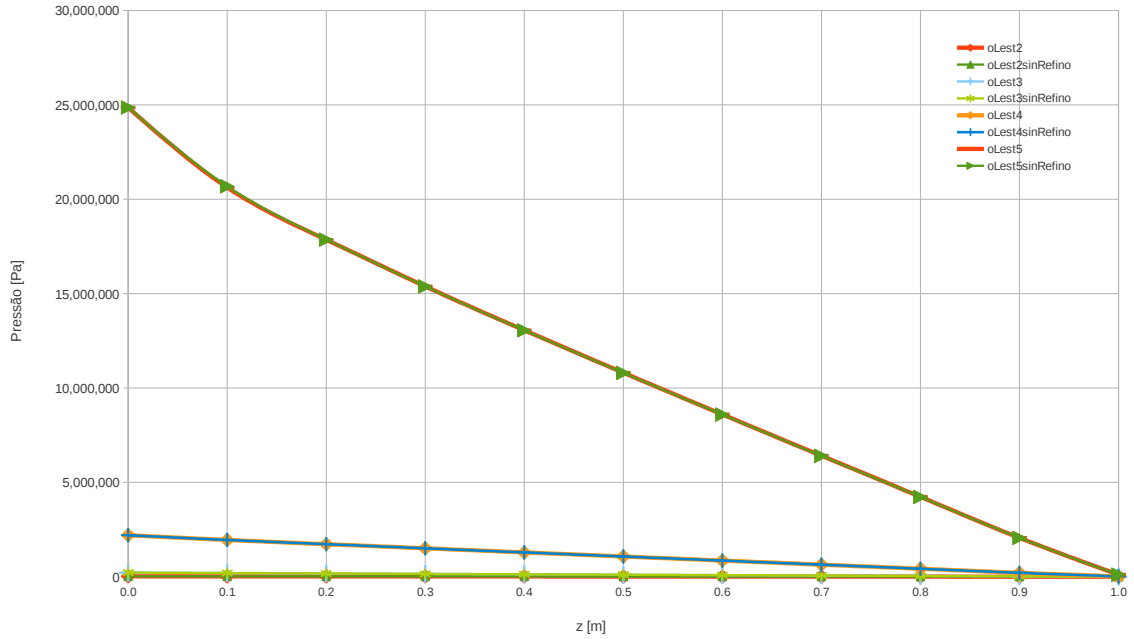


Figura 5.10: Pressão média na área vs comprimento do subcanal

resíduos (até considerar convergência atingida). Descartaram-se os primeiros 0,5 m de comprimento no eixo z para o estabelecimento de regime plenamente desenvolvido para considerar as pressões médias na área para o cálculo do fator de atrito a partir dos campos obtidos nas simulações. Na figura 5.11 pode-se ver os planos considerados para realizar as médias na área, e na figura 5.12 se observa a variação da pressão no domínio.

O fator de atrito de referência a partir de dados experimentais foi calculado da mesma maneira que nos casos do regime laminar, segundo o polinômio de Cheng & Todreas (eq. 5.5 e 5.6), com os coeficientes a , b_1 e b_2 específicos para regime turbulento. O expoente n do Número de Reynolds é 0.18, para os casos de escoamento turbulento.

Dos resultados na Tabela 5.7 podemos obter as seguintes conclusões:

- A simulação N° 7 (não incluída no gráfico) evidentemente tem um erro considerável, produto de uma alta tolerância no control de resíduos (resíduo de pressão $< 0,01$; resíduos dos otros campos $< 0,001$; nas demais simulações, normalmente $< 1e - 6$), o que provocou uma parada precoce na rodada, muito

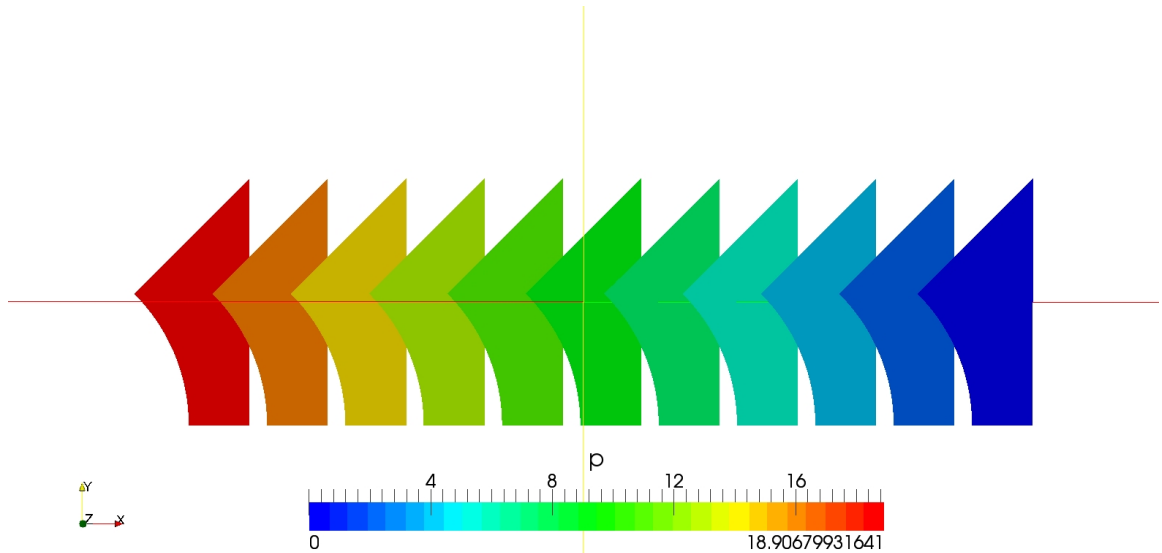


Figura 5.11: Planos considerados para calcular a média da pressão. a cada 0.1 m

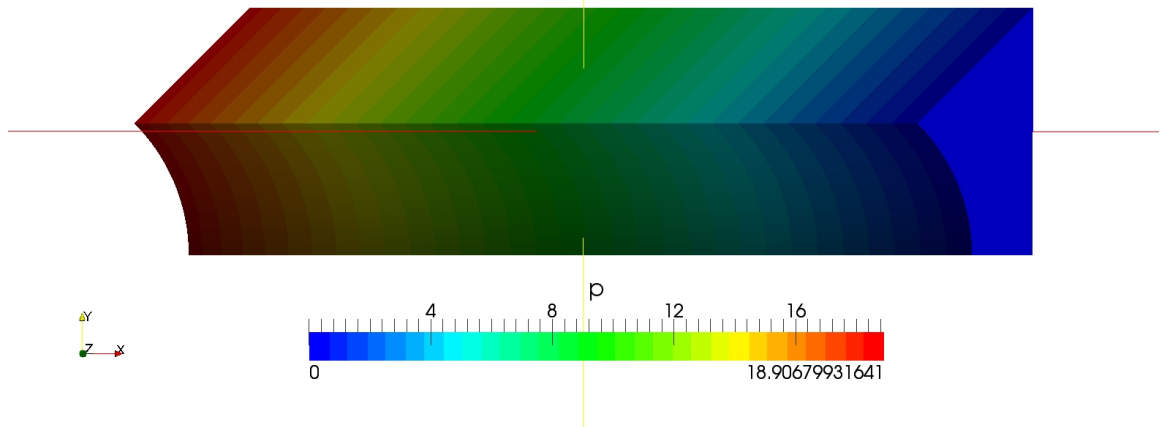


Figura 5.12: Campo de pressão no domínio da simulação

provavelmente antes de atingir convergência.

- O refino perto da parede tem a seguinte influência: se o y^+ resultante se encontrar entre 1 e 30 serão produzidos maiores erros na obtenção do fator de atrito, por conta das indeterminações da Lei da Parede em essa região. O ideal é obter y^+ menor que 1, aumentando o refino perto da parede, e aplicando condição de contorno para baixos Re na parede, ou até mesmo zerando (condição de contorno de Dirichlet). No caso de encontrar-se y^+ maior que 30, é preferível que o y^+ mínimo esteja mais afastado desse limite inferior.
- Modelos que tradicionalmente capturam bem as propriedades perto da parede, como $\kappa - \omega$ e SST $\kappa - \omega$, são os que exibem menores erros.

Tabela 5.6: Parâmetros dos casos realizados de subcanal quadrangular, regime turbulento.

Descrição	Símbolo	valor	unidade
Diâmetro de vareta combustível	OD	0,0095	m
Pitch (centro a centro de varetas)	P	0,0126	m
Densidade	ρ	704,2	kg/m^3
Viscosidade Dinâmica	μ	$9,17 * 10^{-5}$	$kg/m.s$
Viscosidade Cinemática	ν	$1,302187 * 10^{-7}$	m^2/s
Área transversal ao eixo z	A_z	0,00010895	m^2
Número de Reynolds	Re	499120	
Comprimento de entrada hidrodinâmico	CEH	0,4711	m
Fator de atrito experimental (Cheng & Todreas)	f	0,0144114	

- Os modelos de 7 equações (modelos de tensor de Reynolds: implementados em OpenFOAM, os modelos de Launder-Gibson RSTM e Launder-Rodi-Reece RSM) produzem bons resultados se y^+ mínimo se localizar acima de 30.
- Aumentar o número de células do domínio por acima de 50 x 50 x 100 não parece produzir nenhum ganho adicional importante no erro, e sim aumenta o custo computacional e a dificuldade na convergência.
- Obviamente, utilizar esquemas numéricos de maior ordem para os termos de gradientes e divergentes melhora a qualidade da simulação, diminuindo o erro obtido. Em alguns modelos, como o Launder-Gibson RSTM, a convergência é extremamente difícil no caso de começar com esquemas numéricos de 2a. ordem; mas se começar com um esquema upwind (de 1a. ordem) no termo convectivo, e uma vez convergido, se passar para um linearUpwind (de 2a. ordem), é possível atingir uma convergência acurada.

Na Figura 5.13 pode-se observar como a queda de pressão é linear respeito do comprimento do tubo, mesmo depois de uma pequena distância desde a entrada.

Para comparação de vários modelos de turbulência, se apresentam perfis de velocidade vs distância á parede na interseção do plano de saída com os seguintes planos:

1) plano de simetria diagonal (figura 5.14) , 2) plano de simetria horizontal infe-

Oitavo de Subcanal Regime Turbulento

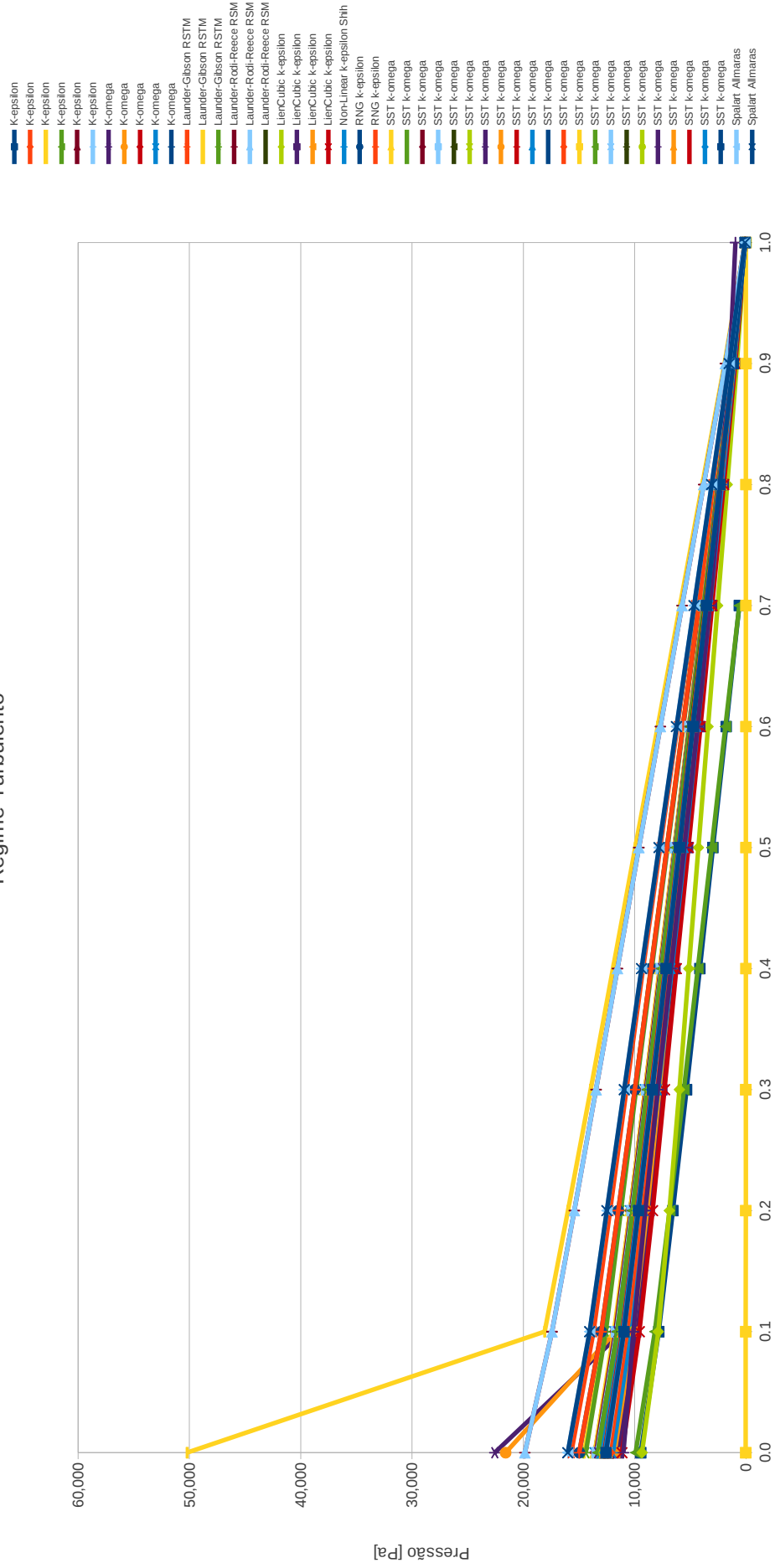


Figura 5.13: Pressão média na área vs comprimento do subcanal

Tabela 5.7: Simulações realizadas para 1/8 de subcanal quadrangular, regime turbulento.

Nº simul.	Modelo	células	refino	y^+_{ave}	f de sim.	erro %
1	$\kappa - \epsilon$	50x10x1000	1 x 1 x 1	43,06	0,0129893	9,87%
2	$\kappa - \epsilon$	40x40x100	1 x 1 x 1	19,83	0,0127995	11,19%
3	$\kappa - \epsilon$	60x60x100	120 x 1 x 1	1,82	0,0216149	-49,98%
4	$\kappa - \epsilon$	40x40x210	1 x 4 x 1	48,35	0,0134260	6,84%
5	$\kappa - \epsilon$	50x50x100	1 x 1 x 1	42,99	0,0127556	11,49%
6	$\kappa - \epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	7,48	0,0169242	-17,44%
7	$\kappa - \omega$	40x40x100	1 x 1 x 1	54,28	0,0131227	8,94%
8	$\kappa - \omega$	60x60x100	120 x 1 x 1	56,19	0,0138857	3,65%
9	$\kappa - \omega$	50x50x100	20 x 1 x 1	4,85	0,0139416	3,26%
10	$\kappa - \omega$	50x50x100	20 x 1 x 1	4,85	0,0139416	3,26%
11	$\kappa - \omega$	50x50x100	4 x 1 x 1	18,44	0,0123764	14,12%
12	LG RSTM	60x60x100	1 x 1 x 1	37,78	0,0152587	-5,88%
13	LG RSTM	50x50x100	20 x 1 x 1	7,20	0,0167674	-16,35%
14	LG RSTM	50x50x100	1 x 1 x 1	45,38	0,0153775	-6,70%
15	LG RSTM	50x50x100	1 x 1 x 1	45,39	0,0152258	-5,65%
16	LG RSTM	40x40x100	1 x 1 x 1	56,69	0,0154850	-7,45%
17	LG RSTM	40x40x100	1 x 1 x 1	56,75	0,0153119	-6,30%
18	LRR RSM	50x50x100	20 x 1 x 1	8,12	0,0209276	-45,22%
19	LRR RSM	50x50x100	20 x 1 x 1	8,12	0,0209278	-45,22%
20	LRR RSM	50x50x100	1 x 1 x 1	41,33	0,0125020	13,25%
21	Lien-Cubic $\kappa\epsilon$	40x40x100	1 x 1 x 1	45,90	0,0092824	35,59%
22	Lien-Cubic $\kappa\epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	6,23	0,0114182	20,77%
23	Lien-Cubic $\kappa\epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	6,01	0,0121656	15,58%
24	Lien-Cubic $\kappa\epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	5,97	0,0112587	21,88%
25	NonLinear $\kappa\epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	6,28	0,0118920	17,48%

LG: Launder-Gibson, LRR: Launder-Rodi-Reece.

rior (figura 5.15), 3) plano de simetria vertical direito (figura 5.16). Em todos os gráficos, as curvas superiores correspondem à magnitude do vetor velocidade, sobreposta à velocidade na direção z. As curvas inferiores são as componentes x e y do

Tabela 5.8: Simulações realizadas para 1/8 de subcanal quadrangular, regime turbulento, continuação.

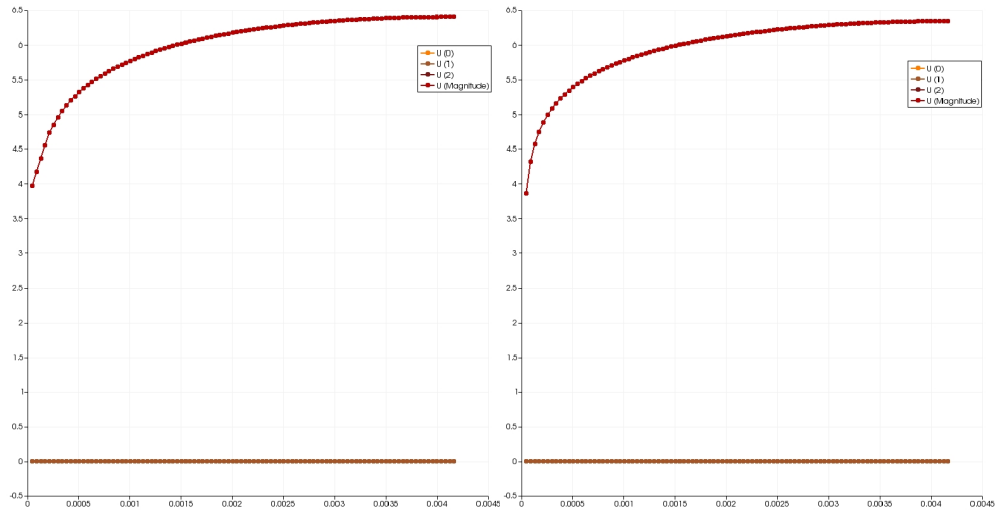
Nº simul.	Modelo	células	refino	y^+_{ave}	f de sim.	erro %
26	RNG $\kappa - \epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	7,20	0,0154433	-7,16%
27	RNG $\kappa - \epsilon$	50x50x100	20 x 1 x 1	7,20	0,0154435	-7,16%
28	SST $\kappa - \omega$	55x55x137	1 x 1 x 1	38,90	0,0130843	9,21%
29	SST $\kappa - \omega$	111x111x100	35743.36x1x1	0,0057	0,0140118	2,77%
30	SST $\kappa - \omega$	20x20x100	1 x 1 x 1	108,82	0,0131691	8,62%
31	SST $\kappa - \omega$	39x39x98	1 x 1 x 1	55,52	0,0130711	9,30%
32	SST $\kappa - \omega$	85x85x100	2999.06x1x1	0,0676	0,0137916	4,30%
33	SST $\kappa - \omega$	85x85x100	125492.74x1x1	0,0023	0,0138503	3,89%
34	SST $\kappa - \omega$	85x85x100	60257.00x1x1	0,0045	0,0137352	4,69%
35	SST $\kappa - \omega$	30x30x100	1 x 1 x 1	72,46	0,0131383	8,83%
36	SST $\kappa - \omega$	28x28x70	1 x 1 x 1	77,69	0,0130330	9,57%
37	SST $\kappa - \omega$	65x65x100	445.79x1x1	0,4492	0,0134174	6,90%
38	SST $\kappa - \omega$	65x65x100	7667.64x1x1	0,0363	0,0130094	9,73%
39	SST $\kappa - \omega$	65x65x100	4384.40x1x1	0,0623	0,0136887	5,01%
40	SST $\kappa - \omega$	40x40x100	1 x 1 x 1	54,10	0,0130685	9,32%
41	SST $\kappa - \omega$	20x20x50	1 x 1 x 1	79,84	0,0100908	29,98%
42	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	106.72x1x1	1,85	0,0127795	11,32%
43	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	942.31x1x1	0,3060	0,0135181	6,20%
44	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	614.24x1x1	0,4396	0,0133641	7,27%
45	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	106.72x1x1	1,84	0,0127795	11,32%
46	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	1 x 1 x 1	42,80	0,0126349	12,33%
47	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	20 x 1 x 1	4,83	0,0136797	5,08%
48	SST $\kappa - \omega$	50x50x100	1 x 1 x 1	42,98	0,0129717	9,99%
49	Spalart Allmaras	50x50x100	20 x 1 x 1	7,59	0,0169906	-17,90%
50	Spalart Allmaras	50x50x100	20 x 1 x 1	7,59	0,0169906	-17,90%

vetor velocidade, praticamente desprezíveis quando comparada à velocidade no sentido principal (exceto para o modelo de Launder-Gibson RSTM). Como pode-se ver, os perfis são levemente diferentes, dependendo do modelo de turbulência adotado.

Apresentam-se também para comparação dos modelos de turbulência, gráficos dos campos de magnitude de velocidade no domínio (figura 5.17).

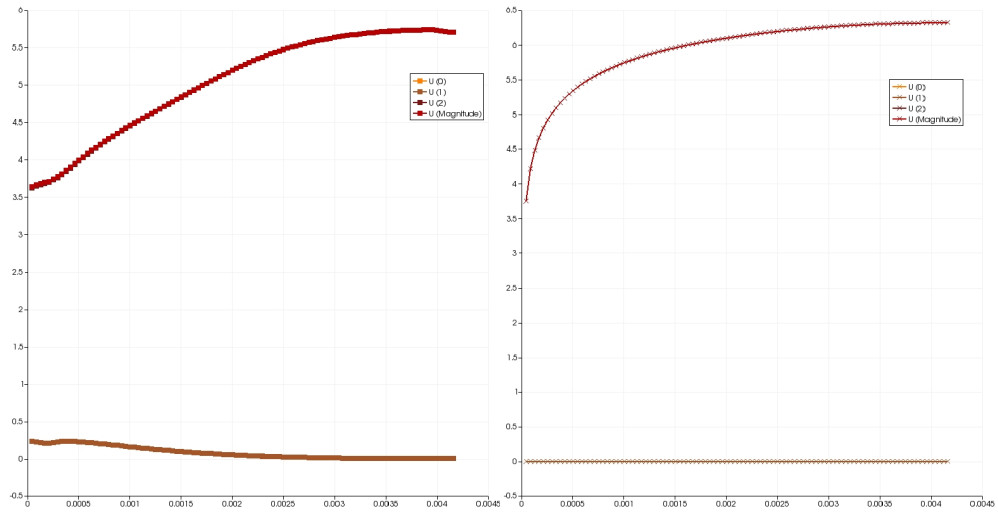
Adicionalmente, apresentam-se gráficos bidimensionais da seção de saída do oitavo de subcanal, das componentes do vetor velocidade (u , v e w), das variáveis turbulentas (energia cinética turbulenta k , epsilon, omega, viscosidade cinemática turbulenta ν_t) e das componentes do tensor de tensões de Reynolds (as três componentes da traça $\overline{u'^2}$, $\overline{v'^2}$, $\overline{w'^2}$, e a componente $\overline{u'v'}$), de duas simulações: 1) modelo SST $\kappa - \omega$, e 2) modelo Launder-Gibson RSTM (figuras 5.18, 5.19, 5.20, 5.21, 5.22 e 5.23).

Finalmente, apresentam-se gráficos de comparação com dados experimentais obtidos por Hooper (1980), para uma relação pitch sobre diâmetro de vareta (P/D) de 1,194, e número de Reynolds de 48000. No primeiro caso, figura 5.24, pode-se comparar a tensão de parede na seção de saída, normalizada pela tensão de parede média, em função do ângulo desde o centro da vareta, obtida com uma simulação feita com modelo de turbulência SST $\kappa - \omega$, com geometria adaptada ao P/D 1,194, e velocidade de entrada adaptada ao Número de Reynolds de 48.000. No segundo caso, figura 5.25, pode-se comparar a energia cinética turbulenta adimensionalizada pela velocidade de fricção ao quadrado, na seção de saída, na diagonal principal (ou no ângulo de 45°). Podem-se observar, em ambos casos, perfís muito similares aos obtidos por Horváth and Dressel (2012) para o mesmo modelo de turbulência.



(a) Sim N° 4, modelo $\kappa - \epsilon$

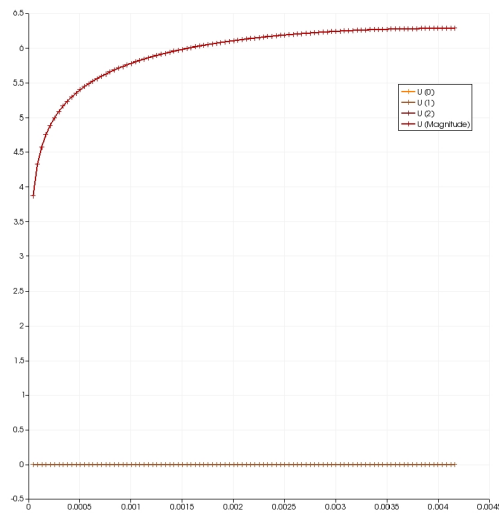
(b) Sim N° 10, modelo $\kappa - \omega$



(c) Sim N° 17, modelo Launder-Gibson

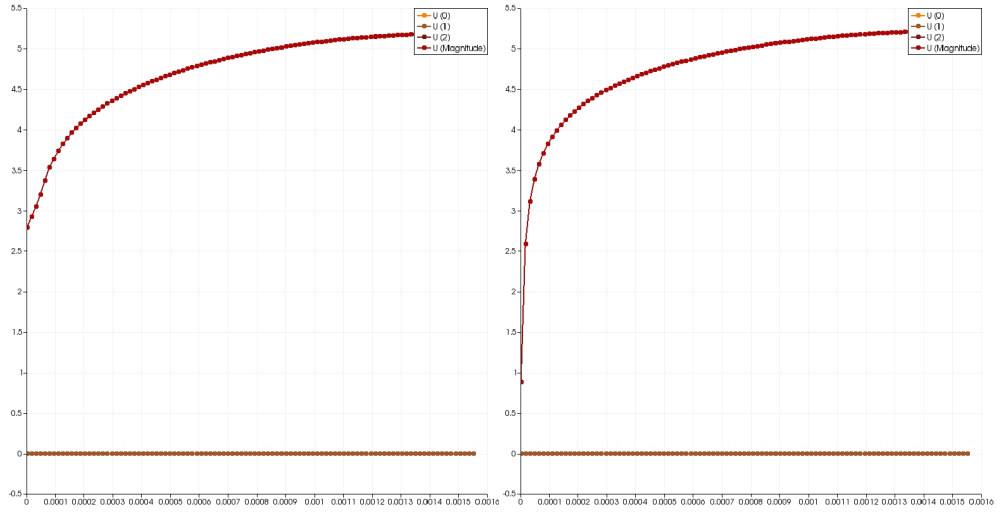
(d) Sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$

RSTM



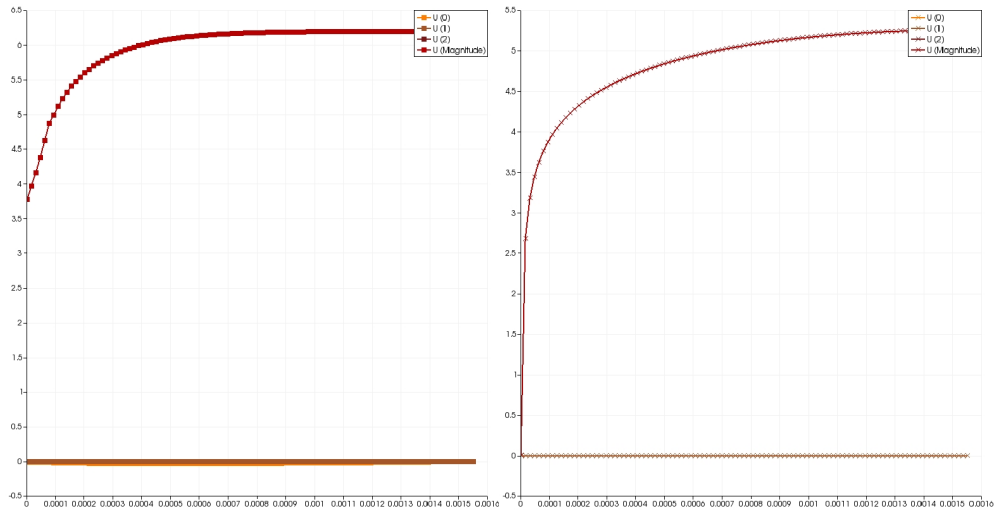
(e) Sim N° 47, modelo SST $\kappa - \omega$

Figura 5.14: Velocidade [m/s] vs distância [m] à parede na diagonal da saída



(a) Sim N° 4, modelo $\kappa - \epsilon$

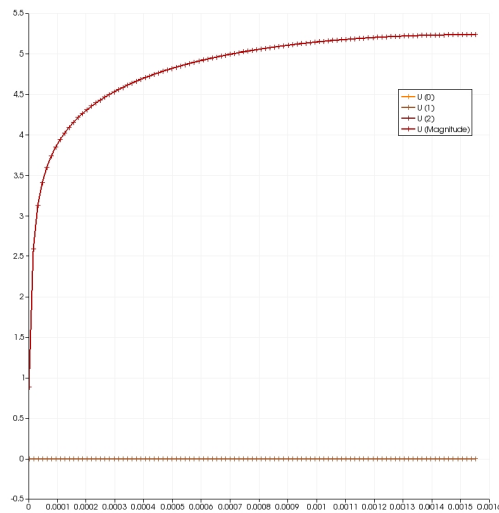
(b) Sim N° 10, modelo $\kappa - \omega$



(c) Sim N° 17, modelo Launder-Gibson

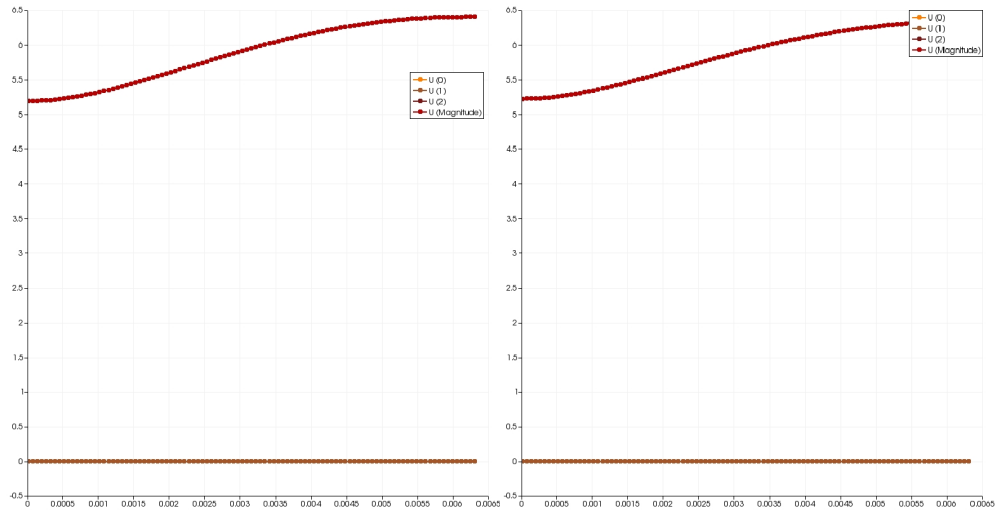
(d) Sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$

RSTM



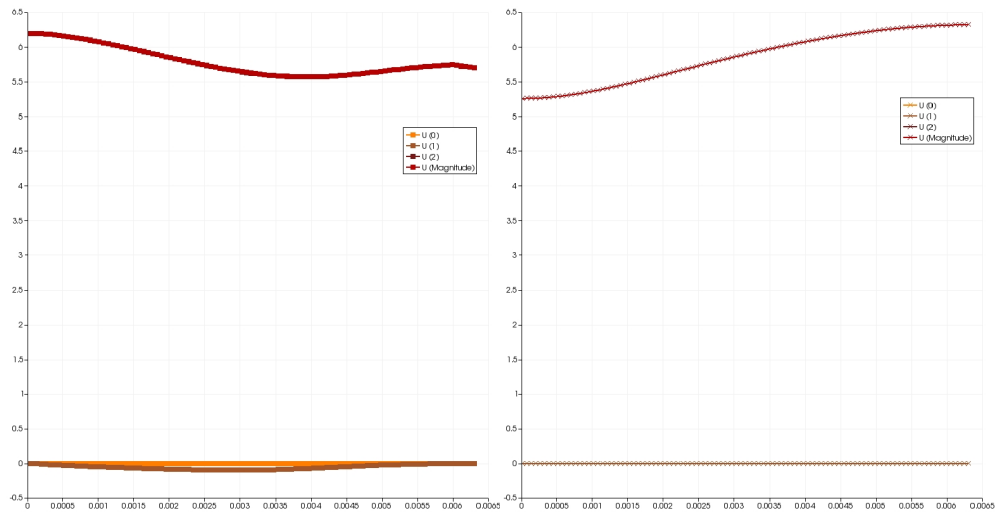
(e) Sim N° 47, modelo SST $\kappa - \omega$

Figura 5.15: Velocidade [m/s] vs distância [m] à parede na reta horizontal inferior da saída



(a) Sim N° 4, modelo $\kappa - \epsilon$

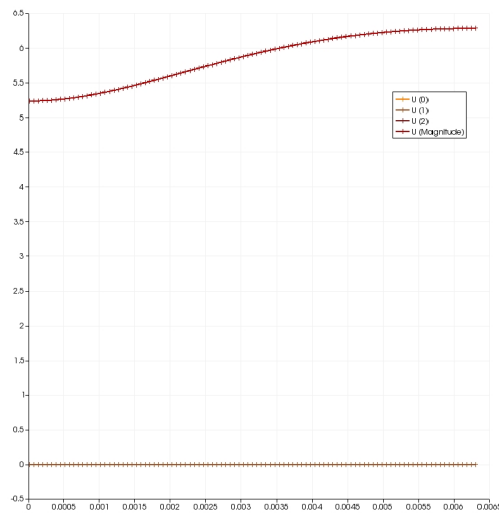
(b) Sim N° 10, modelo $\kappa - \omega$



(c) Sim N° 17, modelo Launder-Gibson

(d) Sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$

RSTM



(e) Sim N° 47, modelo SST $\kappa - \omega$

Figura 5.16: Velocidade [m/s] vs distância [m] no plano de simetria vertical direito da saída

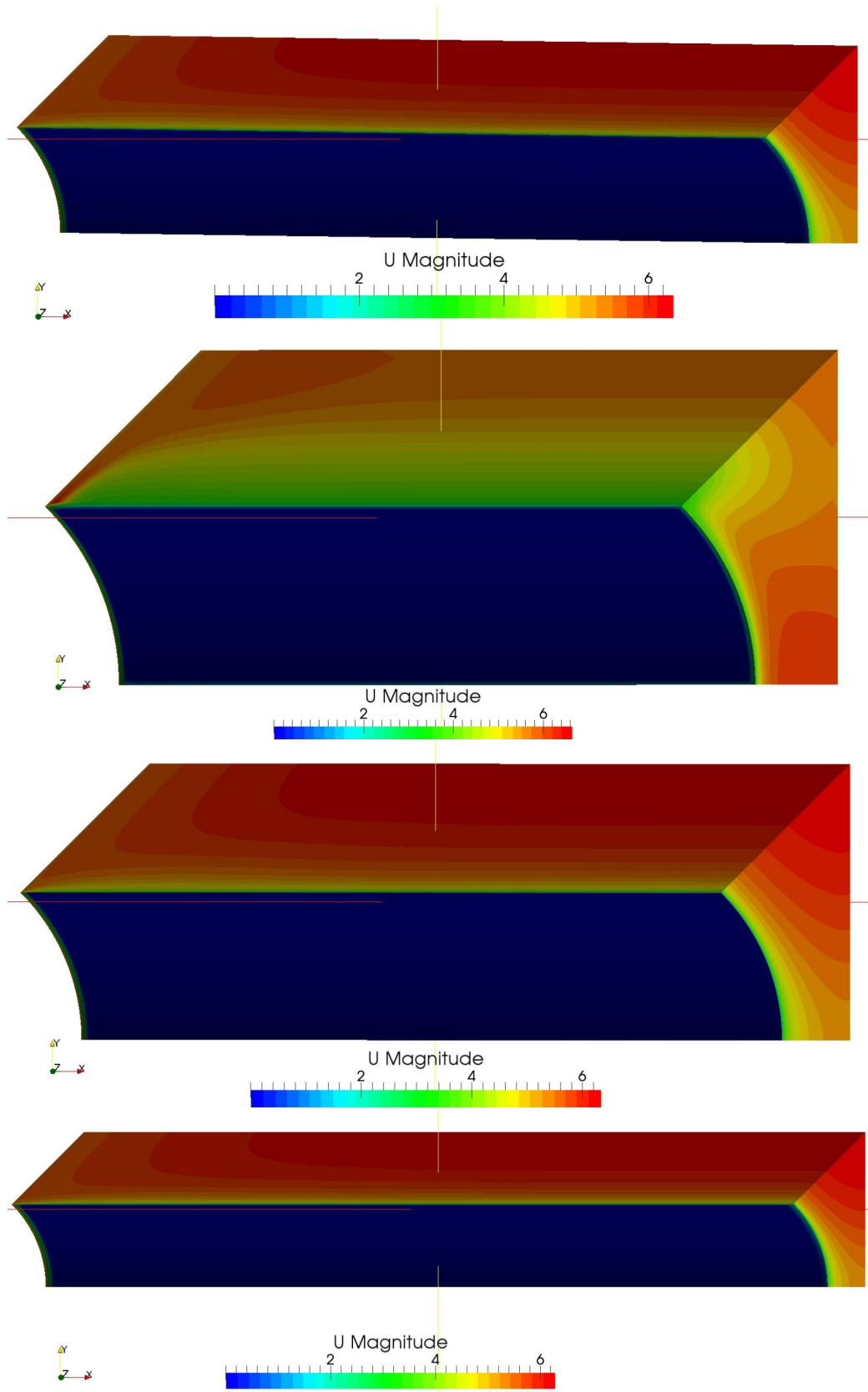


Figura 5.17: Velocidade: 10 ($\kappa - \omega$), 17 (Launder-Gibson RSTM), 29 (SST $\kappa - \omega$), 47 (SST $\kappa - \omega$)

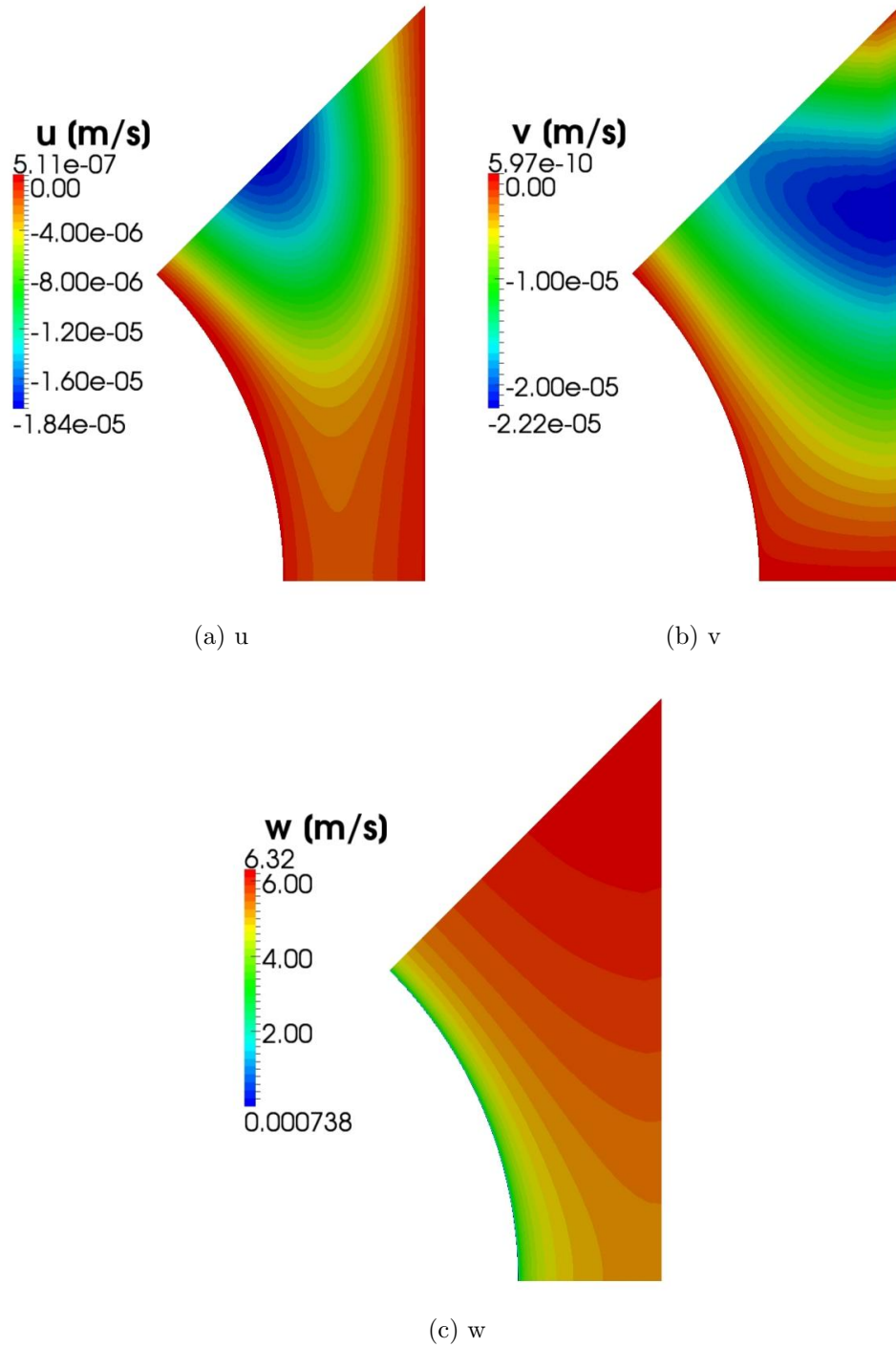


Figura 5.18: Componentes da velocidade, sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$

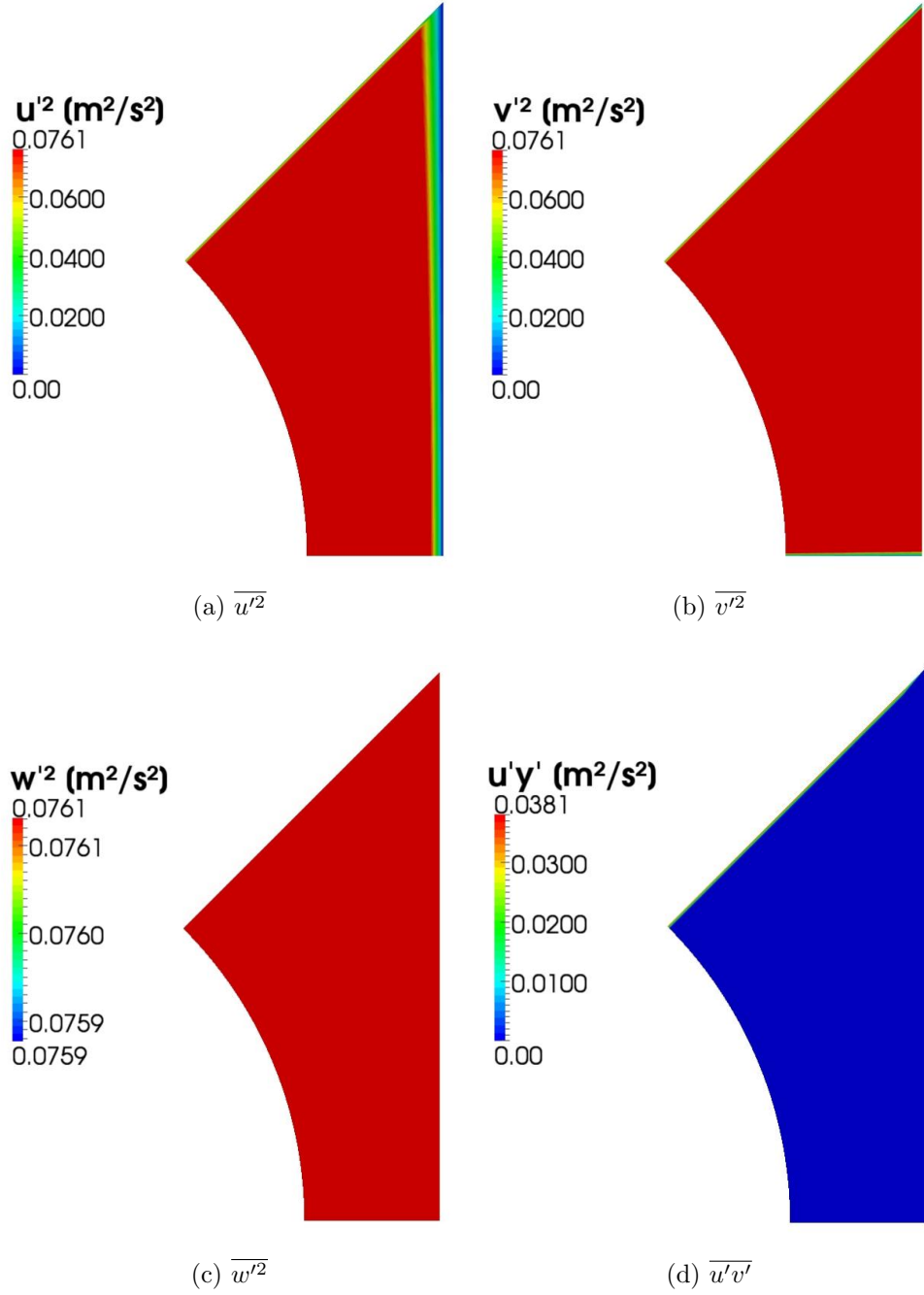


Figura 5.19: Componentes do tensor de tensões de Reynolds, sim N° 29, modelo SST

$\kappa - \omega$

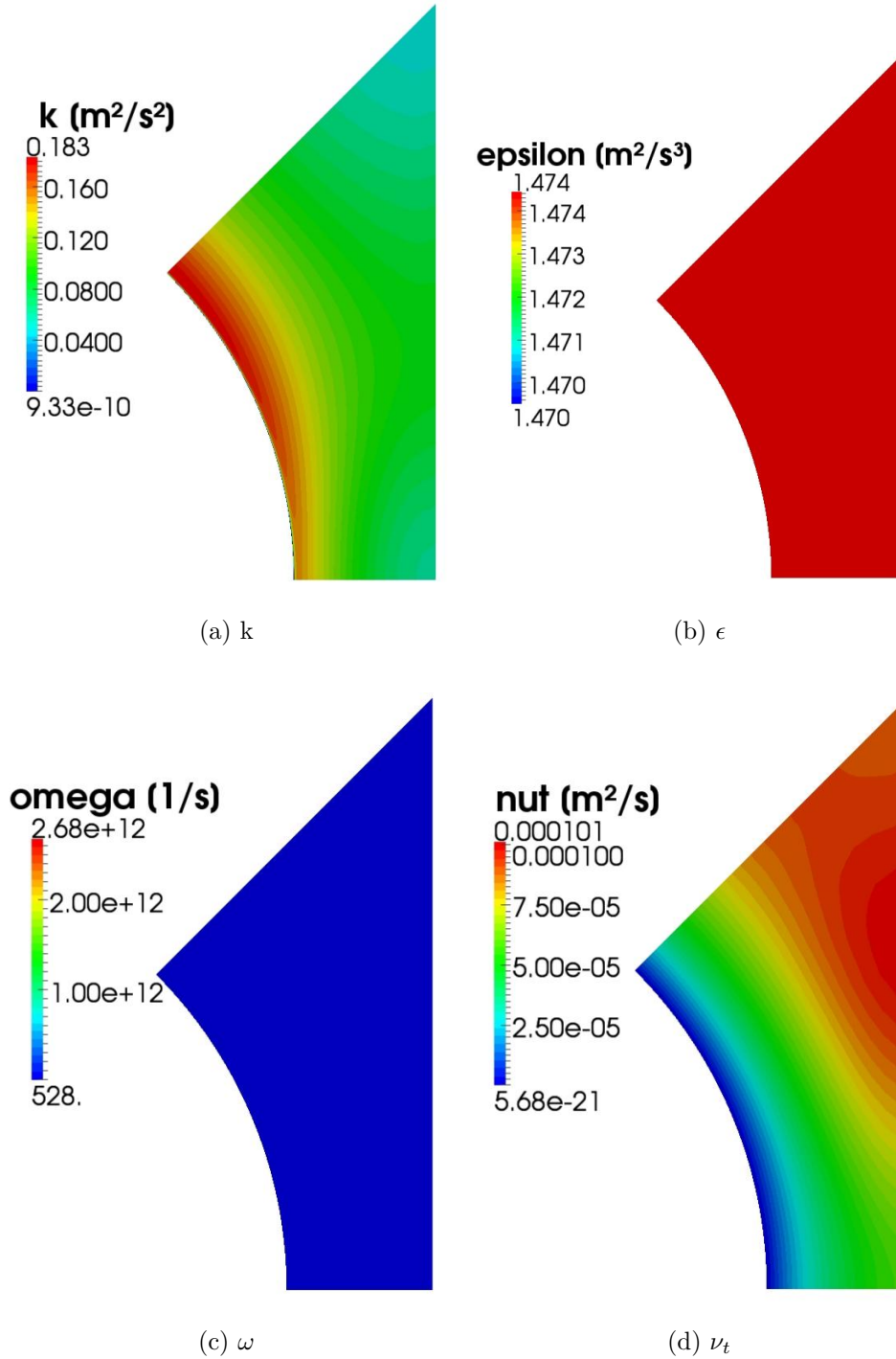
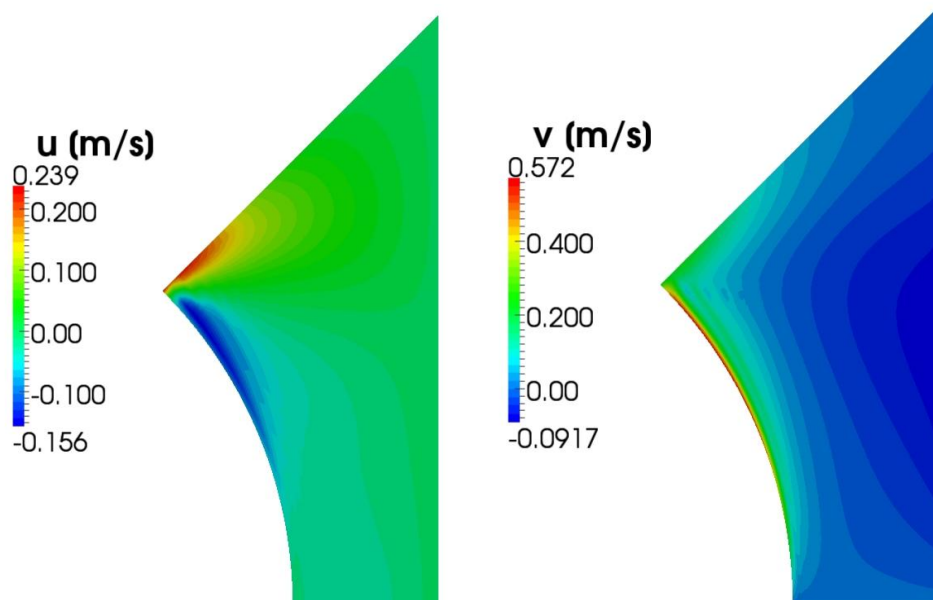
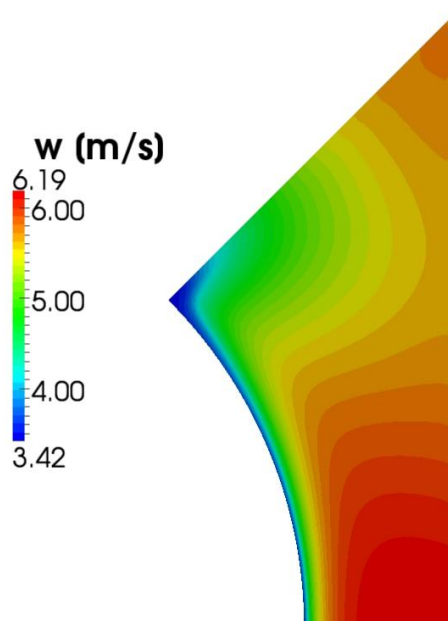


Figura 5.20: Variáveis turbulentas, sim N° 29, modelo SST $\kappa - \omega$



(a) u

(b) v



(c) w

Figura 5.21: Componentes da velocidade, sim N° 15, modelo Launder-Gibson RSTM

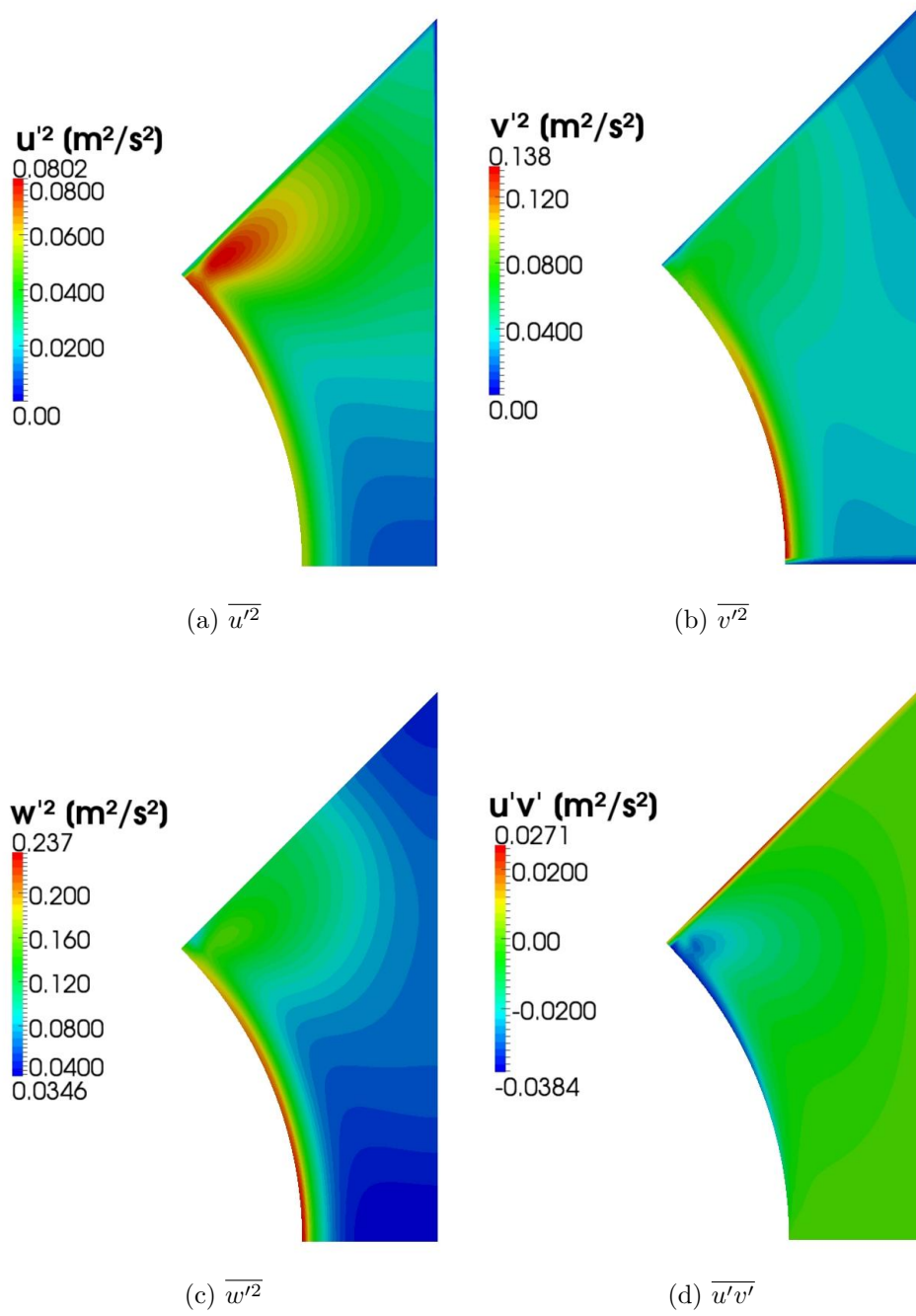
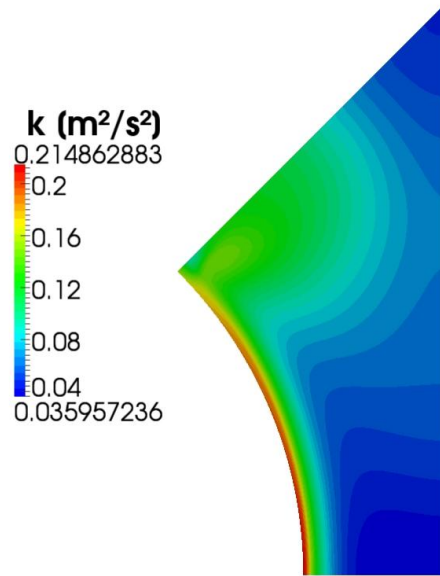
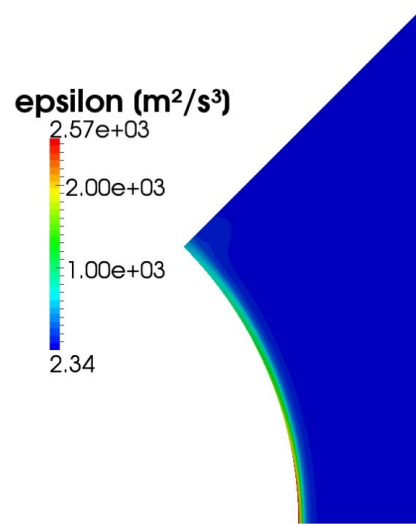


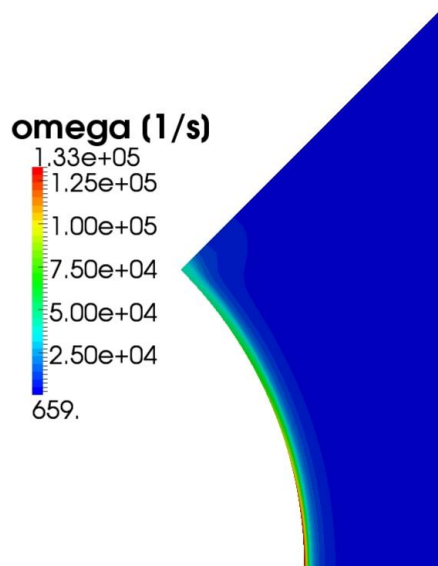
Figura 5.22: Componentes do tensor de tensões de Reynolds, sim N° 15, modelo Launder-Gibson RSTM



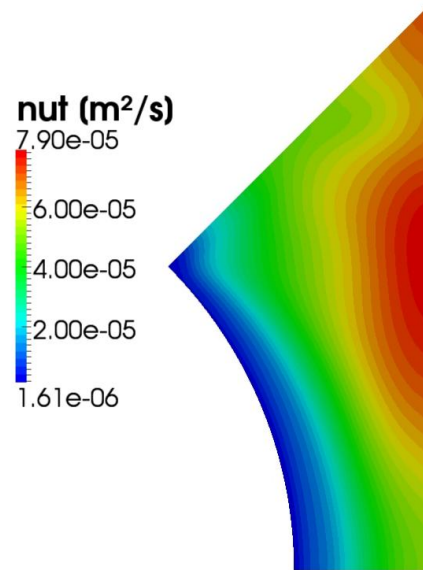
(a) k



(b) ϵ



(c) ω



(d) ν_t

Figura 5.23: Variáveis turbulentas, sim N° 15, modelo Launder-Gibson RSTM

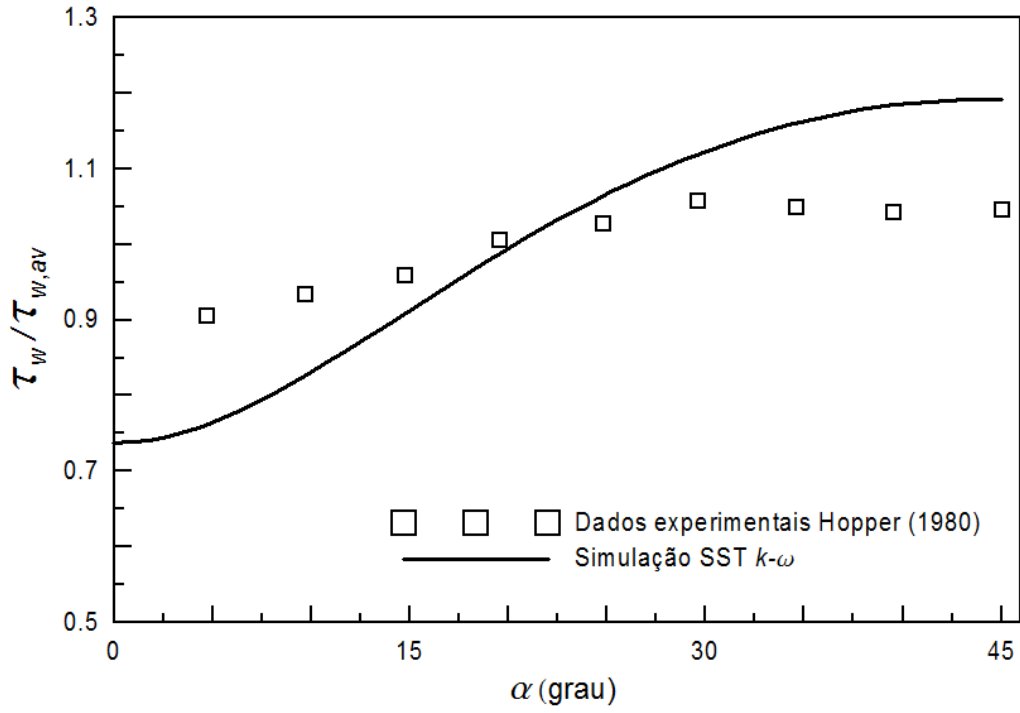


Figura 5.24: Tensão de parede normalizada, dados experimentais e de simulação.

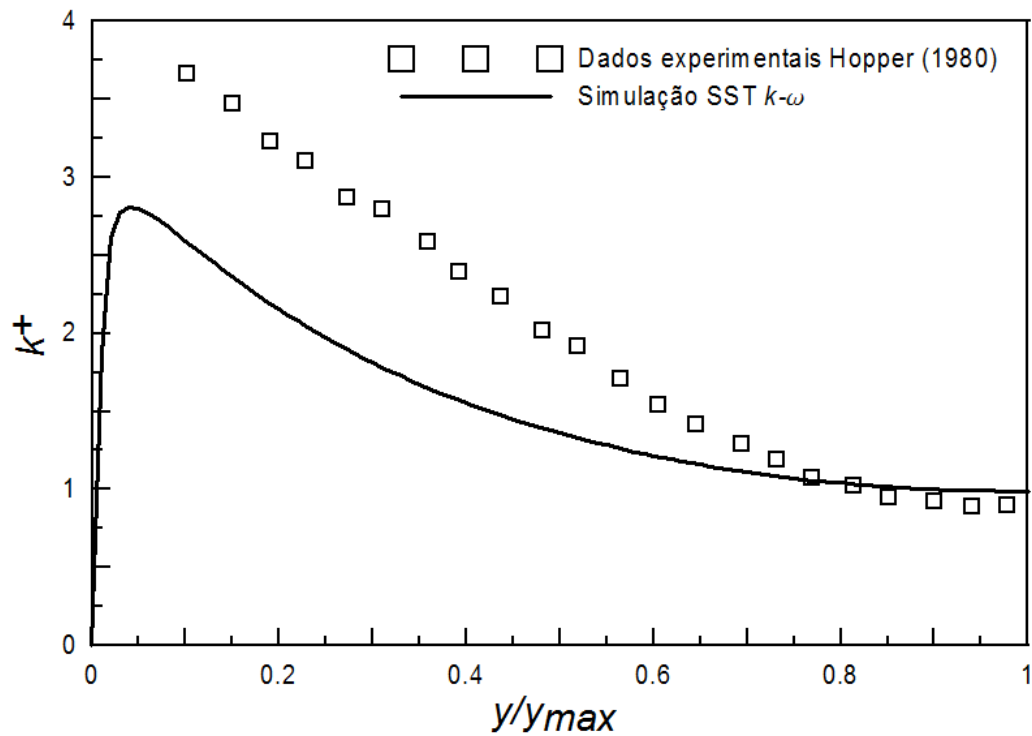


Figura 5.25: Energia cinética turbulenta normalizada, na diagonal, dados experimentais e de simulação.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões

6.1 Conclusões

Para a análise do oitavo de subcanal, a malha de 50 x 50 x 100 provou ser suficiente para atingir resultados confiáveis.

Com respeito ao refino perto da parede, nos casos de escoamento laminar, o refino não parece ser necessário, dando bons resultados tanto nas malhas com refino como nas sem refino. Por enquanto, as malhas sem refino contam com a vantagem de menor duração das simulações para estudos transientes, pois permitem um passo de tempo maior.

Nos casos de escoamentos turbulentos, se o interesse é procurar propriedades relacionadas com a parede, como a avaliação do fator de atrito, é conveniente a utilização de modelos de turbulência que tradicionalmente já são conhecidos por serem bem comportados em escoamentos contidos, tais como os modelos $\kappa - \omega$ e SST $\kappa - \omega$, utilizando um refino na parede que permita que o y^+ seja menor que 1, e utilizando leis de parede para baixos números de Reynolds. Especialmente, quando se tratar de simulações estacionárias. Mesmo assim, outros modelos também podem produzir bons resultados, como o $\kappa - \epsilon$ ou o Launder-Gibson RSTM, sempre e quando se localizar o y^+ bem acima de 30 (afastado do limite inferior da zona “log-law”), e utilizando a Lei de Parede convencional. Ante a necessidade de ter de realizar simulações transientes, seriam preferíveis esses últimos modelos, no sentido de que a malha não precisaria de refino perto da parede, e por conta do número de Courant, o passo do tempo permissível seria maior. Se o escoamento fosse não perturbado, tal

que não desse lugar a suspeita de escoamentos secundários, seria melhor permanecer com o robusto e econômico $\kappa - \epsilon$.

Mas, nos casos de escoamentos turbulentos perturbados, tal como o escoamento em um subcanal submetido ao balanço transversal (*rolling*), onde não é possível desestimar a existência de escoamentos secundários, por conta da existência de forças externas periódicas, é necessário utilizar modelos como os de tensor de tensões de Reynolds, que capturam bem esses efeitos. Dos dois modelos de tensor de tensões de Reynolds já implementados em OpenFOAM, o modelo de Launder-Gibson RSTM foi o melhor comportado, mesmo com malha de 40 x 40 x 100 células.

6.2 Sugestões

Para aprofundar este trabalho, se sugere a realização das seguintes tarefas:

- Realizar simulações estacionárias em regime turbulento para vários números de Re diferentes, para verificar se o erro do fator de atrito das simulações, com respeito ao fator de atrito da regressão de Cheng & Todreas é constante ou se depende do intervalo do número de Re.
- Realizar simulações transientes com velocidade de entrada pulsante segundo uma função periódica de tipo sinusoidal, para o regime laminar.
- Uma vez escolhida a malha com refino apropriado, realizar simulações transientes para regime turbulento, com velocidade de entrada sinusoidal, e verificar as diferenças e similaridades nos resultados com os modelos de Launder-Gibson RSTM, SST $\kappa - \omega$, $\kappa - \omega$ e $\kappa - \epsilon$, sendo que ao não ser um escoamento perturbado transversalmente, é possível que a influência de escoamentos secundários não seja muito apreciável. Sem perturbações transversais, é possível continuar usando a geometria de um oitavo de subcanal, considerando os três planos de simetria.
- Finalmente, realizar simulações já com um termo fonte pulsante nas equações de quantidade de movimento, representativo da força periódica característica do balanço transversal. Neste caso, já só com o modelo de Launder-Gibson RSTM, sendo que é altamente provável a presença de escoamentos secundários

entre subcanais, pela presença de perturbações transversais. Nesses últimos casos, o domínio já não pode se supor contido por planos de simetria, pelo que deverá utilizar uma malha representativa do subcanal completo, ou quanto mais, da metade do subcanal (considerando possibilidade de escoamento paralelo ao plano de simetria).

Referências Bibliográficas

- G. Chen, Q. Xiong, P.J. Morris, E.G. Paterson, A. Sergeev, and Y.C. Wang. Open-foam for computational fluid dynamics. *Notices of the AMS*, 61(4):354–363, 2014.
- S. K. Cheng and N. E. Todreas. Hydrodynamic models and correlations for bare and wire-wrapped hexagonal rod bundles - bundle friction factors, subchannel friction factors and mixing parameters. *Nuclear Engineering and Design*, 92:227–251, 1986.
- X. Cheng, T. Schulenberg, D. Bittermann, and P. Rau. Design analysis of core assemblies for supercritical pressure conditions. *Nuclear Engineering and Design*, 223:270–294, 2003.
- J.D. Hooper. Developed single phase turbulent flow through a square-pitch rod cluster. *Nuclear Engineering and Design*, 60:365–379, 1980.
- J.D. Hooper and K. Rehme. Large-scale structural effects in developed turbulent flow through closely-spaced rod arrays. *Journal of Fluid Mechanics*, 145:305–337, 1984.
- J.D. Hooper and D.H. Wood. Fully developed rod bundle flow over a large range of reynolds number. *Nuclear Engineering and Design*, 83:31–46, 1984.
- Ákos Horváth and Bernd Dressel. Numerical simulations of square arrayed rod bundles. *Nuclear Engineering and Design*, 247:168–182, 2012.
- V I. Kostin, Y. K. Panov, V. I. Polunichev, and I. E. Shamanin. Floating power-generating unit with a klt-40s reactor system for desalinating sea water. *Atomic Energy*, 102:31–35, 2007.
- Tomislav Maric, Jens Höpken, and Kyle Mooney. *The OpenFOAM Technology Primer*. Sourceflux, Germany, 2014.

- R. Pendyala, S. Jayanti, and A.R. Balakrishnan. Flow and pressure drop fluctuations in a vertical tube subject to low frequency oscillations. *Nuclear Engineering and Design*, 238:178–187, 2008.
- K. Rehme. Laminarstromung in stabbundeln. *Chem. Ingenieur Technik*, 43:17:962–966, 1971.
- N.E. Todreas and M.S. Kazimi. *Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals*. Taylor & Francis, 1993.
- H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: the Finite Volume Method*. Prentice Hall, Harlow, England, 2007.
- Frank White. *Fluid Mechanics*. McGraw Hill, New York, USA., 7th edition, 2011.
- David C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, Inc., La Cañada, California, 2006.
- B. Yan, L. Yu, and Y. Li. Research on operational characteristics of passive residual heat removal system under rolling motion. *Nuclear Engineering and Design*, 239: 2302–2310, 2009.
- B. H. Yan and H. Y. Gu. The flow and heat transfer of turbulent pulsating flow in rod bundles in rolling motion. *Progress in Nuclear Energy*, 54:49–55, 2012.
- B. H. Yan, H. Y. Gu, Y. H. Yang, and L. Yu. Effect of rolling on the flowing and heat transfer characteristic of turbulent flow in sub-channels. *Progress in Nuclear Energy*, 53:59–65, 2011d.
- B.H. Yan, L. Yu, and Y.H. Yang. Effects of ship motions on laminar flow in tubes. *Annals of Nuclear Energy*, 37:52–57, 2010a.
- B.H. Yan, H.Y. Gu, Y.H. Yang, and L. Yu. Numerical analysis of flowing characteristics of turbulent flow in rectangular channels in ocean environment. *Progress in Nuclear Energy*, 53:10–18, 2011c.
- B.H. Yan, H.Y. Gu, and L. Yu. The flow and heat transfer characteristics of turbulent flow in typical rod bundles in ocean environment. *Progress in Nuclear Energy*, 53: 487–498, 2011e.

B.H. Yan, H.Y. Gu, and L. Yu. Unsteady reynolds averaged navier-stokes simulation of the turbulent flow pulsation and coherent structures in a tight lattice in rolling motion. *Annals of Nuclear Energy*, 38:1023–1032, 2011g.