

COMPARAÇÃO DAS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS OBTIDAS POR CÓDIGOS COMERCIAIS DE DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Pedro Dinis Gaspar - Universidade da Beira Interior - (dinis@demnet.ubi.pt)

Rui Filipe Barroca - Instituto Politécnico da Guarda - (barroca@ipg.pt)

Rui A. Pitarma - Instituto Politécnico da Guarda - (rpitarma@ipg.pt)

Resumo

O objectivo deste trabalho consiste na confrontação dos resultados numéricos obtidos por pacotes comerciais de software de Dinâmica de Fluidos Computacional. Assim, pretende-se estabelecer uma perspectiva sobre as vantagens e desvantagens inerentes a cada um destes. A importância desta comparação prende-se com a crescente aceitação da simulação numérica de fenómenos físicos de dinâmica de fluidos, graças à evolução dos modelos matemáticos que os retratam, dos meios computacionais e dos casos de validação de resultados.

Palavras-chave : Simulação; DFC; Phoenics; Fluent.

1. Introdução

A Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) consiste na realização de previsões do comportamento de fenómenos físicos através do cálculo numérico computacional. A simulação dos processos permite estudar o escoamento de fluidos, com transmissão de calor e/ou massa, mudança de fase, reacções químicas, movimentos mecânicos, tensões, entre outros.

Os modelos matemáticos representativos das leis da Física que governam os fenómenos físicos são descritos por equações diferenciais de derivadas parciais, muitos dos quais sem resolução analítica. Os códigos comerciais de DFC usados neste trabalho foram o *PHOENICS* e o *FLUENT*, que permitem a discretização destas equações através do método das diferenças finitas – volumes de controlo com resolução baseada num procedimento numérico iterativo.

O código comercial *PHOENICS* destina-se à simulação dos vários fenómenos descritos, com aparecimento no mercado em 1981, pelo que neste momento prima pelos variados modelos físicos, técnicas matemáticas e validação de resultados que possui. No entanto, embora tenha sofrido diversas evoluções, os princípios de base e a fundamentação do código continuam semelhantes, pelo que os códigos desenvolvidos mais recentemente como seja o caso do *FLUENT* optaram por outra metodologia de estruturação e funcionamento, beneficiando a facilidade de utilização em função da versatilidade e simplicidade da interface utilizador-programa.

O conhecimento quantitativo e espacial sobre o escoamento de fluidos com ou sem transmissão de calor e os seus efeitos nos sólidos com os quais estão em contacto, permite elaborar rápidas respostas a problemas inseridos numa vasta gama de áreas, como sejam a engenharia, arquitectura, ambiente, entre outras, que de outro modo requereriam um trabalho de análise experimental com custos monetário, humano e temporal elevados. No entanto, a elaboração de um código isolado para a previsão de um determinado escoamento é complexa e demorada, o que justifica a utilização preferencial de códigos comerciais.

2. Descrição sumária dos códigos comerciais

A estrutura do código de modelação *PHOENICS* é composta por três funcionalidades distintas mas interligadas. No pré-processamento é realizada a definição do problema, que envolve a especificação da geometria dos objectos e espaços intervenientes, das propriedades termodinâmicas, de transporte e outro tipo de propriedades dos fluidos e sólidos envolvidos, bem como, a selecção dos modelos matemáticos que descrevem os diversos fenómenos a simular. É também prescrita a malha computacional ortogonal, podendo ser formadas malhas mais complexas não ortogonais através de pacotes de softwares externos comerciais compatíveis, situação que também ocorre no pacote *FLUENT*. Este tem a particularidade de modelar os escoamentos de fluidos e transferência de calor para vários tipos de geometrias/malhas simples e complexas, provenientes de softwares de CAD/CAE. A Fluent Inc. indica o software *GAMBIT*, onde são criadas as geometrias com diversos graus de complexidade em 2D ou 3D e permite a criação da respectiva malha, podendo ser ortogonal ou não.

No *PHOENICS*, ao solver compete a resolução iterativa das equações formuladas às diferenças finitas – volumes de controlo, discretizadas através de um dos esquemas de diferenciação disponíveis e resolvidas através do algoritmo de resolução SIMPLEST. O *FLUENT* incorpora as funcionalidades de solver e pós-processamento, já que faz uso de um método numérico semelhante e efectua a visualização de resultados. Além disso, importa a geometria/malha, permite a definição das condições de fronteira, propriedades do fluido, materiais e executa as operações de resolução através do algoritmo SIMPLE(C) e PISO. Para o código *PHOENICS* podem ser encontrados pormenores relativos à especificação do código em Phoenix [5,6], e em Fluent [2] para o *FLUENT*.

No campo ambiental, Zhubrin [8], apresenta um caso de demonstração do *PHOENICS* que retrata o derramamento de substâncias químicas no leito de um rio com uma topografia complexa. Supõe-se que dois componentes químicos neutros são derramados com fracções mássicas constantes, mas ao entrarem em contacto reagem e dão origem a uma espécie intermédia e a duas espécies tóxicas. Esta simulação tem por objectivo calcular a concentração de produtos químicos no leito do rio e identificar os locais de maior concentração de contaminação tóxica em função das correntes. Com esta simulação pretende-se realizar uma avaliação atempada do impacto ambiental decorrente do derramamento de substâncias reagentes num qualquer ecossistema, de modo à elaboração de acções preventivas e de minimização dos danos na fauna e flora.

No campo energético, o *FLUENT* tem grandes potencialidades, desde a simulação de sistemas de ventilação/climatização a sistemas de combustão, entre outros.

Este código apresenta um exemplo com validação de resultados proposta por Chen [1], onde é simulado o escoamento da mistura de ar-combustível no interior de um cilindro do motor de um automóvel, devido à sua importância na eficiência da combustão e no rendimento do motor. A avaliação deste fenómeno permite melhorar a geometria do cilindro, da válvula e do injector.

3. Aplicação a um caso prático validado

De modo a evidenciar as diferenças existentes nos códigos utilizados, foi considerado um caso prático amplamente validado referente a uma expansão numa conduta bidimensional conforme exposto na *Figura 1.*, já que permite simular

numericamente os fenômenos físicos relativos ao comportamento geral do escoamento com transmissão de calor, que por excelência são encontrados na maioria dos casos de modelação numérica. Trata-se de um caso numérico clássico devido à influência a que o campo térmico é sujeito pelas características do escoamento, promovendo um aumento da taxa de transmissão de calor nas zonas de recolamento com um escoamento não separado. No caso simulado não foi considerada a transmissão de calor através das paredes da conduta, apenas foi fixada a sua temperatura.

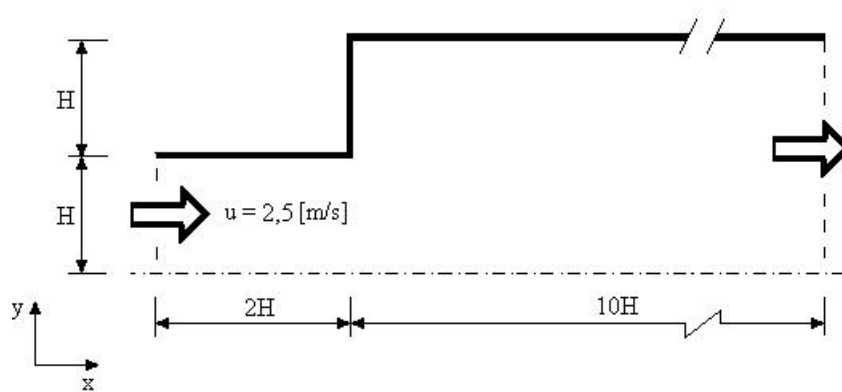


Figura 1. – Configuração da expansão na conduta bidimensional.

3.1. Modelo matemático

Para estabelecer uma plataforma de comparação de resultados, o modelo matemático que descreve o fenômeno é igual, incorporando a equação da continuidade acoplada às equações de quantidade de movimento para um escoamento turbulento, incompressível e bidimensional, que de um modo genérico é dado por :

$$\sum \frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{r} \frac{\partial U_i}{\partial t} + \mathbf{r} \sum_j \frac{\partial (U_i U_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + F_i + \mathbf{r} \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mathbf{n}_j \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] \quad (2)$$

Pela sua ampla aplicação e aceitação, a modelação da turbulência é realizada através do modelo de turbulência k-ε standard, dada a sua utilização no estudo da distribuição do campo de velocidades, temperaturas, intensidade de turbulência, humidade relativa, concentração de contaminantes e qualidade do ar em ambientes

interiores. Apresentando resultados muito aceitáveis, é restrito a regiões em que o escoamento é turbulento completamente desenvolvido, enquanto que o escoamento que é afectado pela viscosidade nas proximidades das paredes é ligado através do uso de funções logarítmicas de parede. Para N.º de Reynolds elevados, a formulação pode ser descrita pelas seguintes equações de transporte de turbulência :

$$\mathbf{r} \frac{Dk}{Dt} + \mathbf{r} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[U_i k - \frac{\mathbf{n}_t}{Pr_t(k)} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] = \mathbf{r} (P_k + \Gamma_b - \mathbf{e}) \quad (3)$$

$$\mathbf{r} \frac{De}{Dt} + \mathbf{r} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[U_i \mathbf{e} - \frac{\mathbf{n}_t}{Pr_t(\mathbf{e})} \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial x_i} \right] = \mathbf{r} \frac{\mathbf{e}}{k} (C_{1e} P_k + C_{3e} \Gamma_b - C_{2e} \mathbf{e}) \quad (4)$$

Tratando-se de um modelo baseado no conceito de viscosidade turbulenta, assume-se que as correlações desconhecidas são proporcionais aos gradientes espaciais das quantidades que transportam. A viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido, mas depende do estado de turbulência em que o fluido em estudo se encontra.

A descrição completa do modelo de turbulência k-ε standard, bem como das diversas constantes empíricas, determinadas com base experimental que possui podem ser encontradas em Rodi [7].

3.2. Modelo Numérico

O modelo numérico intrinsecamente implementado nos dois códigos baseia-se na discretização das equações diferenciais por meio do método das diferenças finitas – volumes de controlo, cuja formulação é dada por :

$$\frac{\partial(\mathbf{r}\mathbf{f})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mathbf{r}U\mathbf{f} - \Gamma_f \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_k} \right) = S_f \quad (5)$$

Apesar de algumas diferenças relativas à implementação, a discretização dos termos convectivos nas equações de transporte relativas aos volumes de controlo, para todas as variáveis é realizada através do esquema de discretização “Upwind” (UDS) de 1ª Ordem. Embora seja um esquema de discretização muito propício a provocar difusão numérica, foi a solução encontrada para a comparação de resultados, já que está implementado nos dois códigos, podendo ser encontrada a descrição pormenorizada em

Patankar [3]. O algoritmo utilizado para o acoplamento das equações da quantidade de movimento à equação da continuidade, para o código *FLUENT* é o SIMPLE como é descrito por Patankar [3] enquanto o código *PHOENICS* faz uso do algoritmo SIMPLEST. Em ambas as simulações foi utilizada uma malha ortogonal (120x20), desfasada para as componentes da velocidade, tal que as propriedades escalares são calculadas no centro dos volumes de controlo, enquanto as componentes da velocidade são calculadas nos pontos médios das faces dos volumes de controlo. O refinamento da malha considerado em todo o domínio de cálculo, tem como objectivo fundamental reduzir a difusão numérica provocada pelo esquema de discretização utilizado.

As condições de fronteira relativas à entrada e saída de fluido, bem como, a especificação das leis de parede para a simulação do escoamento na proximidade de paredes sólidas estão desenvolvidas em *Phoenics* [6] para o código *PHOENICS* e em *Fluent* [2] para o código *FLUENT*. Ambos códigos possuem por defeito os diversos tipos de condições de fronteira, relativos às paredes sólidas e entrada e saída de massa, embora qualquer um destes possibilite ao utilizador a sua definição através da imposição das diversas variáveis dependentes a uma constante ou a uma expressão algébrica. Estes elementos são representados por termos fonte na equação geral de transporte. Nas condições de fronteira de parede sólida é especificado o material, bem como as suas propriedades físicas, enquanto nas condições de fronteira de entrada e saída de massa é definido o fluido de trabalho, a sua velocidade ou caudal, temperatura e propriedades físicas.

Os factores de relaxação utilizados para as diversas variáveis, tendo em conta o carácter elíptico do escoamento, pretendem reduzir as variações bruscas no processo iterativo fomentando a estabilidade numérica e acelerando a convergência baseada na análise dos resíduos conforme exposto por Patankar [3]. No *PHOENICS* é permitida a utilização de dois tipos de relaxação, linear ou inercial, enquanto o *FLUENT* apenas permite a relaxação linear. De modo a comparar a velocidade de convergência da solução, foram utilizados factores de relaxação linear para as seguintes variáveis dependentes apresentadas na *Tabela 1.* :

p	U	W	k	e	T
0,3	0,7	0,7	0,8	0,8	1

Tabela 1. – Factores de relaxação linear.

4. Comparação e discussão dos resultados

De seguida são apresentados e discutidos os resultados mais significativos da simulação numérica realizada por cada um dos códigos. Os resultados relativos à velocidade segundo a direcção axial e radial, obtidos para o plano $x=2,525$ [m] são apresentados na *Figura 2.*:

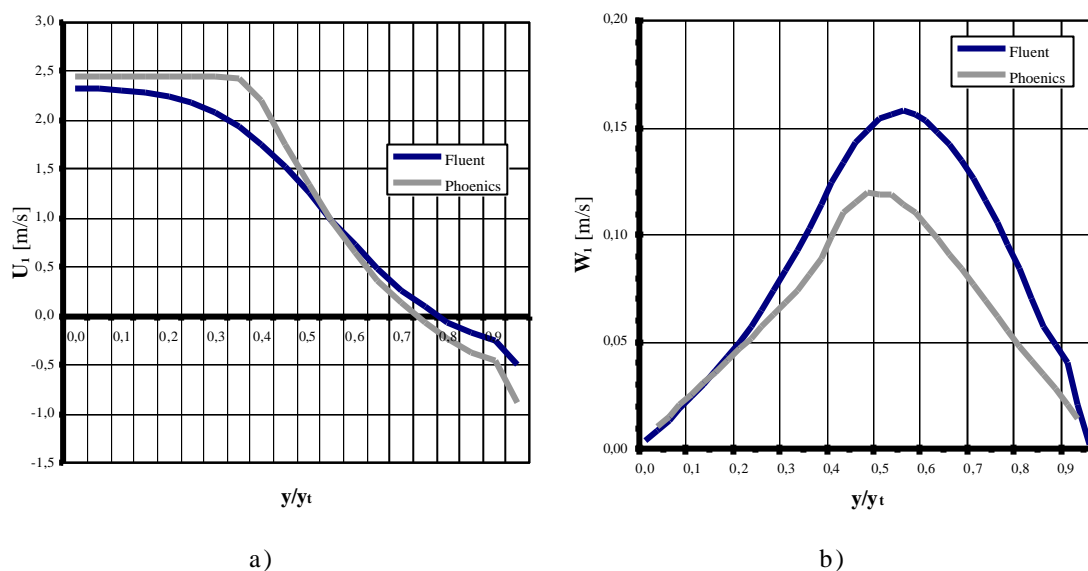


Figura 2. – Comparação dos resultados das velocidades no plano $x = 2,525$ [m].
a) Velocidade axial b) Velocidade radial

Comparando os resultados apresentados na *Figura 2.* a) e b) correspondentes à velocidade axial e à velocidade radial, verifica-se uma discrepância entre os dois códigos, embora qualitativamente sejam esboçados perfis semelhantes. As simulações fizeram uso dos mesmos modelos matemático e numérico, há excepção de certos pormenores inerentes aos códigos de cálculo. A igualdade da geometria e malha computacional, das propriedades físicas dos materiais e do fluido de trabalho, do esquema de discretização e do critério de convergência da solução, restringem as causas da divergência dos resultados, ao algoritmo de solução ou aos métodos internos de cálculo presentes em cada um dos códigos.

Na *Figura 3.*, são apresentadas as isolinhas da velocidade axial. Embora no esboço anterior fosse mostrada uma evolução semelhante das propriedades ao longo de um plano, quando se visualiza todo o domínio de cálculo, são evidentes as diferenças entre os resultados obtidos pelos dois códigos. No entanto, esta discrepância poderá ser devida aos métodos de visualização apresentados por cada um dos códigos.

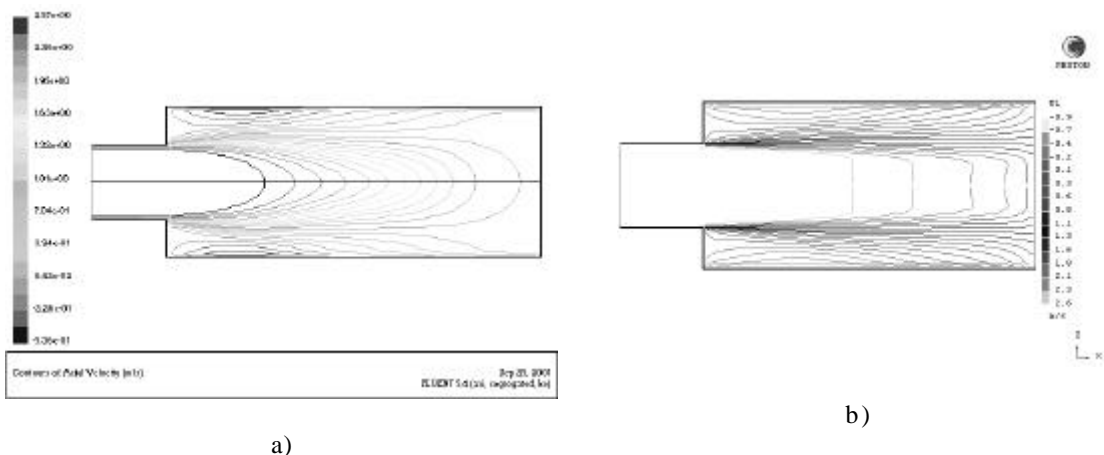


Figura 3. – Isolinhas da velocidade axial. a) código *FLUENT*, b) código *PHOENICS*.

5. Conclusão

Ao longo do trabalho foram descritas as potencialidades dos códigos comerciais de DFC e as especificações relacionadas com os modelos matemático e numérico dos códigos testados. Relativamente às previsões numéricas obtidas, apenas um estudo de validação experimental permitiria avaliar o nível de precisão dos resultados dos dois códigos testados. Não obstante, os resultados obtidos pelo código *Fluent* revelam globalmente uma maior aproximação aos valores experimentais disponíveis na bibliografia.

Cada um destes códigos é uma ferramenta científica complexa, que se pode assemelhar a uma “caixa negra”, tal que para se poder imputar alguma autenticidade aos resultados, o utilizador deve possuir um conhecimento prévio de DFC, incluindo dos fenómenos físicos que pretende simular, modelos matemático e numérico, passando pela correcta definição da malha computacional, entre outros.

Em contraponto com as diversas vantagens que estes códigos comerciais de DFC proporcionam, nomeadamente a facilidade de utilização e de implementação da maioria dos modelos que traduzem a evolução dos diversos fenómenos físicos relevantes em engenharia, a sua utilização carece de uma adequada base científica, nem sempre disponível nas pequenas e médias indústrias do sector.

6. Referências

[1] Chen, A., Lee, K.C., Yianneskis, M., and Ganti, G., Velocity Characteristics of Steady Flow Through a Straight Generic Inlet Port, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 21:571-590, 1995.

[2] Fluent 5 – User’s guide Volume 1-4, Fluent Incorporated, July 1998.

[3] Patankar, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

[4] Pereira, J. C. F. e Rocha, J. M. P., Numerical calculation of heat transfer in a turbulent separated-reattaching shear flow, 3rd Brazilian thermal science meeting, 1990.

[5] PHOENICS-VR Reference Guide – CHAM Technical Report TR/326, CHAM - Concentration, Heat and Momentum Ltd (revisto em Julho 2001) [citado em 25 de Setembro de 2001 – 18:27].

Disponível em URL: http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_docs/tr326/tr326top.htm

[6] PHOENICS-related Lectures and Tutorials, CHAM - Concentration, Heat and Momentum Ltd [citado em 25 de Setembro de 2001 – 18:27].

Disponível em URL: http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_lecs/leclist.htm

[7] Rodi, Wolfgang, *Turbulence models and their application in hydraulics – A state of the art review*, IAHR, 1980.

[8] Zhubrin, S. V., Transport and fate of a toxic spill, CHAM - Concentration, Heat and Momentum Ltd (revisto em Novembro 2000) [citado em 25 de Setembro de 2001 – 18:27].

Disponível em URL: http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_applic/d_marine/toxspil/spill.htm

7. Nomenclatura

$C_\mu, C_d,$	Constantes do modelo de turbulência
C_{1e}, C_{2e}, C_{3e}	Constantes do modelo de turbulência
C_p	Calor específico, [kJ/kg °K]
F	Força, [N]
g	Aceleração da gravidade, ($= 9,81$ [m/s ²])
h	Dimensão da entrada e/ou saída de ar, [m]
H	Entalpia, [kJ / kg]
k	Energia cinética turbulenta [m ² /s ²]; Condutibilidade térmica [W/m °K]
l_m	Comprimento de escala
m	Massa, [kg]
p	Pressão, [Pa]
P_k	Taxa de produção de k por tensões de corte, [m ² /s ³]
Pr, Pr_t, Pr_1	Número de Prandtl/Schmidt turbulento / ... laminar
R	Constante universal dos gases, ($= 0,287$ [kJ/kg °K])
S	Termo fonte
T	Temperatura, [°K]
U	Velocidade média ou instantânea, [m/s]
x, y, z	Coordenadas espaciais, [m]
y	Distância à superfície da parede, [m]

Índices Inferiores e Superiores

i, j, k	Componentes das direcções cartesianas segundo x, y e z
l	Laminar
t	Turbulento

Simbologia grega

ρ	Massa específica, [kg/m ³]
ϵ	Dissipação de energia cinética, [m ² /s ³]
ϕ	Variável genérica
μ, μ_t, μ_l	Viscosidade dinâmica / ... turbulenta / ... laminar, [N.s/m ²]
ν, ν_t, ν_l	Viscosidade cinemática molecular / ... turbulenta / ... laminar, [m ² /s]
Γ_b	Taxa de produção/destruição de k por impulsão, [m ² /s ³]
Γ_ϕ	Coefficiente de difusão para a variável genérica ϕ