

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL DA
TESE DEFENDIDA POR ODACIR ALMEIDA
NEVES..... E APROVADA
PELA COMISSÃO JULGADORA EM 30, 07, 2007

Luiz Felipe Moura
.....
ORIENTADOR

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Simulação Numérica de Dispersão de
Poluentes pelo Método de Elementos Finitos
baseado em Volumes de Controle**

Autor: **Odacir Almeida Neves**
Orientador: **Luiz Felipe Mendes de Moura**
Co-orientador: **João Batista Campos Silva**

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA TÉRMICA E DE FLUIDOS**

Simulação Numérica de Dispersão de Poluentes pelo Método de Elementos Finitos baseado em Volumes de Controle

Autor: Odacir Almeida Neves

Orientador: Prof. Dr. Luiz Felipe Mendes de Moura

Co-orientador: Prof. Dr. João Batista Campos Silva

Curso: Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Térmica e Fluidos

Tese de doutorado apresentada à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Campinas, 30 de julho de 2007
S.P. – Brasil

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

N414s Neves, Odacir Almeida
Simulação numérica de dispersão de poluentes pelo método de elementos finitos baseado em volumes de controle / Odacir Almeida Neves.--Campinas, SP: [s.n.], 2008.

Orientadores: Luiz Felipe Mendes de Moura, João Batista Campos Silva.

Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.

1. Dinâmica dos fluidos. 2. Método dos elementos finitos. 3. Equações diferenciais parciais. 4. Navier-Stokes, Equações de. 5. Dispersão. 6. Poluentes. I. Moura, Luiz Felipe Mendes de. II. Silva, João Batista Campos. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. IV. Título.

Título em Inglês: Numerical simulation of pollutants dispersion by a finite element method based on control volumes

Palavras-chave em Inglês: Navier-Stokes equations, Finite element method, Pollutant dispersion, Fluid dynamics

Área de concentração: Térmica e Fluidos

Titulação: Doutor em Engenharia Mecânica

Banca examinadora: Carlos Alberto Carrasco Altemani, Marcelo Moreira Ganzarolli, João Batista Aparecido, Vicente Luiz Scalon

Data da defesa: 30/07/2007

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Mecânica

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA TÉRMICA E DE FLUÍDOS

TESE DE DOUTORADO

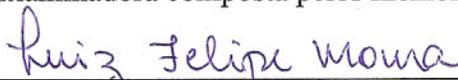
**Simulação Numérica de Dispersão de
Poluentes pelo Método de Elementos Finitos
baseado em Volumes de Controle**

Autor: **Odacir Almeida Neves**

Orientador: **Prof. Dr. Luiz Felipe Mendes de Moura**

Co-orientador: **Prof. Dr. João Batista Campos Silva**

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Tese:



**Prof. Dr. Luiz Felipe Mendes de Moura, Presidente
DETF/FEM – UNICAMP/Campinas-SP**



**Prof. Dr. Carlos Alberto Carrasco Altemani
DE/FEM – UNICAMP/Campinas-SP**



**Prof. Dr. Marcelo Moreira Ganzarolli
DE/FEM – UNICAMP/Campinas-SP**



**Prof. Dr. João Batista Aparecido
DEM/FE – UNESP/Iha Solteira-SP**



**Prof. Dr. Vicente Luiz Scalon
DEM/FEB – UNESP/Bauru-SP**

Campinas, 30 de julho de 2007.

Dedicatória

Ao amigo João Batista Campos Silva.

Agradecimentos

Comecei a desenvolver o curso de doutorado em agosto de 2003 e quero agradecer as pessoas que contribuíram para eu chegar aqui.

Primeiramente a Deus pela vida e pela sabedoria. Aos meus pais, Jaimiro e Maria e minhas irmãs, Iderli e Joseli por acreditarem em mim e pelo apoio incondicional em todos os momentos de minha vida acadêmica. Agradeço as minhas primas Eliana, Karina, Márcia, Sandra e também ao Alessandro, Toshio, Rubens Junior e tio Valmir pela força e apoio.

Muito obrigado por estar lendo este agradecimento e se você contribuiu com essa tese, serei sempre grato! Tenha certeza, sem tua colaboração, o caminho seria mais difícil.

Agradeço aos Professores Luiz Felipe Mendes de Moura e João Batista Campos Silva pela orientação e oportunidade de realizar o curso de doutorado na Faculdade de Engenharia Mecânica da Unicamp. Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro na forma de bolsa de estudos e a Fapesp pelos equipamentos concedidos através do processo 05/02301-1.

Agradeço aos professores Carlos Alberto Carrasco Altemani, Marcelo Moreira Ganzarolli, João Batista Aparecido e Vicente Luiz Scalon, juntamente com meus orientadores por terem aceitado participar da defesa de tese.

Agradeço aos Professores Carlos Alberto Carrasco Altemani, Fernando França de Almeida e Rosangela Zanoni Moreno pelos ensinamentos e apoio durante o doutorado.

Agradeço aos amigos Jefferson Correa, Marcio Machado, Francisco Ilson e Paulo Mioralli, meus primeiros companheiros de disciplinas na FEM e que muito me ajudaram. Agradeço também aos amigos que encontrei no Departamento de Engenharia Térmica e de Fluidos, Julio Dainezi, Fernando Camargo, Renata, Flavio, Mario, Mileni, Iraci, Juan Harold, Adélia, Jhon, Regina e Fabio, pela cumplicidade, apoio e amizade no decorrer desses últimos anos.

Meus agradecimentos às secretárias da FEM, Cleusa, Denise, Juliana e Ana Paula e aos funcionários do setor de informática, Raquel e Aguinaldo.

Aos bons momentos vividos em Campinas, agradeço aos meus companheiros e amigos Cristiano, Débora, Daniel, Edson, Ester, Rosi, Tina, Ismael, Leonel, Fausto, Fernando e Rogério.

Agradeço aos amigos Campos Silva, Nilva, João e Inês pelo apoio incondicional, amizade, pelos bons momentos vividos e por tudo que já fizeram por mim, serei sempre grato. Aos meus companheiros de república em Ilha Solteira, Leonardo, Julio, Ricardo e Renato quero deixar um forte abraço e dizer muito obrigado. Também agradeço aos amigos que encontrei ou reencontrei em Ilha Solteira. A turma do Grupo de Partilha Profissional de Ilha Solteira, deixo meus agradecimentos.

Agradeço a Vanessa Davanço Pereira e Rosiane Cristina de Lima pelas contribuições referentes ao trabalho e pela amizade. Agradeço também os amigos Fabio Laura, Oraci e Gilmar.

Meus agradecimentos ao Departamento e Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da Unesp, Campus de Ilha Solteira por ter me recebido e criado as condições necessárias para eu trabalhar com o Prof. João Batista Campos Silva, um dos orientadores do trabalho.

Agradeço à equipe do Hospital de Base, Unidade Ilha Solteira, na pessoa da enfermeira Zenaide que me acolheu com todos os cuidados e profissionalismo.

Agradeço o amigo Gustavo juntamente com sua família e aos amigos Rogério, Sandhoerts, Maricato, Gilson e Adriano pelos momentos vividos, pelas motivações e apoio, principalmente no início do trabalho.

Resumo

Neves, Odacir Almeida, *Simulação Numérica de Dispersão de Poluentes pelo Método de Elementos Finitos baseado em Volumes de Controle*, Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2007, 102 p.

A dispersão de poluentes no meio ambiente é um problema de grande interesse, por afetar diretamente a qualidade do ar, principalmente, nas grandes cidades. Ferramentas experimentais e numéricas têm sido utilizadas para prever o comportamento da dispersão de espécies poluentes na atmosfera.

Códigos computacionais escritos na linguagem de programação fortran 90 foram desenvolvidos para obter simulações bidimensionais das equações de Navier-Stokes e de transporte de calor ou massa em regiões com obstáculos, variando a posição da fonte poluidora e simulações tridimensionais de equações de transporte arbitrando um campo de velocidade. Utilizaram-se, no primeiro caso, elementos finitos lagrangeanos quadrilaterais de quatro e de nove pontos nodais e no segundo, elementos lagrangeanos hexaedrais de oito e de vinte e sete pontos nodais.

Os resultados numéricos de algumas aplicações foram obtidos e, quando possível, comparados com resultados da literatura apresentando concordância satisfatória.

Palavras Chave: Equações de Navier-Stokes, Método de Elementos Finitos, Dispersão de Poluentes, Dinâmica dos Fluidos.

Abstract

Neves, Odacir Almeida, *Numerical Simulation of Pollutants Dispersion by a Finite Element Method based on Control Volumes*, Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2007, 102 p.

The dispersion of pollutant species in the environment is a problem of interest due to the bad quality of the air that this can originate, mainly, in big cities. Numerical and experimental tools have been developed and used to predict the behavior of the dispersion of pollutants in the atmosphere.

In this work, computational codes have been developed in Fortran 90 language to simulate the flow with heat and mass transfer by solving the Navier-Stokes equations and the transport equations in two-dimensional domains with obstacles inserted in the media representing for example an urban canyon. Simulations of the three-dimensional transport equations for a given profile of velocity have also been done. In the two-dimensional simulations, it was utilized finite element quadrilateral Lagrangians of four and nine nodes; and in the three-dimensional simulations, it was utilized hexaedral finite elements Lagrangians of eight and twenty-seven nodes.

The numerical results of some applications have been obtained and, when possible, compared to results from the literature. Both presented satisfactory concordance.

Keywords: Navier-Stokes equations, Finite Element Method, Pollutant Dispersion, Fluid Dynamics.

Índice

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xiv
Nomenclatura	xv
CAPÍTULO 1.....	1
Simulação Numérica de Dispersão de Poluentes pelo Método de Elementos Finitos Baseado em Volumes de Controle	1
1.1 – Introdução	1
1.2 – Dinâmica dos Fluidos Computacional	2
1.3 – Métodos Numéricos para Escoamentos de Fluidos e Transferência de Calor ou Massa	3
1.4 – Simulação de Escoamentos Turbulentos	5
1.5 – Dispersão de Poluentes em Cânions Urbanos	7
1.6 – Objetivos	9
CAPÍTULO 2.....	10
Formulação Matemática	10
2.1 – Turbulência: Simulação de Grandes Escalas	12
2.2 – Modelagem Submalha da Turbulência, Modelo de Smagorinsky	13
2.3 – Adimensionalização das Variáveis nas Equações	15

CAPÍTULO 3.....	17
Desenvolvimento do Modelo Numérico	17
3.1 – Discretização dos Domínios para Problemas Tridimensionais	18
3.2 – Integração das Equações nos Subvolumes de Controle	19
3.2.1 – Discretização no Tempo	19
3.2.2 – Discretização Espacial das Equações – Aplicação de um Método de Elemento Finito por Volumes de Controle	21
3.2.3 – Funções de Interpolação	23
3.2.4 – Cálculo das Matrizes nos Elementos	26
3.3 – Solução do Sistema de Equações Discretizadas	30
 CAPÍTULO 4.....	 32
Resultados e Discussão de Casos Bidimensionais	32
4.1 – Escoamentos em Cânions Urbanos	32
4.1.1 – Dispersão de contaminante em um canal com dois obstáculos de alturas iguais	34
4.1.2 – Dispersão de contaminante em um canal com dois obstáculos de alturas diferentes.	38
4.2 – Dispersão horizontal de uma espécie de contaminante numa região com cinco obstáculos.	41
 CAPÍTULO 5.....	 47
Soluções de Problemas Convectivo-difusivos Tridimensionais	47
5.1 – Convecção – Difusão em uma Cavidade Cúbica	48
5.2 – Convecção – Difusão em um Canal	55
 CONCLUSÃO E SUGESTÃO PARA FUTUROS TRABALHOS.....	 68
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	70
APÊNDICE A	77
APÊNDICE B	80

Lista de Figuras

Figura 3.1 – Hexaedro com vinte e sete pontos nodais	19
Figura 3.2 – (a) Elemento finito e seus subvolumes de controle; (b) Elemento subdividido em volumes de controle	24
Figura 3.3a: Elemento em coordenadas globais, x, y, z	27
Figura 3.3b: Elemento mapeado no elemento mestre em coordenadas locais, ξ, η, ζ	27
Figura 4.1 – Geometria e condições de contorno - cânion urbano, caso 1	34
Figura 4.2 – Domínio discretizado, caso 1	35
Figura 4.3 – Perfil de velocidade u antes do primeiro prédio	35
Figura 4.4 – Perfil de velocidade u entre os prédios	35
Figura 4.5 – Perfil de velocidade u depois do segundo prédio	35
Figura 4.6 – Perfil de velocidade u no final da seção, $x = 54,4$	35
Figura 4.7 – Função de corrente em $t=13,5$	36
Figura 4.8 – Campo de temperatura em $t=13,5$	36
Figura 4.9 – Campo de concentração da poluição em $t=6$	37
Figura 4.10 – Campo de concentração da poluição em $t=13,5$	37
Figura 4.11 – Geometria e condições de contorno - cânion urbano, caso 2	38
Figura 4.12 – Domínio discretizado, caso 2	39
Figura 4.13 – Perfil de velocidade ao longo do domínio	39
Figura 4.14 – Função de corrente	40
Figura 4.15 – Campo de temperatura, regime permanente	40
Figura 4.16 – Campo de concentração da poluição	40
Figura 4.17 – Vista aproximada do campo de concentração	41
Figura 4.18 – Geometria e condições de contorno, caso 3	42

Figura 4.19 – Fragmento do domínio considerado, caso 3	42
Figura 4.20a – Perfil de velocidade antes do primeiro obstáculo	43
Figura 4.20b – Perfil de velocidade na metade do primeiro obstáculo	43
Figura 4.20c – Perfil de velocidade entre o primeiro e segundo obstáculo	43
Figura 4.20d – Perfil de velocidade na metade do segundo obstáculo	43
Figura 4.20e – Perfil de velocidade entre o segundo e terceiro obstáculos	43
Figura 4.20f – Perfil de velocidade na metade do terceiro obstáculo	43
Figura 4.20g – Perfil de velocidade após o terceiro obstáculo.....	44
Figura 4.20h – Perfil de velocidade na saída do domínio	44
Figura 4.21a – Campo de concentração em $t=3$	45
Figura 4.21b – Campo de concentração em $t=12$	45
Figura 4.21c – Campo de concentração em $t=20$	45
Figura 4.21d – Campo de concentração em $t=30$	45
Figura 4.21e – Campo de concentração em $t=35$	45
Figura 4.21f – Campo de concentração em $t=40$	45
Figura 4.21g – Campo de concentração em $t=45$	46
Figura 4.21h – Campo de concentração em $t=50$	46
Figura 4.22a – Função de corrente, $t = 80$	46
Figura 4.22b – Função de corrente, região ampliada	46
Figura 4.23a – Campo de temperatura, $t = 80$	46
Figura 4.23b – Campo de temperatura, região ampliada	46
Figura 5.1 – Geometria e condições de contorno: (a) caso 1, (b) caso 2, (c) caso 3.....	48
Figura 5.2 – Perfil do escalar ϕ , caso 1.	49
Figura 5.3 – Perfil do escalar ϕ , caso 2.	50
Figura 5.4 – Perfil do escalar ϕ , caso 3.	50
Figura 5.5 – Perfil do escalar ϕ para $Pe = 1,0e4$, (a) caso 1, (b) caso 2, (c) caso 3.	51
Figura 5.6 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,5$ com $Pe = 0,1$, caso 1.	52
Figura 5.7 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,25$ com $Pe = 100$, caso 1.	52
Figura 5.8 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,5$ com $Pe = 100$, caso 1.	53
Figura 5.9 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,75$ com $Pe = 100$, caso 1.	53
Figura 5.10 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,25$ com $Pe = 100$, caso 3.	54

Figura 5.11 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,5$ com $Pe = 100$, caso 3.	54
Figura 5.12 – Distribuição de temperatura no plano $x = 0,75$ com $Pe = 100$, caso 3.	54
Figura 5.13 – Geometria e condições de contorno no canal, caso 1	55
Figura 5.14 – Perfil do escalar ϕ para (a) pe distintos e (b) com $Pe = 52$ em diferentes planos....	56
Figura 5.15– Perfil de temperatura no plano $x = 10$ com $Pe = 52$	56
Figura 5.16– Perfil de temperatura no plano $x = 20$ com $Pe = 52$	57
Figura 5.17 – Perfil de temperatura no plano $x = 30$ com $Pe = 52$	57
Figura 5.18 – Linhas de concentração ao longo do canal	58
Figura 5.19a – Campo de concentração no plano $x = 5$	58
Figura 5.19b – Campo de concentração no plano $x = 15$	59
Figura 5.19c – Campo de concentração no plano $x = 20$	59
Figura 5.19d – Campo de concentração no plano $x = 35$	59
Figura 5.20 – Linhas de concentração ao longo do canal	60
Figura 5.21a – Campo de concentração no plano $x = 5$	60
Figura 5.21b – Campo de concentração no plano $x = 10$	61
Figura 5.21c – Campo de concentração no plano $x = 15$	61
Figura 5.21d – Campo de concentração no plano $x = 30$	61
Figura 5.22 – Geometria e condições de contorno no canal, caso 2	62
Figura 5.23 – Perfil do escalar ϕ para (a) pe distintos e (b) com $Pe = 52$ em diferentes planos....	62
Figura 5.24 – Perfil de temperatura no plano $x = 10$ com $Pe = 52$	63
Figura 5.25 – Perfil de temperatura no plano $x = 20$ com $Pe = 52$	63
Figura 5.26 – Perfil de temperatura no plano $x = 30$ com $Pe = 52$	64
Figura 5.27: – Geometria e condições de contorno no canal, caso 3	64
Figura 5.28 – Perfil do escalar ϕ para pe distintos em (a) $x = 5, y = 0,5$ e (b) $x = 15, y = 0,5$	65
Figura 5.29 – Perfil do escalar ϕ para $Pe = 52$	65
Figura 5.30 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 10$ com $Pe = 52$	66
Figura 5.31 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 20$ com $Pe = 52$	66
Figura 5.32 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 30$ com $Pe = 52$	66
Figura 5.33 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 3$ com $Pe = 52$	67
Figura 5.34 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 10$ com $Pe = 52$	67
Figura 5.35 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 15$ com $Pe = 52$	67

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 – Variáveis, propriedades e termos da equação (2.24).....	16
Tabela 3.1 – Valores do parâmetro θ	21
Tabela A.1 – Funções de interpolação e derivadas de primeira ordem.....	77

Nomenclatura

Letras Latinas

A – área de um volume de controle

C – concentração

C_s – parâmetro de Smagorinsky

c_p – calor específico à pressão constante

D – coeficiente de difusão de massa

g_i – gravidade

Gr – número de Grashof

Gr_m – número de Grashof da massa

J_{ii} - massas submalhas

k – condutividade térmica [W/mK]

L – comprimento característico [m]

N_α – função de interpolação para o espaço

$N_{\alpha,}$ – função de interpolação para a pressão

p – pressão dimensional [N/m²]

$P = \frac{p - p_0}{\rho u_0^2}$ - pressão adimensional

Pr – número de Prandtl

Pr_t – número de Prandtl turbulento

q_{ij} – fluxos de calor submalha

Ra – número de Rayleigh

Re – número de Reynolds

Re_t – número de Reynolds turbulento

Sc – número de Schmidt

Sc_t – número de Schmidt turbulento

\bar{S}_{ij} – taxa de deformação

S_{u_i} – termo fonte na equação de quantidade de movimento na direção x_i

S_ϕ – termo fonte numa equação de transporte para a variável ϕ

t^* – coordenada do tempo dimensional [s]. Se adimensional: $t = t^* u_0 / L$

T – temperatura [K]

u_i – componente de velocidade em notação tensorial cartesiana na direção do eixo x_i [m/s]

$U_i = u_i / u_0$ – componente de velocidade adimensional em notação tensorial cartesiana na direção do eixo X_i

x_i – variável do sistema de coordenadas cartesianas em notação tensorial

$X_i = x_i / L$ – eixos do sistema de coordenadas cartesianas em notação tensorial

.....

Letras Gregas

α – índice que indica o número do nó local ou do subvolume de controle num elemento

β – coeficiente de expansão volumétrica térmica [K]⁻¹

β_m – coeficiente de expansão volumétrica térmica devido a variação de concentração

δ_{ij} – delta de Kronecker

Δ – espessura do filtro

$\theta = (T - T_0) / \Delta T$ – temperatura adimensional

μ – viscosidade dinâmica [kg/ms]

μ_e – viscosidade dinâmica efetiva [kg/ms]

μ_t – viscosidade dinâmica turbulenta [kg/ms]

ν – viscosidade cinemática [m²/s]

ν_e – viscosidade cinemática efetiva	[m ² /s]
ν_t – viscosidade cinemática turbulenta	[m ² /s]
ρ – massa específica	[kg/m ³]
τ_{ij} – tensões submalhas	
ϕ – variável qualquer na equação de transporte de um escalar	
Φ – escalar	
ψ – função de corrente	[s] ⁻¹
ω_j – componente do vetor rotação na direção do eixo x_j	
Γ – um coeficiente de difusão nas equações de transporte, Equação (2.4)	

.....

Superescritos

- n – significa grandeza avaliada no tempo t
- $n + 1$ – significa grandeza avaliada no tempo $t + \Delta t$
- k – iteração anterior no processo de solução num tempo t qualquer
- $k + 1$ – iteração k incrementada no processo de solução num tempo t qualquer
- * – usado para indicar variável dimensional

.....

Subscritos

- i – representa direção do eixo no sistema de coordenadas
- α – representa o subvolume de controle associado a um nó de elemento
- β – representa a função de interpolação associada ao nó de um elemento
- 0 – representa uma variável ou propriedade num estado de referência

.....

Abreviações

CFD – Dinâmica de Fluidos Computacional

CLA – Camada Limite Atmosférica

CLP – Camada Limite Planetária

CVFDM – Método de Diferenças Finitas baseado em Volumes de Controle

CVFEM – Método de Elementos Finitos baseado em Volumes de Controle

DNS – Simulação Numérica Direta

EPA – Agência de Proteção Ambiental

FDM – Método de Diferenças Finitas

FEM – Método de Elementos Finitos

FVM – Método de Volumes Finitos

LES – Simulação de Grandes Escalas

RANS – Equações Médias de Reynolds

WRM – Método de Resíduos Ponderados

.....

Siglas

CENAPAD – Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho

CNPq – Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento

DE – Departamento de Energia

DEM – Departamento de Engenharia Mecânica

DETF – Departamento de Engenharia Térmica e de Fluidos

FAPESP – Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo

FEB – Faculdade de Engenharia de Bauru

FEIS – Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

FEM – Faculdade de Engenharia Mecânica

UNESP – Universidade Estadual Paulista “Julio de Mesquita Filho”

UNICAMP – Universidade Estadual de Campinas

CAPÍTULO 1

Simulação Numérica de Dispersão de Poluentes pelo Método de Elementos Finitos Baseado em Volumes de Controle

1.1 – Introdução

Um dos grandes problemas que afetam as populações, principalmente nas grandes metrópoles, é a poluição do ar atmosférico por gases e resíduos químicos. Muitas vezes estes tóxicos, lançados por indústrias e pelo grande número de veículos de transporte, provoca sérios danos à saúde pública e ao meio ambiente. Apesar de todo controle por parte de entidades ambientais, o problema persiste. Muitos pesquisadores em todo o mundo têm investigado este tema, por se tratar de um problema de escala mundial. Várias técnicas experimentais e/ou numéricas têm sido utilizadas para prever o comportamento da dispersão de poluentes em áreas urbanas ou rurais. O problema é caracterizado principalmente por processos de difusão e convecção. Muitos autores analisam este problema usando o conceito de camada limite e métodos numéricos, tais como diferenças finitas, volumes finitos ou elementos finitos para solução das equações diferenciais parciais que representam matematicamente o problema.

Um dos métodos empregados para simulação numérica do processo de dispersão de poluentes na atmosfera é o Método de Elementos Finitos (FEM). Sua potencialidade no tratamento de domínios e equações complexas é adequada a problemas desta natureza. As construções em áreas urbanas e os veículos circulando pelas ruas são exemplos de objetos que aumentam a complexidade do domínio e do cálculo. Outras irregularidades no domínio podem se

manifestar se houver a presença de montanhas ou depressões do solo. O Método de Elementos Finitos é apresentado por vários autores, dentre eles pode-se citar: Connor & Brebbia (1976), Chung (1978), Taylor & Hughes, (1981), Baker (1983), Dhatt & Touzot, (1984), Reddy, (1993), Zienkiewicz & Morgan, (1993), Lewis et al. (1996), Zienkiewicz & Taylor (2000).

Dando prosseguimento a esta linha de trabalho pretende-se agora, simular numericamente a dispersão de poluentes usando o método de elementos finitos baseado em volumes de controle. A motivação deste estudo vem dos importantes impactos ao homem e ao meio ambiente pela poluição do ar e que necessitam de uma solução urgente. Alguns autores estudaram este problema e propuseram modelagens, tais como Enger (1986), Sun (1986), Galperin et al. (1988). Dois trabalhos interessantes são aqueles de Pai & Tsang (1991, 1992) para difusão turbulenta em camada limite convectiva bi e tridimensional.

Uma vez construído o código computacional para o presente caso, podem-se simular casos de dispersão de contaminantes levando-se em consideração parâmetros como a presença de fontes de poluição fixa ou móvel, construções, elevações ou depressões no terreno. A função a ser calculada é o campo de concentração da espécie de interesse.

1.2 – Dinâmica dos Fluidos Computacional

A área de simulação computacional de escoamentos de fluidos deu origem ao campo que se denomina, hoje, de Dinâmica dos Fluidos Computacional (em inglês *CFD-Computational Fluid Dynamics*), um ramo da mecânica computacional.

Simulações utilizando CFD têm sido cada vez mais utilizadas e aceitas em projetos, como uma forma de reduzir a quantidade de experimentos necessários no desenvolvimento de equipamentos e máquinas. Em alguns casos, devido à grande dificuldade, alto risco ou impossibilidade de realização de experimentos de forma segura, ela é a única ferramenta disponível para se prever o comportamento de dispositivos. Um exemplo típico deste tipo de situação com risco à saúde do homem é o escoamento no núcleo de um reator nuclear. Muitos projetos têm sido otimizados pelo uso de CFD. Shaw, (1992) apresenta um excelente texto sobre o uso de CFD e seus vários aspectos tais como modelagem, construção de malhas, solução de sistemas algébricos resultantes da aplicação das técnicas computacionais às equações diferenciais parciais que modelam os problemas de escoamentos e transferência de calor/massa.

De acordo com Löhner (2001), a simulação de escoamentos através de CFD consiste em resolver equações diferenciais parciais numericamente (meios contínuos), seguir a interação de um grande número de partículas (meios descontínuos) ou uma combinação de ambos.

Soluções de escoamento através de CFD envolvem uma variedade de disciplinas, com destaque para Engenharia, Física, Matemática, Ciências da Computação e Técnicas de Visualização. A física explica o fenômeno a ser simulado e provê possibilidades de aproximações e simplificações para as equações que descrevem os escoamentos de fluidos. A matemática tem três tipos diferentes de entradas para CFD: 1) análise clássica que discute a natureza, condições de contorno, princípios variacionais, tipos de operadores, etc. de equações diferenciais parciais; 2) análise numérica que descreve estabilidade, taxa de convergência, unicidade de soluções, boa colocação de esquemas numéricos e 3) matemática discreta que permite execução rápida de operações aritméticas. A ciência da computação engloba algoritmos, codificação, software e hardware. Técnicas de visualização consistem numa maneira de organizar e visualizar a grande quantidade de dados que são obtidos nas simulações. O produto final de qualquer esforço direcionado a CFD é um código que poderá ser usado para aplicações de engenharia. Códigos de sucesso tendem a ter uma comunidade de usuários. Isto introduz, por exemplo, fatores humanos tais como confiança e padronização, documentação e educação, motivação individual dos usuários finais, etc.

1.3 – Métodos Numéricos para Escoamentos de Fluidos e Transferência de Calor ou Massa

A dinâmica dos fluidos computacional utiliza-se o uso de métodos numéricos para calcular as grandezas de interesse nos escoamentos, em pontos do domínio físico, geralmente, denominados de pontos nodais ou, simplesmente, nós. Os principais métodos utilizados para simulação numérica de escoamentos de fluidos são: Método de Diferenças Finitas (FDM – *Finite Difference Method*); Método de Diferenças Finitas baseado em Volumes de Controle (CVFDM - *Control Volume Finite Difference Method*); Método de Volumes Finitos (FVM – *Finite Volume Method*); Método de Elementos Finitos (FEM – *Finite Element Method*) e Método de Elementos Finitos baseado em Volumes de Controle (CVFEM – *Control Volume-Finite Element Method*). Na realidade, todos estes métodos numéricos derivam de um único, conhecido como Método de Resíduos Ponderados (WRM – *Method of Weighted Residuals*), e diferencia-se matematicamente

pela função de ponderação ou, simplesmente, função peso aplicada na anulação do resíduo. Alguns comentários sobre os principais métodos utilizados para cálculos de escoamentos de fluidos são feitos a seguir.

O método de diferenças finitas tem sido usado para o cálculo de escoamentos de fluidos e transferência de calor; fato observado devido o grande número de trabalhos publicados. Existem muitos códigos computacionais baseados no mesmo. Vários autores afirmam que uma limitação deste método está na discretização de domínios com complexidade geométrica, problema este que pode ser parcialmente solucionado através de malhas não ortogonais.

Um método apresentado por Patankar (1980), denominado na literatura de método de volumes finitos, também conhecido, por muitos autores, de método de diferenças finitas baseado em volumes de controle, constitui hoje em um dos principais métodos para análise numérica de escoamentos e transferência de calor. A característica principal deste método é a fácil interpretação física dos termos das equações de balanço, tornando necessária a conservação de fluxos, fontes e forças. O método de volumes de controle com malhas ortogonais e não ortogonais em coordenadas generalizadas, para o tratamento de geometrias irregulares, tem sido implementado por vários grupos de pesquisa e aplicado na solução de problemas de escoamentos e transferência de calor (Campos Silva, 1998).

O método de elementos finitos, inicialmente desenvolvido para análise de estruturas, começou a ser aplicado para o caso de escoamentos, devido à sua grande versatilidade na discretização de domínios geometricamente complexos. O método tornou-se amplamente aceito a partir dos anos 60, quando foram iniciadas pesquisas em várias partes do mundo. Desde 1967, após a inserção do método, pode-se encontrar uma vasta literatura devotada à teoria e aplicação (Dath & Touzot, 1984). Algumas referências básicas que tratam da aplicação do método de elementos finitos (FEM) em escoamentos de fluidos são: Connor & Brebbia (1976), Chung (1978), Baker (1983), Saabas (1991) e Whiting (1999).

O método de elementos finitos clássico é conhecido como método de elementos finitos de Galerkin. Outra variante do método de elementos finitos é conhecida como método de elementos finitos de mínimos quadrados. Neste trabalho, é abordada uma terceira vertente do método de elementos finitos conhecida como método de elementos finitos baseado em volumes de controle (CVFEM) ou também conhecido como método de subdomínios. Este método foi primeiramente apresentado por Baliga & Patankar (1980, 1983), Baliga, Pham & Patankar (1983), usando

elementos triangulares para discretização do domínio. Posteriormente, Schneider & Raw (1986, 1987) apresentaram este método para elementos finitos quadrilaterais lineares (elementos com quatro nós). Raw, Schneider & Hassani (1985) utilizaram um elemento finito quadrilateral quadrático (elemento com nove nós) para problemas de condução de calor. Também tem sido utilizado um elemento finito com oito nós (equivalente a eliminar o nó central do elemento anterior), conhecido como elemento de “serendipity”, no método de elementos finitos de Galerkin para resolução de problemas de escoamentos.

Segundo Saabas (1991), CVFEM oferece uma combinação da flexibilidade geométrica do FEM e a fácil interpretação física associada com o método de volumes finitos. A formulação de CVFEM envolve cinco passos básicos, Saabas (1991): 1. discretização do domínio em elementos e discretização em volumes de controle associados com os nós dos elementos; 2. prescrição de funções de interpolação baseadas nos elementos para as variáveis dependentes; 3. derivação de equações discretizadas, que são aproximações algébricas das equações diferenciais governantes; 4. montagem elemento por elemento das equações discretizadas; 5. prescrição de um processo para resolver o sistema de equações discretizadas resultantes.

Campos-Silva (1998) desenvolveu em seu trabalho de doutorado um código computacional utilizando o método de elementos finitos de subdomínio, conhecido na literatura também como método de elementos finitos baseado em volumes de controle, para simulação numérica de escoamentos transientes, viscosos e incompressíveis, a partir da solução das equações de Navier-Stokes, em domínios bidimensionais. Lima (2005) acrescentou a este código a metodologia de simulação de grandes escalas de turbulência em escoamentos bidimensionais. Para discretizar o domínio, o elemento quadrilátero com nove pontos nodais foi utilizado.

1.4 – Simulação de Escoamentos Turbulentos

A mecânica dos fluidos preocupou-se em estudar seus fenômenos experimentalmente muito antes do que matematicamente (Fortuna, 2002). Até mesmo porque a descrição matemática dos movimentos de fluidos só foi possível a partir do século XIX com as equações de Navier-Stokes. Apesar da única restrição para a aplicação de tais equações serem para meios contínuos, sua solução analítica torna-se extremamente complexa quando sujeita a regiões arbitrárias com condições de contorno gerais, pois se tratam de equações diferenciais parciais (EDPs) não lineares cuja a solução ainda não está bem estabelecida. Desta forma, soluções analíticas das

equações de Navier-Stokes só são possíveis para alguns poucos casos bastante simplificados e idealizados.

A turbulência é um fenômeno que ocorre freqüentemente na natureza, e há muitos séculos tem sido objeto de estudos de vários pesquisadores, (Matos et. al. 1999). Segundo Piomelli (1999) e Freire (2002) em 1510, Leonardo da Vinci fez vários desenhos de escoamentos turbulentos, nos quais as instabilidades eram muito bem representadas. Um desenvolvimento histórico mais detalhado sobre a turbulência pode ser encontrado em Freire (2002).

Um grande impulso no estudo desse tipo de problema foi verificado nas últimas décadas devido avanços em métodos experimentais, em sistemas de aquisição eletrônica de dados, e os avanços em métodos numéricos e recursos computacionais.

Na modelagem da turbulência três metodologias são mais usuais: a simulação numérica direta (DNS – *Direct Numerical Simulation*), as equações médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) e simulação de grandes escalas (LES – *Large Eddy Simulation*). Para realizar DNS é necessário uma malha suficientemente refinada que permita resolver todas as escalas de turbulência. Isso acarreta um custo computacional alto e implica no seu uso apenas para baixos números de Reynolds.

Um largo espectro de energia é uma das mais importantes características de escoamentos turbulentos. A consequência imediata está associada à grande dificuldade de simular todas as escalas que o caracterizam, ou seja, o uso da Simulação Numérica Direta (DNS) é possível, somente para alguns poucos casos com baixos números de Reynolds e a grande maioria dos escoamentos é caracterizada por altos números de Reynolds.

RANS tem custo computacional mais baixo que DNS, porém somente estruturas maiores são resolvidas e as condições de contorno não são tão simples de serem impostas. A vantagem de LES sobre DNS é que, devido ao processo de separação das escalas e ao processo de modelagem dos tensores submalhas adicionais que aparecem, é possível resolver escoamentos a altos Reynolds. Segundo Bogey et. al. (2003), entre os três métodos diferentes, LES aparece como o mais interessante para aproximar uma ampla classe de escoamentos, uma vez que não é restrito a baixos números de Reynolds como DNS, e ao contrário de RANS, uma parte importante das pequenas escalas pode ser calculada precisamente, se consideradas corretamente pela resolução da malha.

Um trabalho que trata da simulação de grandes escalas em camada limite atmosférica foi realizado por Ding et al. (2001a, b), no qual foram apresentados, maneiras de usar simulação de grandes escalas de turbulência. As características da turbulência segundo Boçon (1998), Silveira-Neto (2002, 2003) e Tejada-Martínez (2002) são:

- 1) Os escoamentos turbulentos são tridimensionais, são rotacionais, irregulares e randômicos, no sentido de que a velocidade varia randomicamente com o tempo;
- 2) Ocorrem a altos números de Reynolds. O número de Reynolds representa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas do escoamento;
- 3) São fortemente dissipativos, ou seja, há continuamente conversão de energia cinética em energia interna. Assim, a turbulência decai se não houver energia sendo fornecida continuamente;
- 4) São caracterizados pelo amplo espectro de escalas de movimento diferentemente dos escoamentos laminares, os quais têm poucas escalas. Tais escoamentos apresentam uma série de estruturas turbilhonares que podem variar desde o tamanho do domínio até muitas ordens de magnitude menores. Esses vórtices distribuem-se segundo um espectro de frequências. Vórtices maiores têm frequência menor e os menores têm frequências maiores;
- 5) São fortemente difusivos. As flutuações de velocidade na turbulência resultam em taxas de transferência de quantidade de movimento, calor e massa (ou qualquer outra propriedade escalar) que podem ter muitas ordens de magnitude maiores do que aquelas devido ao transporte molecular (ou difusão molecular). De fato, quando porções de fluido deslocam-se em vórtices, levam consigo suas propriedades transportando-as para outra região do escoamento. Neste sentido, o transporte de propriedades pelos vórtices turbulentos é análogo ao transporte difusivo molecular, mas em escala muito maior;
- 6) A turbulência é característica de escoamentos e não de fluidos. Se o número de Reynolds é suficientemente alto, a maioria das dinâmicas associadas à menor escala na turbulência é a mesma para todos os fluidos. Em resumo, as características principais de escoamentos turbulentos não são controladas pelas propriedades da partícula do fluido.

1.5 – Dispersão de Poluentes em Cânions Urbanos

A ciência moderna de modelos de poluição de ar iniciou-se nos anos 20, quando cientistas militares, na Inglaterra tentaram estimar sob várias condições, a dispersão de agentes químicos tóxicos lançados nos campos de batalha.

Segundo Boçon (1998), os primeiros estudos da dispersão de substâncias na atmosfera datam das primeiras décadas do século passado, com os trabalhos de Richardson (1925, 1926), Taylor (1921, 1960), Rossby (1932), Bosanquet & Pearson (1936), Hewson (1945) e Baron *et al.* (1949). Ainda, segundo Boçon (1998), Sutton (1932) publicou um trabalho apresentando uma teoria para a difusão turbulenta na atmosfera. Também Sutton (1947a, 1947b, 1950) estudou o problema da difusão na baixa atmosfera, a partir de fontes contínuas pontuais (chaminés) e de linha, considerando também gases quentes, em que era assumida uma distribuição gaussiana da concentração a partir da linha de centro da pluma. Segundo Pasquill (1962), citado por Boçon (1998), Frenkiel (1952) parece ter sido o primeiro a apresentar a equação para as concentrações $c = c(x, y, z, t)$, para uma fonte pontual instantânea ("puff"), também assumindo distribuição gaussiana nas direções transversais à do vento.

Embora o foco deste capítulo seja em dispersão de poluentes em cânions urbanos (*Urban Street Canyons*), não se pode deixar de enfatizar a importância dos modelos do tipo pluma gaussiana, este é um dos modelos regulamentados pela Agência de Proteção Ambiental (EPA - *Environmental Protection Agency*) dos Estados Unidos. Os Modelos Lagrangianos de Partículas (MLP) têm se tornado outra importante ferramenta na descrição dos processos de dispersão de poluentes na camada limite planetária (CLP), (Pereira *et al.*, 2001). Os autores simularam a dispersão de poluentes utilizando as equações lineares de Langevin¹ Gaussiana acoplada ao modelo tridimensional de mesoescala, para descrever a trajetória de partículas em uma área de 10.000 km² distribuída sobre uma região de terreno complexo.

Braga *et al.* (2004) utilizaram o mesmo modelo para estudar a dispersão de poluentes na região de Candiota, situada no sudeste do estado do Rio Grande do Sul. Segundo o autor, nesta região encontra-se a maior reserva carbonífera brasileira e o maior complexo termoeletrico do Rio Grande do Sul.

Bei & Shao (s/d), verificaram o comportamento da dispersão de poluentes em cânions de ruas próximas ao banco China Tower, na ilha de Hong Kong. Os autores mostraram que as características da circulação em cânions urbanos não se dão apenas por condições atmosféricas, mas também por parâmetros escalares determinados pela geometria da estrutura urbana. O pacote de dinâmica de fluidos computacional CFX-5, foi empregado, pois segundo os autores, este programa é capaz de usar malhas não estruturadas e uma variedade de esquemas de fechamento

¹ $u_i(t) = u_i(0)e^{-t/d_i} + r_g(t)$ sendo $r_g(t)$ a gaussiana em todas as direções.

de turbulência. Vachon *et al.* (1999) estudaram, no primeiro estágio francês do projeto internacional URBCAP, os impactos da poluição urbana na saúde da população da cidade de Nantes.

A dispersão de poluentes foi também simulada em túneis de vento. Podemos destacar aqui, entre outros, dois trabalhos, Gerdes & Olivari (2000) que investigaram em túnel de vento, a contaminação de poluente em cânion urbano. A simulação foi feita com duas paredes paralelas e perpendiculares ao vento. Já, no trabalho de Kovar-Panskus *et al.* (2002) analisou-se a influência da geometria no escoamento dentro de um cânion urbano, comparando simulações numéricas com medidas experimentais. Wong *et al.* (2002) utilizaram em seu trabalho, o método de diferenças finitas (FDM) para construir um modelo de dispersão de poluente com o objetivo de simular diferentes geometrias, tais como cânions urbanos com altura e comprimento diferentes. Os autores concluíram que a maior retenção de poluentes se dá em ruas estreitas, de aspecto maior do que um, e que cânions com diferentes alturas retêm mais poluentes do que aqueles com alturas iguais.

Sorbjan & Uliasz (1998) estudaram na camada limite atmosférica (CLA) noturna, os efeitos de nuvens *stratocumuli* na dispersão de contaminantes. O estudo foi baseado no modelo de LES, com a parametrização do tamanho das nuvens. As simulações incluíram cálculos lagrangianos de dispersão atmosférica de um traçador passivo lançado de pontos fonte, em várias alturas sobre o solo. Foram obtidos resultados mostrando que a difusão vertical não é gaussiana e depende da localização da fonte na camada limite. El Hamdani *et al.* (2002) simularam a dispersão de poluentes procedentes de uma chaminé, com escoamento de vento em convecção laminar forçada, dentro de um canal. O método de volumes finitos foi adotado pelos autores.

1.6 – Objetivos

Os objetivos do presente trabalho consistem em primeiramente, obter a simulação de escoamentos bidimensionais com dispersão de poluente em domínios que representam cânions urbanos e após, pretendem-se desenvolver um código tridimensional, baseado no método de elementos finitos por volumes de controle, para o cômputo de fenômenos convectivo–difusivos e aplicá-lo na solução da equação de transporte, que representa, matematicamente a dispersão de contaminantes no meio ambiente.

CAPÍTULO 2

Formulação Matemática

Este capítulo apresenta o desenvolvimento matemático das equações envolvidas no presente trabalho. É realizado aqui, a definição das equações que caracterizam o problema investigado, bem como as hipóteses assumidas, o tratamento empregado no que se refere à turbulência e por fim, a adimensionalização das variáveis.

Escoamentos de fluidos são formulados matematicamente pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento e conservação da energia. O embasamento matemático dessas equações está disponível na literatura especializada.

Algumas hipóteses são assumidas durante o processo de obtenção de tais equações, são elas:

1) O efeito da variação da densidade é considerado apenas nas forças gravitacionais (hipótese de Boussinesq), sendo a densidade expressa por

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0) - \beta_m(C - C_0)] \quad (2.1)$$

na qual, ρ_0 é a densidade de referência em T_0 e C_0 , β é o coeficiente de expansão térmica, T_0 é uma temperatura de referência, β_m é o coeficiente de expansão volumétrica devido a variação de concentração e C_0 é uma concentração de referência;

2) O fluido é considerado como newtoniano e o escoamento é incompressível;

3) O termo de geração de energia também será desprezado, pois não são considerados efeitos de geração interna de calor (absorção ou emissão de radiação, por exemplo) nem a presença de umidade, a qual poderia ser responsável por troca de calor latente;

4) Poderá ocorrer rotação constante do sistema de referência (efeitos de forças centrífugas e de Coriolis);

Tomando posse de tais hipóteses, as equações governantes podem ser escritas numa forma genérica em notação tensorial cartesiana como:

Equação de conservação da massa

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

Equação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu (\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})] + S_{u_i} \quad (2.3)$$

Equação de transporte de escalar

$$\frac{\partial(\rho \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j}) + S_\phi \quad (2.4)$$

Nas Equações (2.2) a (2.4), u_i representa os componentes de velocidade ao longo dos eixos coordenados x_i , p representa a pressão; ρ a massa específica; μ a viscosidade dinâmica e Γ_ϕ é um coeficiente de difusão que depende de qual variável ϕ está sendo transportada; S_{u_i} e S_ϕ são termos fontes que podem englobar outros termos, inclusive diferenciais, que não estão escritos explicitamente.

O termo fonte S_{u_i} , presente na equação (2.3) pode englobar efeitos de convecção natural, bem como, de rotação do sistema de coordenadas, sendo dado por

$$S_{u_i} = -\rho [g_i (1 - \beta(T - T_0)) - \beta_m (C - C_0)] + (2 \varepsilon_{ijl} \omega_j u_l + (\omega_j x_j) \omega_i - (\omega_j \omega_j) x_i) \quad (2.5)$$

no qual, g_i é o componente da aceleração da gravidade na direção do eixo x_i e ω_j é o componente da velocidade angular de rotação do escoamento, se for o caso, em torno do eixo x_j .

Fisicamente, os termos da equação (2.5) são definidos como segue:

1º) $[g_i(1 - \beta(T - T_0))]$: empuxo devido variação de densidade, pela mudança de temperatura;

2º) $[g_i \beta_c (C - C_0)]$: aparece devido à variação de concentração de uma espécie;

3º) $[2 \varepsilon_{ijl} \omega_j u_l]$: aceleração de Coriolis decorrente do movimento da partícula dentro do sistema de coordenadas cartesianas;

4º) $[(\omega_j x_j) \omega_i - (\omega_j \omega_j) x_i]$: aceleração centrípeta decorrente da rotação do sistema de coordenadas cartesianas.

Algumas das definições anteriores podem também, ser encontradas em Fox & MacDonald (1995). A variável ϕ , presente na equação (2.4) pode representar qualquer variável escalar, como exemplo, a temperatura T, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação viscosa ou específica da energia cinética turbulenta ou ainda, a concentração de um contaminante num dado meio.

2.1 – Turbulência: Simulação de Grandes Escalas

Simulação de Grandes Escalas tornou-se uma das mais importantes metodologias para a solução de escoamentos complexos e vem sendo bastante empregada em problemas de interesse prático. O trabalho apresentado por Deardorff (1970), é um dos precursores em aplicações de LES na engenharia, o qual analisou escoamento turbulento no interior de canal com altos números de Reynolds. No processo de simulação de grandes escalas, as variáveis do escoamento passam por um processo de filtragem, que separa as maiores escalas das menores. Os termos filtrados são resolvidos diretamente usando as equações de movimento, enquanto que um modelo submalha é empregado para representar as menores estruturas.

Uma explicação sobre processos de filtragem pode ser obtido em Frigo (2004), Silveira-Neto (2003) e Tejada-Martínez (2002). Em prática, o que mais se utiliza é um tipo de média volumétrica local como processo de filtragem, com um comprimento característico da escala, dado pelo tamanho da malha, (Shyy et. al., 1997).

Aplicando o processo de filtragem nas equações (2.2), (2.3) e (2.4) obtém-se:

Equações do escoamento

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j \bar{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \tau_{ij} \right] + \bar{S}_{u_i} \quad (2.7)$$

Equações de transporte de calor e massa

$$\frac{\partial(\rho c_p \bar{T})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c_p \bar{u}_i \bar{T})}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} - q_{ii} \right) = \bar{q}''' \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{c})}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} - J_{ii} \right) = \bar{S}_c \quad (2.9)$$

Os termos τ_{ij} , q_{ij} e J_{ii} , que aparecem nas equações (2.6) a (2.9), em função do processo de filtragem, são os termos das tensões submalhas, dos fluxos de calor e de massa submalhas, respectivamente.

2.2 – Modelagem Submalha da Turbulência, Modelo de Smagorinsky

O modelo de viscosidade turbulenta de Smagorinsky teve um grande avanço depois do trabalho pioneiro de Deardorff (1970) para escoamentos em canais. A constante no modelo de Smagorinsky é ajustada e depende de alguns parâmetros como, por exemplo, a discretização da malha.

Alguns passos da modelagem submalha da turbulência, segundo o modelo de Smagorinsky são descritos na seqüência. As tensões submalhas que aparecem na equação (2.7), devido o processo de filtragem, são dadas por

$$\tau_{ij} = \rho (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j). \quad (2.10)$$

A equação (2.10) pode ser reescrita novamente utilizando a hipótese de Boussinesq de viscosidade turbulenta,

$$\tau_{ij} = \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} - 2 \mu_t \bar{S}_{ij} \quad (2.11)$$

sendo μ_t a viscosidade dinâmica turbulenta, k a energia cinética turbulenta e \bar{S}_{ij} a taxa de deformação.

A viscosidade dinâmica turbulenta, segundo o modelo de Smagorinsky, a energia cinética turbulenta e a taxa de deformação são definidas, respectivamente por

$$\mu_t = \rho (Cs \Delta)^2 \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (2.12)$$

$$k = \frac{\tau_{ii}}{2} \quad (2.13)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.14)$$

sendo Cs , o parâmetro de Smagorinsky e Δ a espessura do filtro.

Os fluxos de calor e massa devido a efeitos submalhas são dados, respectivamente, por

$$q_{ti} = \rho c_p (\overline{u_i T} - \bar{u}_i \bar{T}) = -k_t \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} = -\frac{\nu_t}{Pr_t} \rho c_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \quad (2.15)$$

$$J_{ti} = (\overline{u_i c} - \bar{u}_i \bar{c}) = -D_t \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \quad (2.16)$$

Nas equações (2.15) e (2.16), os termos c_p , k_t e D , representam, respectivamente, o calor específico à pressão constante, a condutividade térmica e a difusividade de uma espécie, no caso de transferência de massa. Por conveniência, o asterisco contido nas equações que seguem indica variáveis dimensionais. Assim, as equações (2.6) – (2.9) depois de modeladas são apresentadas a seguir:

Equações do escoamento:

$$\frac{\partial(\rho^* \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho^* \bar{u}_i)}{\partial t^*} + \frac{\partial(\rho^* \bar{u}_j \bar{u}_i)}{\partial x_j} = & -\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\mu^* + \mu_t^*) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right)] + \\ & + \rho^* g_i^* [\beta^* (\bar{T} - T_0) + \beta_m^* (\bar{C} - C_0)] + \bar{S}_{u_i} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Equações de transporte de calor e massa:

$$\frac{\partial(\rho^* c_p^* \bar{T})}{\partial t^*} + \frac{\partial(\rho^* c_p^* \bar{u}_i \bar{T})}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(k^* + \rho^* c_p^* \frac{v_t^*}{Pr_t}) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right] = \bar{q}''' \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t^*} + \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{c})}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(D^* + \frac{v_t^*}{Sc_t}) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right] = \bar{S}_c \quad (2.20)$$

2.3 – Adimensionalização das Variáveis nas Equações

Fixar propriedades físicas que satisfaçam os mais diversos fluidos é uma dificuldade presente na implementação numérica das equações que governam o escoamento.

Ao optar por soluções das equações em variáveis adimensionais, os parâmetros de adimensionalização devem ser definidos de acordo com as características geométricas, cinemáticas e dinâmicas de cada caso considerado. No caso de escoamento envolvendo convecção forçada ou mista, as grandezas adimensionais podem ser definidas da seguinte forma:

$$X_i = \frac{x_i}{L}; U_i = \frac{\bar{u}_i}{u_0}; \bar{P} = \frac{(\bar{p}^* - p_0)}{\rho_0 u_0^2}; t = \frac{t^* u_0}{L}; \bar{\theta} = \frac{(\bar{T} - T_0)}{\Delta T}; \Phi = \frac{\bar{\phi} - \phi_0}{\Delta \phi}; \rho = \frac{\rho^*}{\rho_0}; \mu = \frac{\mu^*}{\mu_0}; \\ \nu = \frac{\nu^*}{\nu_0}; \beta = \frac{\beta^*}{\beta_0}; \beta_m = \frac{\beta_m^*}{\beta_{m_0}}; \Gamma_\phi = \frac{\Gamma_\phi^*}{\Gamma_0}; g_i = \frac{g_i^*}{g}; \Omega_j = \frac{L \omega_j}{u_0}; c_p = \frac{c_p^*}{c_{p_0}}; D = \frac{D^*}{D_0}. \quad (2.21)$$

na qual, L é um comprimento característico do domínio e u_0 é uma velocidade característica do escoamento. Cada grandeza apresentada na equação (2.21) refere-se, respectivamente, aos adimensionais do espaço, da velocidade, da pressão, do tempo, da temperatura, de um escalar qualquer, da densidade, da viscosidade absoluta, da viscosidade cinemática, do coeficiente de expansão volumétrica térmica, do coeficiente de expansão volumétrica devido à concentração, do coeficiente de difusão, da gravidade, da rotação, do calor específico e da difusividade da massa.

Usando as grandezas adimensionais, as equações (2.17) à (2.20) podem ser reescritas como a seguir:

Equações do escoamento:

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial X_i} = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j U_i)}{\partial X_j} = -\frac{\partial P}{\partial X_i} + \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\frac{\mu_e}{Re} \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial \mu_e}{\partial X_j} \frac{\partial U_j}{\partial X_i} + S_{u_i} \quad (2.23)$$

Equações de transporte de calor e de massa:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j \Phi)}{\partial X_j} = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\frac{\Gamma_\phi}{Re} \frac{\partial \Phi}{\partial X_j} \right) + S_\phi \quad (2.24)$$

O termo fonte da equação (2.23) por pode ser reescrito na forma adimensional como

$$S_{u_i} = \rho \left[\frac{Gr}{(Re)^2} g_i \beta \theta - 2 \varepsilon_{ikl} \Omega_k U_l - (\Omega_j X_j) \Omega_i + (\Omega_j \Omega_j) X_i + \frac{Gr_m}{(Re)^2} g_i \beta_c C \right] \quad (2.25)$$

As equações (2.22) – (2.24), embora estejam escritas em variáveis adimensionais, podem ser utilizadas para cálculo dos escoamentos nas variáveis com dimensionais, basta tomar Re, Gr e Gr_m unitários. Para cálculo de escoamentos usando variáveis adimensionais as propriedades físicas são tomadas unitárias.

Na equação (2.23), a viscosidade efetiva será considerada da seguinte forma:

$$\mu_e = \begin{cases} \mu & \text{para escoamentos laminares} \\ \mu + \mu_t & \text{para escoamentos turbulentos} \end{cases} \quad (2.26)$$

Algumas variáveis representadas nas equações (2.24) são mostradas na Tabela 2.1. Os parâmetros adimensionais, número de Reynolds, Re; número de Prandtl, Pr; número de Grashof, Gr; número de Schimdt, Sc, são definidos em função das propriedades de referência como se segue

$$Re = \frac{\rho_0 u_0 L}{\mu_0}; \quad Pr = \frac{\mu_0 c_{p_0}}{k_0}; \quad Gr = \frac{\rho_0^2 g \beta_0 \Delta T L^3}{\mu_0^2}; \quad Sc = \frac{\mu_0}{\rho_0 D_0} \quad Gr_m = \frac{g \beta_c \Delta \rho L^3}{\nu_0^2} \quad (2.27)$$

Tabela 2.1 – Variáveis, propriedades e termos da equação (2.24)

Nome	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Calor	$\frac{\bar{T} - T_0}{\Delta T}$	$\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t}$	Geração de calor
Massa	C	$\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t}$	Reações químicas

CAPÍTULO 3

Desenvolvimento do Modelo Numérico

Os passos necessários para o desenvolvimento do modelo numérico, tais como a discretização das equações genéricas, mostradas no capítulo anterior, as funções de interpolação definidas no elemento, o cálculo da matriz dos elementos e a solução do sistema de equações discretizadas são apresentados neste capítulo.

O objetivo de um método numérico é obter uma solução pertinente para as variáveis dependentes, tais como, velocidade, pressão e temperatura, em pontos discretos dentro de um domínio físico com acurácia. A relação entre estes pontos nodais é determinada pela discretização algébrica das equações, que são obtidas das equações diferenciais em conjunto com as funções de interpolação apropriadas para as variáveis dependentes. As equações discretizadas são então resolvidas por algum método de solução de sistema que, neste caso, é o método frontal, descrito em Taylor & Hughes (1981). O que diferencia um método numérico de outro, é a maneira que as discretizações das equações são obtidas.

Saabas (1991) e Campos Silva (1998) fizeram uma discussão detalhada de métodos numéricos disponíveis para solução de problemas de escoamentos de fluidos e transferência de calor.

Os métodos de elementos finitos, no caso de escoamentos tridimensionais, usualmente, requerem: (1) discretização do domínio de cálculo em elementos hexaedros ou tetraedros; (2) prescrição de funções de interpolação baseadas no elemento; (3) derivação de equações discretizadas usando uma forma apropriada de método de resíduos ponderados; (4) obtenção,

considerando cada elemento, dos coeficientes das equações discretizadas; e (5) a solução das equações discretizadas resultantes.

O método de elementos finitos convencional para escoamentos de fluidos e transferência de calor emprega o método de resíduos ponderados de Galerkin para derivar as equações discretizadas, onde a função peso é a mesma função de interpolação.

Neste trabalho, é desenvolvido um método de elementos finitos por volume de controle (CVFEM), com base no elemento hexaedro. Aqui, para cada nó na malha de elementos finitos, existe um volume de controle englobando aquele nó, dentro do qual é atribuído o valor unitário para a função peso. Fora do volume de controle a função peso é nula. Consequentemente, os métodos de elementos finitos baseado em volumes de controle (CVFEMs) envolvem a imposição de leis físicas de conservação integral, tais como conservação da massa, quantidade de movimento e conservação de energia, sobre volumes de controle finitos dentro do domínio de cálculo. Assim, os CVFEMs satisfazem princípios de conservação global.

A aplicação do método de elementos finitos com formulação por volumes de controle, conforme descrito por Saabas (1991) é feita nos seguintes passos básicos: (1) discretização do domínio em elementos finitos; (2) posterior discretização do domínio em volumes de controle com cada volume de controle englobando um nó; (3) integração das equações nos volumes de controle; (4) escolha de funções de interpolação para as variáveis dentro das integrais e derivação de um sistema algébrico de equações e por fim, (5) escolha de um método para solução do sistema algébrico resultante.

3.1 – Discretização dos Domínios para Problemas Tridimensionais

A discretização das equações, como já mencionado no texto, é o primeiro passo na aplicação do método numérico. Para isso, é necessário definir um elemento finito, que neste trabalho, adotamos o hexaedro com vinte e sete pontos nodais, por ser um elemento finito quadrático completo. A Figura 3.1 ilustra tal elemento. Caso sejam considerados somente os pontos nodais de canto, têm-se um elemento finito linear nas três direções. Agora, se for desprezado os nós do centro das faces e o nó central do elemento, tem-se um elemento finito quadrático incompleto, que não é adequado, pois resulta em uma divisão irregular dos volumes de controle. No caso bidimensional, o elemento adotado foi o quadrilátero com nove nós.

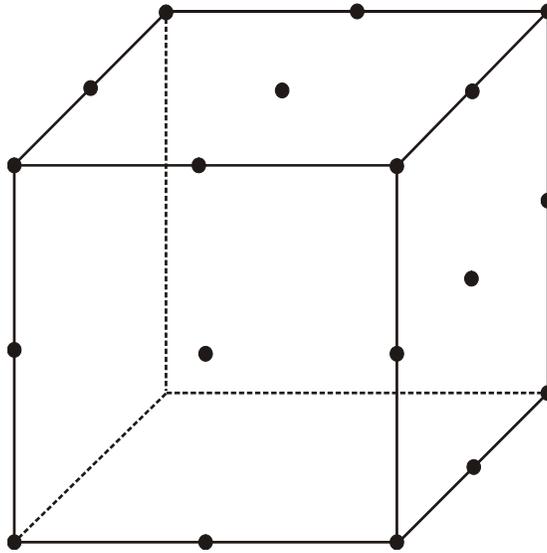


Figura 3.1 – Hexaedro com vinte e sete pontos nodais

3.2 – Integração das Equações nos Subvolumes de Controle

Nesta seção, é feita a discretização das equações. A integração das equações diferenciais parciais governantes pelo CVFEM deve ser feita nos subvolumes de controle dentro de cada elemento.

Primeiramente, é feita a discretização no tempo. Para isso, vários esquemas podem ser utilizados, desde um esquema explícito até um esquema totalmente implícito. O esquema totalmente explícito possui limitações quanto ao passo de tempo, por razões de estabilidade da solução e o esquema totalmente implícito, pode ter o passo de tempo fixado, de acordo com a precisão desejada para a solução. Em geral, neste esquema, não há limitações quanto ao passo de tempo, sendo o mesmo incondicionalmente estável.

Posteriormente, é feita a discretização no espaço a partir da substituição das funções de interpolação nas equações integrais de conservação.

3.2.1 – Discretização no Tempo

A discretização no tempo é definida por um parâmetro θ , o qual desempenhará o papel de indicador do esquema, ou seja, através deste parâmetro será indicado se o esquema é explícito ou implícito.

Sejam U_i^n , P^n e Φ^n , os campos de velocidade, pressão e uma grandeza escalar qualquer (temperatura, concentração, grandezas turbulentas) definidas no tempo t^n , sendo $t^{n+1} = t^n + \Delta t$. A partir de U_i^n e Φ^n e condições de contorno especificadas, os campos U_i^{n+1} , P^{n+1} e Φ^{n+1} são calculados a seguir:

$$\frac{(\rho U_i)^{n+1}}{\Delta t} + \theta \left[\frac{\partial}{\partial X_j} ((\rho U_j U_i)^{n+1} - \frac{\mu_e^{n+1}}{Re} \frac{\partial(\rho U_i)^{n+1}}{\partial X_j}) + \frac{\partial P^{n+1}}{\partial X_i} \right] = \theta (S_{u_i}^*)^{n+1} + R_{u_i}^n \quad (3.1a)$$

na qual

$$R_{u_i}^n = \frac{(\rho U_i)^n}{\Delta t} - (1 - \theta) \left\{ \frac{\partial(\rho U_j U_i)^n}{\partial X_j} - \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\frac{\mu_e^n}{Re} \frac{\partial(\rho U_i)^n}{\partial X_j} \right) + \frac{\partial P^n}{\partial X_i} - (S_{u_i}^*)^n \right\} \quad (3.1b)$$

com a restrição da conservação da massa dada por

$$\frac{\partial(\rho U_i)^{n+1}}{\partial X_i} = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{(\rho \Phi)^{n+1}}{\Delta t} + \theta \left(\frac{\partial}{\partial X_j} \left((\rho U_j \Phi)^{n+1} - \frac{(\Gamma_\Phi)^{n+1}}{Re} \frac{\partial(\Phi)^{n+1}}{\partial X_j} \right) \right) = \theta (S_\Phi)^{n+1} + R_\Phi^n \quad (3.3a)$$

em que

$$R_\Phi^n = \frac{(\rho \Phi)^n}{\Delta t} - (1 - \theta) \left\{ \frac{\partial(\rho U_j \Phi)^n}{\partial X_j} - \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\frac{(\Gamma_\Phi)^n}{Re} \frac{\partial(\Phi)^n}{\partial X_j} \right) - (S_\Phi)^n \right\} \quad (3.3b)$$

Na Equação (3.1a), o termo fonte com um asterisco, $S_{u_i}^*$, engloba a soma dos dois últimos termos da equação de quantidade de movimento, apresentado na equação 2.23. Alguns valores, geralmente adotados para θ são fornecidos por Reddy (1993) e definidos na Tabela 3.1.

Nas equações (3.1a) e (3.3a), o passo de tempo para o esquema explícito pode ser fixado de acordo com a natureza da equação (parabólica, elíptica ou hiperbólica). Hirsch (1988) apresenta várias maneiras de se analisar a estabilidade de soluções e de como fixar o passo de tempo para satisfazer esses critérios de estabilidade.

Tabela 3.1 – Valores do parâmetro θ

Esquemas		Ordem de precisão	
θ	0	Explícitos, condicionalmente estável	$O(\Delta t)$
	1/2	Crank – Nicolson, estável	$O((\Delta t)^2)$
	2/3	Galerkin, estável	$O((\Delta t)^2)$
	1	Totalmente implícito, estável	$O(\Delta t)$

3.2.2 – Discretização Espacial das Equações – Aplicação de um Método de Elemento Finito por Volumes de Controle

A discretização espacial das equações, no método de elementos finitos de Galerkin, é feita a partir da formulação fraca das mesmas. Esta forma fraca das equações é obtida fazendo o produto escalar dos termos das equações por funções peso seguido da integração por partes sobre o domínio, com o objetivo de diminuir o grau do operador de segunda ordem.

No caso de métodos de elementos finitos por volumes de controle, a função peso é tomada como sendo constante e unitária no interior de cada volume de controle. Assim, após a integração por partes das equações (3.1) a (3.3) obtém-se

$$\begin{aligned}
 & \int_V \left(\frac{(\rho U_i)^{n+1}}{\Delta t} \right) dV + \oint_A \theta \left[(\rho U_j U_i)^{n+1} - \left(\frac{(\mu_e)^{n+1}}{Re} \frac{\partial (\rho U_i)^{n+1}}{\partial X_j} \right) \right] n_j dA + \int_V \left[\theta \left(\frac{\partial P^{n+1}}{\partial X_i} \right) \right] dV = \\
 & = \theta \int_V (S_{u_i}^*)^{n+1} dV + \int_V (R_{u_i})^n dV
 \end{aligned} \tag{3.4a}$$

na qual

$$\begin{aligned}
 \int_V R_{u_i}^n dV &= \int_V \frac{(\rho U_i)^n}{\Delta t} dV - \oint_A (1-\theta) \left((\rho U_j U_i)^n - \frac{(\mu_e)^n}{Re} \frac{\partial (\rho U_i)^n}{\partial X_j} \right) n_j dA - \int_V (1-\theta) \frac{\partial P^n}{\partial X_i} dV + \\
 &+ (1-\theta) \int_V (S_{u_i}^*)^n dV
 \end{aligned} \tag{3.4b}$$

$$\int_V \frac{\partial(\rho U_i)^{n+1}}{\partial X_i} dV = 0 \quad (3.5)$$

e

$$\begin{aligned} & \int_V \frac{(\rho \Phi)^{n+1}}{\Delta t} dV + \oint_A \theta \left((\rho U_j \Phi)^{n+1} - \frac{(\Gamma_\Phi)^{n+1}}{\text{Re}} \frac{\partial(\Phi)^{n+1}}{\partial X_j} \right) n_j dA = \\ & = \int_V \theta (S_\Phi)^{n+1} dV + \int_V (R_\Phi)^n dV \end{aligned} \quad (3.6a)$$

na qual,

$$\int_V R_\Phi^n dV = \int_V \frac{(\rho \Phi)^n}{\Delta t} dV - \oint_A (1-\theta) \left((\rho U_j \Phi)^n - \frac{(\Gamma_\Phi)^n}{\text{Re}} \frac{\partial(\Phi)^n}{\partial X_j} \right) n_j dA + \int_V (1-\theta) (S_\Phi)^n dV \quad (3.6b)$$

Nas equações (3.4) a (3.6), n_j representa os componentes do vetor normal, tomados para fora das áreas de fronteiras dos volumes de controle, apontando na direção do eixo X_j . Este vetor unitário é definido como segue,

$$\vec{n} dA = (n_1 \vec{i} + n_2 \vec{j} + n_3 \vec{k}) dA \quad (3.7a)$$

o qual, para problemas tridimensionais, resulta em:

$$\vec{n} dA = dydz \vec{i} + dx dz \vec{j} + dx dy \vec{k}, \quad |\vec{n}| = 1 \quad (3.7b)$$

Para obter o sistema algébrico, as equações (3.4) a (3.6) são aplicadas em cada subvolume de controle dentro de um elemento. O sistema completo de equações algébricas é obtido somando a contribuição elemento por elemento. Este procedimento facilita a obtenção das matrizes globais e não afeta o princípio de conservação, uma vez que, quando levada em consideração a contribuição de cada elemento para todos os nós, a contribuição para os volumes de controle completos terá sido feita. O procedimento adotado na maioria dos trabalhos é a integração das equações para um volume de controle completo, similarmente ao que é feito no método de

volumes finitos. No caso deste trabalho, foi seguido o procedimento adotado no método clássico de elementos finitos, como em Campos-Silva (1998) e Lima (2005).

3.2.3 – Funções de Interpolação

No método de elementos finitos, as variáveis desconhecidas são interpoladas no interior de um elemento, na forma:

$$U_i^e(\Omega, t) = \sum_{\alpha=1}^{NNEl} N_{\alpha}^e(\Omega) U_{i\alpha}^e(t) \quad (3.8)$$

$$P^e(\Omega, t) = \sum_{\alpha=1}^{NNEl} N_{\alpha'}^e(\Omega) P_{\alpha'}^e(t) \quad (3.9)$$

$$\Phi^e(\Omega, t) = \sum_{\alpha=1}^{NNEl} N_{\alpha}^e(\Omega) \Phi_{\alpha}^e(t) \quad (3.10)$$

nas quais, N_{α} , $N_{\alpha'}$ são funções de interpolação tridimensionais dentro de um elemento, definidas no Apêndice A e os termos $U_{i\alpha}^e$, $P_{\alpha'}^e$, Φ_{α}^e são, respectivamente, os valores nodais da velocidade no nó α , da pressão no nó α' e de um escalar qualquer no nó α de um elemento finito. Usa-se α' para considerar que a pressão pode ser interpolada por função de interpolação de ordem diferente, geralmente mais baixa daquela usada para interpolar a velocidade ou outro escalar qualquer, evitando valores não realísticos para o campo de pressão.

Este desenvolvimento é baseado principalmente no trabalho de Campos-Silva (1998) e Lima (2005). As velocidades e demais grandezas escalares, exceto, a pressão, são interpoladas usando a quantidade total de nós do elemento. A pressão é interpolada usando formulação mista e é equivalente à interpolação por malha deslocada em volumes finitos.

Considera-se, agora, um determinado subvolume de controle associado ao nó α de um elemento. Como dito anteriormente, a discretização das equações (3.4) a (3.6) é feita, no presente trabalho, considerando o elemento hexaedro com vinte e sete nós, apresentado na Figura 3.1. Agora, na Figura 3.2 tem-se o elemento e seus respectivos subvolumes de controle. Cada subvolume de controle é identificado pelo número do nó a ele associado. O número de lados do volume de controle dependerá de quantos elementos compartilham um determinado nó. No caso de nós de fronteira do domínio, o volume de controle será composto por dois subvolumes de

controle. Em geral, um determinado elemento será subdividido em um número de subvolumes de controle igual ao número de nós, ou seja, no caso do hexaedro com vinte e sete pontos nodais, ele será subdividido em vinte e sete subvolumes de controle.

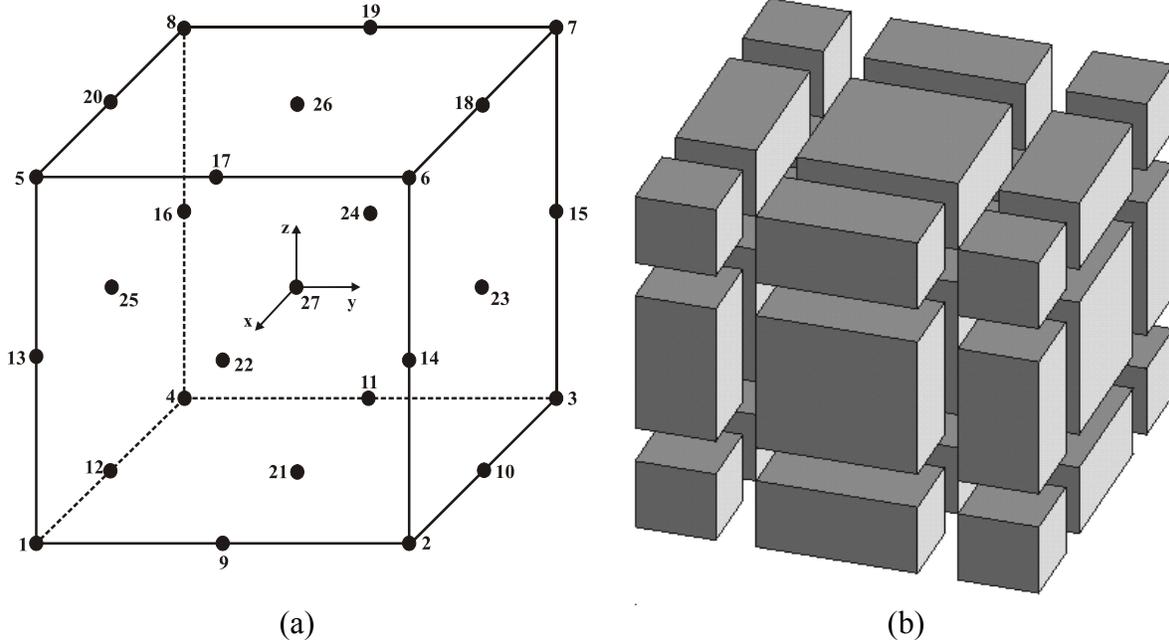


Figura 3.2 – (a) Elemento finito e seus subvolumes de controle; (b) Elemento subdividido em volumes de controle;

Considerando então as equações para um subvolume de controle associado a um determinado nó α de um elemento, obtém-se a partir das Equações (3.4), (3.5) e (3.6):

$$\int_{V_\alpha} \frac{(\rho U_i)^{n+1}}{\Delta t} dV + \theta \sum_{K=1}^{NF} \left[\int_{A_{K\alpha}} \left((\rho U_j U_i)^{n+1} - \frac{(\mu_e)^{n+1}}{\text{Re}} \frac{\partial (U_i)^{n+1}}{\partial X_j} \right) n_j dA \right] + \int_{V_\alpha} \theta \frac{\partial P^{n+1}}{\partial X_i} dV - \theta \int_{V_\alpha} (S_{u_i}^*)^{n+1} dV - (R_{u_i\alpha})^n + [\text{contribuições similares de outros elementos para o nó } \alpha] + [\text{contribuições de contornos se for o caso} = 0] \quad (3.11)$$

$$\int_{V_\alpha} \frac{\partial (\rho U_i)^{n+1}}{\partial X_i} dV + [\text{contribuições de outros elementos para o nó } \alpha = 0] \quad (3.12)$$

e

$$\int_{V_\alpha} \frac{(\rho \Phi)^{n+1}}{\Delta t} dV + \theta \sum_{K=1}^{NF} \left[\int_{A_{K\alpha}} \left((\rho U_j \Phi)^{n+1} - (\Gamma_\phi)^{n+1} \frac{\partial (\Phi)^{n+1}}{\partial X_j} \right) n_j dA \right] - \theta \int_{V_\alpha} (S_\phi)^{n+1} dV -$$

$$-(R_{\phi\alpha})^n + \text{contribuições similares de outros elementos para o nó } \alpha + \text{contribuições de contornos se for o caso} = 0. \quad (3.13)$$

Nas equações (3.11) e (3.13) as expressões para $R_{u_i\alpha}^n$ e $R_{\phi\alpha}^n$ são:

$$(R_{u_i\alpha})^n = \int_{V_\alpha} \frac{(\rho U_i)^n}{\Delta t} dV - (1-\theta) \sum_{K=1}^{NF} \left[\int_{A_{K\alpha}} \left((\rho U_j U_i)^n - \frac{(\mu_e)^n}{\text{Re}} \frac{\partial(U_i)^n}{\partial X_j} \right) n_j dA \right] - (1-\theta) \int_{V_\alpha} \frac{\partial P^n}{\partial X_i} dV + (1-\theta) \int_{V_\alpha} (S_{u_i}^*)^n dV \quad (3.14)$$

$$R_{\phi\alpha}^n = \int_{V_\alpha} \frac{(\rho \Phi)^n}{\Delta t} dV - (1-\theta) \sum_{K=1}^{NF} \left[\int_{A_{K\alpha}} \left((\rho U_j \Phi)^n - (\Gamma_\phi)^n \frac{\partial(\Phi)^n}{\partial X_j} \right) n_j dA \right] + (1-\theta) \int_{V_\alpha} (S_\phi)^n dV \quad (3.15)$$

Substituindo as funções de interpolação definidas pelas equações (3.8) a (3.10) nas equações (3.11) a (3.13), obtém-se o seguinte sistema para um elemento:

$$\left[\frac{M_{\alpha\beta}^e}{\Delta t} + \theta(C_{\alpha\beta}^e - K_{\alpha\beta}^e)^{n+1} \right] (U_{i\beta}^e)^{n+1} + \theta H_{i\alpha\beta'}^e (P_{\beta'}^e)^{n+1} = \left[\frac{M_{\alpha\beta}^e}{\Delta t} - (1-\theta)(C_{\alpha\beta}^e - K_{\alpha\beta}^e)^n \right] (U_{i\beta}^e)^n + \theta (S_{i\alpha}^e)^{n+1} + (1-\theta) \left[(S_{i\alpha}^e)^n - H_{i\alpha\beta'}^e (P_{\beta'}^e)^n \right] \quad (3.16)$$

$$D_{i\alpha'\beta}^e (U_{i\beta}^e)^{n+1} = 0 \quad (3.17)$$

$$\left[\frac{M_{\alpha\beta}^e}{\Delta t} + \theta(C_{\alpha\beta}^e - K_{\alpha\beta}^e)^{n+1} \right] (\Phi_\beta^e)^{n+1} = \left[\frac{M_{\alpha\beta}^e}{\Delta t} - (1-\theta)(C_{\alpha\beta}^e - K_{\alpha\beta}^e)^n \right] (\Phi_\beta^e)^n + \theta (S_{\Phi\alpha}^e)^{n+1} + (1-\theta)(S_{\Phi\alpha}^e)^n \quad (3.18)$$

As matrizes presentes nas equações (3.16) a (3.18) são definidas a seguir.

$$M_{\alpha\beta} = \int_{V_{SVC\alpha}} \rho N_\beta dV \quad (3.19a)$$

$$C_{\alpha\beta}^n = \oint_{A_{SVC\alpha}} \rho N_{\beta} U_j^n n_j dA \quad (3.19b)$$

$$K_{\alpha\beta} = \oint_{A_{SVC\alpha}} \frac{\mu_e}{\text{Re}} \frac{\partial N_{\beta}}{\partial x_j} n_j dA \quad (3.19c)$$

$$H_{i\alpha\beta'} = \int_{V_{SVC\alpha}} \frac{\partial N_{\beta'}}{\partial X_i} dV \quad (3.19d)$$

$$D_{i\alpha'\beta} = \int_{V_{SVC\alpha'}} \frac{\partial N_{\beta}}{\partial X_i} dV \quad (3.19e)$$

$$S_{\alpha i}^{n+1} = \oint_{A_{SVC\alpha}} \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial \mu_e}{\partial X_j} \frac{\partial U_j^{n+1}}{\partial X_i} n_j dA + \int_{V_{SVC\alpha}} (S_{u_i})^{n+1} dV \quad (3.19f)$$

$$S_{\Phi i}^{n+1} = \int_{V_{SVC\alpha}} S_{\Phi} dV \quad (3.19g)$$

Funções de interpolação podem ser encontradas em livros de elementos finitos, por exemplo, Dhatt & Touzot (1984). Funções de interpolação especiais também podem ser obtidas procurando-se modelar adequadamente os vários termos (convectivos, difusivos, pressão, fontes) a fim de evitar resultados não realísticos.

3.2.4 – Cálculo das Matrizes nos Elementos

Uma vez definida as funções de interpolação, as matrizes descritas nas equações (3.19) são resolvidas a fim de obter os coeficientes das matrizes nos elementos. Antes de montar a matriz global, necessita-se do cálculo das matrizes nos elementos. Este trabalho é facilitado fazendo-se o mapeamento de cada elemento do domínio real em um elemento de referência denominado de elemento mestre. Este mapeamento é feito em função das coordenadas globais dos nós do elemento e das funções de interpolação definidas em coordenadas locais no elemento. A

Figura 3.3 ilustra o mapeamento de um elemento qualquer no elemento mestre. As coordenadas globais dentro de um elemento são definidas por

$$X_i^e = \sum_{\alpha=1}^{NNEL} N_{\alpha}^e X_{i\alpha} \quad (3.20)$$

onde $X_{i\alpha}$, $i=1\dots Ndim$, representa as coordenadas do nó α e N_{α} são funções de interpolação apresentadas no Apêndice A, para o elemento hexaedro. No mesmo Apêndice, têm-se também, as derivadas das funções de interpolação que são necessárias na avaliação das matrizes dos elementos.

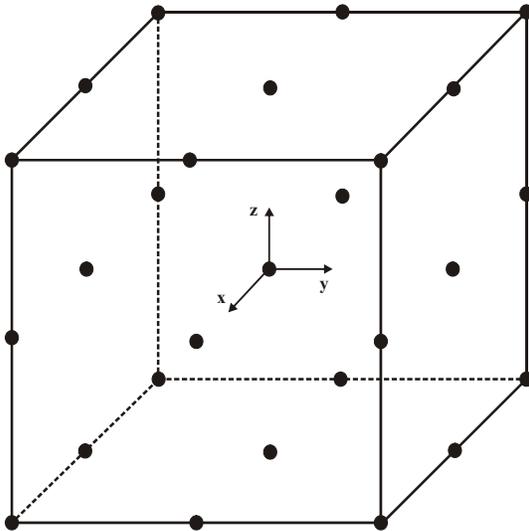


Figura 3.3a: Elemento em coordenadas globais, x, y, z .

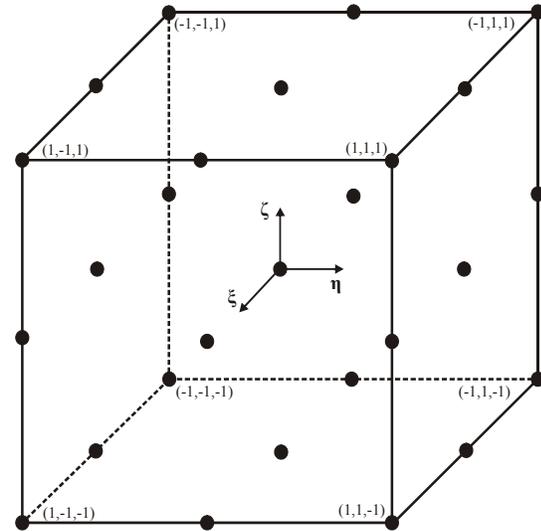


Figura 3.3b: Elemento mapeado no elemento mestre em coordenadas locais, ξ, η, ζ .

As integrais de áreas e volumes, em coordenadas locais nos elementos, podem ser representadas, respectivamente, por

$$\int_A f(x, y) dx dy = \int_A f(\xi, \eta) det(J) d\xi d\eta \quad (3.21)$$

$$\int_V f(x, y, z) dx dy dz = \int_V f(\xi, \eta, \zeta) det(J) d\xi d\eta d\zeta \quad (3.22)$$

sendo $det(J)$, o determinante da matriz do jacobiano da transformação de coordenadas globais para as coordenadas locais dada por

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

As derivadas de qualquer função em relação às coordenadas globais podem ser calculadas por derivadas em coordenadas locais, na forma:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{1}{\det(J)} \left(M_{11} \frac{\partial F}{\partial \xi} - M_{21} \frac{\partial F}{\partial \eta} + M_{31} \frac{\partial F}{\partial \zeta} \right) \quad (3.24a)$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \frac{1}{\det(J)} \left(-M_{12} \frac{\partial F}{\partial \xi} + M_{22} \frac{\partial F}{\partial \eta} - M_{32} \frac{\partial F}{\partial \zeta} \right) \quad (3.24b)$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{1}{\det(J)} \left(M_{13} \frac{\partial F}{\partial \xi} - M_{23} \frac{\partial F}{\partial \eta} + M_{33} \frac{\partial F}{\partial \zeta} \right) \quad (3.24c)$$

nas quais,

$$M_{11} = \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \zeta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \zeta}; \quad M_{21} = \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \zeta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \zeta}; \quad M_{31} = \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta};$$

$$M_{12} = \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial \zeta} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \zeta}; \quad M_{22} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \zeta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \zeta}; \quad M_{32} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} - \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta};$$

$$M_{13} = \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \zeta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \zeta}; \quad M_{23} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \zeta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \zeta}; \quad M_{33} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta};$$

Todas as transformações de coordenadas, para facilitar a integração das equações, são feitas, localmente, em nível de elemento. Diferente do que é feito no método de volumes finitos em coordenadas generalizadas; em que as equações governantes, escritas em coordenadas cartesianas, são transformadas para equações em coordenadas generalizadas. O cálculo das matrizes pode ser feito elemento por elemento montando-se no final, a matriz global, para então

obter a solução do sistema completo. As integrais em áreas de subvolumes de controle são efetuadas usando quatro pontos de Gauss em cada direção e as integrais nos subvolumes de controle, dentro do elemento finito, com vinte e sete pontos de Gauss.

Os fluxos difusivos e convectivos são definidos por

$$FLUD(ip, \beta) = \int_{ip} \mu_e \frac{\partial N_\beta}{\partial x_j} n_j dA \quad (3.25)$$

$$FLUC(ip, \beta) = \int_{ip} \rho U_j N_\beta n_j dA \quad (3.26)$$

nas quais,

$$\vec{n}_j = n_1 \vec{i} + n_2 \vec{j} + n_3 \vec{k} \text{ com } n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1 \quad (3.27)$$

e ip representa um determinado contorno de um subvolume de controle dentro de um elemento.

As matrizes difusivas e convectivas, para o elemento hexaedro com vinte e sete pontos nodais são então obtidas e estão descritas no Apêndice B.

As expressões para n_1 , n_2 e n_3 , presentes na equação (3.27) são efetuadas fazendo $\vec{n} = \vec{r}_u \times \vec{r}_v$, sendo $\vec{r}_u = \partial \vec{r} / \partial u$ e $\vec{r}_v = \partial \vec{r} / \partial v$. Assim,

$$n_1 = \left(\frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v} - \frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} \right); \quad n_2 = \left(\frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v} \right); \quad n_3 = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \zeta} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \zeta} \right); \quad (3.27a)$$

A matriz de massa é calculada de forma consistente como

$$M(\alpha, \beta) = \int_{V_\alpha} \rho N_\beta \det(J) d\xi d\eta d\zeta \quad (3.28)$$

As matrizes nos elementos são calculadas durante o processo de solução num processo iterativo, devido às não linearidades dos termos convectivos e difusivos. Parte dos cálculos requeridos tais como, valores das funções de interpolação e suas derivadas em pontos de Gauss, nos volumes e contornos de subvolumes de controle, são feitos uma única vez e armazenados em arquivos temporários, lidos durante o processo de cálculo das matrizes dos elementos. Este procedimento tem por objetivo reduzir o tempo computacional, para em parte, compensar o tempo gasto pelo método frontal, que realiza a leitura de dados no disco. Para um sistema

computacional com memória de processamento suficientemente grande, poder-se-ia armazenar os dados na própria memória, o que aceleraria em muito o processo de cálculo. O método de solução, descrito no próximo item, requer armazenamento e leitura de muitos dados no disco rígido, o que eleva o tempo total de processamento. Por outro lado, ele é apropriado para sistemas de pequeno porte, em que a capacidade de memória pode ser ainda uma limitação.

3.3 – Solução do Sistema de Equações Discretizadas

Neste trabalho, adota-se, no caso bidimensional, a seguinte estratégia de solução: (1) os campos de velocidades e pressão são calculados resolvendo-se as equações do movimento; (2) obtido o campo de velocidades, resolve-se uma equação de transporte para cada escalar (temperatura, energia cinética turbulenta, dissipação, concentração) separadamente. Já, no caso tridimensional, resolve-se também, a equação de transporte para cada escalar, separadamente, arbitrando um campo de velocidades.

O método de solução adotado foi o método frontal, descrito por Taylor & Hughes (1981). O primeiro objetivo do método frontal é a eliminação de variáveis logo após sua introdução, via equações apropriadas, dentro da matriz global. Imediatamente após todas as contribuições de todos os elementos para um nó particular terem sido montadas, as variáveis correspondentes e associadas com aquele nó podem ser eliminadas. Desta forma, a matriz completa nunca é montada, visto que todas as equações reduzidas podem ser eliminadas da memória e armazenadas em disco. As equações mantidas na memória, com os nós e variáveis correspondentes são denominadas fronte e o número de variáveis desconhecidas dentro do fronte é denominado largura do fronte. A largura do fronte muda continuamente, visto que, uma vez que todas as contribuições para um nó tenham sido completamente somadas, então a redução da equação correspondente, baseada sobre um pivoteamento diagonal, pode ser executada.

Nos métodos de solução para matrizes simétricas, apenas a triangular superior da matriz é armazenada em qualquer tempo. Entretanto, para matriz global assimétrica, que é o caso do presente estudo, um procedimento diferente é adotado. Uma área de memória pré-assinalada para a matriz global é preenchida de contribuições de elementos. A maior entrada diagonal nesta área pré-assinalada de memória é encontrada e usada como pivô num processo de eliminação direta de Gauss. Quando são eliminados o número máximo de equações pré-determinadas, as equações reduzidas correspondentes são escritas no disco e mais elementos e equações correspondentes

introduzidos na memória. O requerimento mínimo de memória para matrizes assimétricas é quase duas vezes maior que o requerido para matrizes simétricas. As equações, nós e variáveis correntemente na memória são denominados ativos, aqueles guardados em disco são denominados desativados e aqueles para serem ainda introduzidas na memória são denominados inativos.

Foi construída uma rotina por Campos-Silva (1998) para elementos com nove nós em escoamentos laminares baseada em Taylor & Hughes (1981). No trabalho de Lima (2005), tal rotina foi modificada e adaptada de forma a modelar o efeito da turbulência. Neste trabalho, o código computacional esta sendo estendido para o cálculo convectivo-difusivo tridimensional.

O método frontal tem a vantagem de que, em nenhum instante, a matriz global necessita ser montada completamente, sendo que, a maior matriz montada é definida por um parâmetro que define o tamanho do fronte. Desta forma, a solução do sistema pode ser realizada em computadores com menor quantidade de memória e com média capacidade de armazenamento em disco. O preço a se pagar é um tempo maior para a solução, visto que, durante o processamento, serão lidos dados armazenados em disco e este processo ainda é muito lento.

CAPÍTULO 4

Resultados e Discussão de Casos Bidimensionais

Apresentam-se, neste capítulo, resultados bidimensionais da dispersão de contaminantes em cânions urbanos. Estes resultados foram obtidos fazendo uso do código computacional, bidimensional, validado no trabalho de Lima (2005) e reformulado, no presente trabalho, para linguagem Fortran 90. Naquele trabalho, são apresentados casos de escoamento com e sem transferência de calor e/ou massa, com o objetivo de validar a modelagem da turbulência. Dois casos clássicos foram utilizados: o primeiro foi o caso da cavidade quadrada com a parede superior deslizante e o outro foi o caso do canal com expansão brusca em degrau. Alguns casos de escoamentos sobre obstáculos foram também realizados, mostrando a necessidade de mais investigações sobre este tipo de problema para uma melhor calibragem do método numérico. Os resultados obtidos foram comparados com trabalhos disponíveis na literatura. No caso de escoamentos bidimensionais foram resolvidas as equações do campo de velocidade.

No caso tridimensional, tem-se a solução da equação de transporte para um escalar, representando tanto a concentração, quanto a temperatura. Com isso, resultados tridimensionais para um problema convectivo-difusivo com o campo de velocidades imposto arbitrariamente foram obtidos e aplicou-se na análise do comportamento da dispersão de contaminante em uma caixa cúbica e no canal.

4.1 – Escoamentos em Cânions Urbanos

A dispersão de um contaminante em um cânion urbano devido à ação de um campo de escoamento com velocidade uniforme imposta na entrada do domínio foi obtida nessa seção. O

cânion é simulado pela colocação de obstáculos (cilindros de seção retangular) no domínio do escoamento. Este tipo de escoamento é um dos mais difíceis de serem simulados numericamente devido à presença dos obstáculos, principalmente quando o número de Reynolds cresce. As equações que regem o escoamento incompressível, transiente, não isotérmico, de um fluido newtoniano são as seguintes:

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial(UU)}{\partial X} + \frac{\partial(VU)}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\nu_e}{Re} \frac{\partial U}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\nu_e}{Re} \frac{\partial U}{\partial Y} \right) \quad (4.2a)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\partial(UV)}{\partial X} + \frac{\partial(VV)}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\nu_e}{Re} \frac{\partial V}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\nu_e}{Re} \frac{\partial V}{\partial Y} \right) + \frac{Gr}{Re^2} \theta \quad (4.2b)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial(U\theta)}{\partial X} + \frac{\partial(V\theta)}{\partial Y} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\sigma_\theta}{Re} \frac{\partial \theta}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\sigma_\theta}{Re} \frac{\partial \theta}{\partial Y} \right) \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(UC)}{\partial X} + \frac{\partial(VC)}{\partial Y} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\sigma_c}{Re} \frac{\partial C}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\sigma_c}{Re} \frac{\partial C}{\partial Y} \right) \quad (4.4)$$

As condições de contorno para as velocidades, temperatura e pressão são dadas como:

$$U = V = 0, \text{ no solo e em torno dos prédios;} \quad (4.5a)$$

$$U = 1 \text{ e } V = 0 \text{ em } X = 0, \text{ entrada do domínio;} \quad (4.5b)$$

$$\theta = 1 \text{ na entrada, no solo e em torno dos prédio;} \quad (4.5c)$$

$$\theta = 0, \text{ na fronteira superior;} \quad (4.5d)$$

$$P = 0, \text{ na seção de saída.} \quad (4.5e)$$

As condições de contorno para a concentração foram tomadas em alguns pontos entre os prédios, em $Y = 0$.

4.1.1 – Dispersão de contaminante em um canal com dois obstáculos de alturas iguais

Nesse primeiro momento, considerou-se um escoamento dentro de um cânion de rua, com dois obstáculos de mesma altura e comprimentos diferentes. A Figura 4.1 ilustra a geometria e condições de contorno do escoamento em um cânion urbano. O primeiro sólido possui comprimento 2 e o segundo, 0,4, ambos possuem altura 1. O domínio foi baseado em Wong et al. (2002), neste caso, possui comprimento 54,4 e altura 10. A origem do eixo de coordenadas cartesianas está fixada no canto inferior esquerdo do domínio, a distância da origem até o primeiro sólido é 1 que é a mesma entre os sólidos e o comprimento do ultimo sólido até o final do cânion é 50.

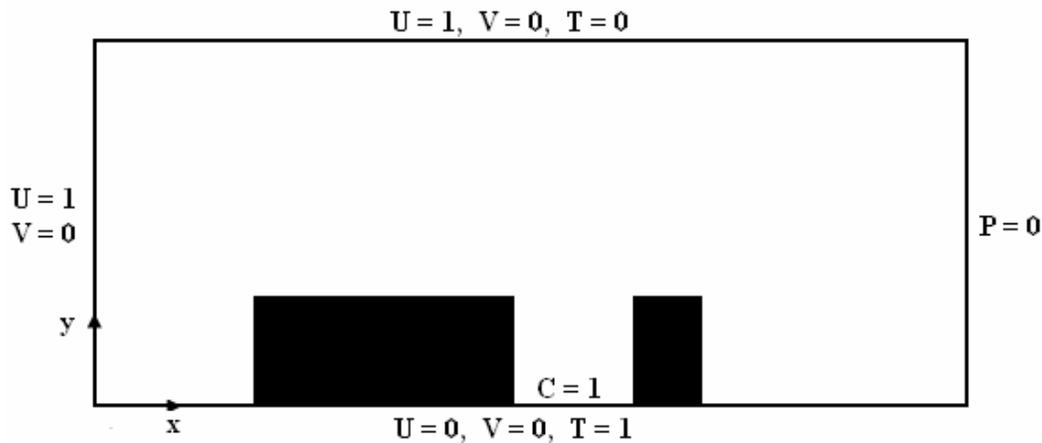


Figura 4.1 – Geometria e condições de contorno - Cânion Urbano, caso 1

A Figura 4.2 ilustra um recorte do domínio discretizado. As dimensões do domínio foram descritas anteriormente. A malha é estruturada, não uniforme, com 5234 elementos, o que equivale a 16073 pontos nodais, resultando em 69301 graus de liberdade. O parâmetro de Smagorinsky foi ajustado em 0,16 e os adimensionais fixados, $Sc = 0,2$, $Pr = 0,72$ e $Re = 100$.

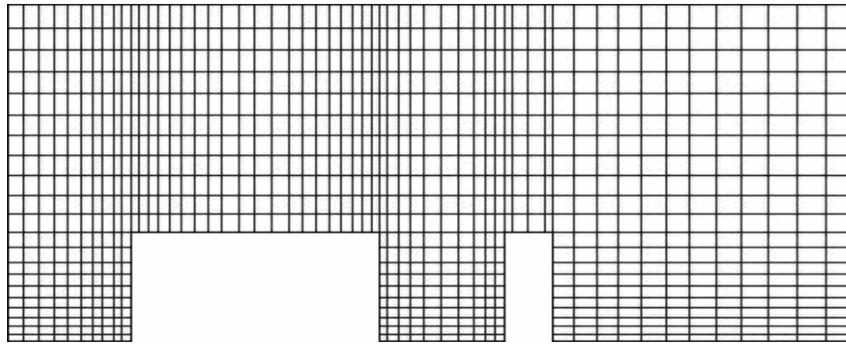


Figura 4.2 – Domínio discretizado, caso 1

As Figuras 4.3 a 4.6 mostram, respectivamente, o perfil de velocidade antes do primeiro prédio, entre os prédios, depois do segundo prédio e no final do escoamento, para três instantes de tempo. Aparentemente, o campo de escoamento está dentro do comportamento esperado. O escoamento acelera na região dos obstáculos.

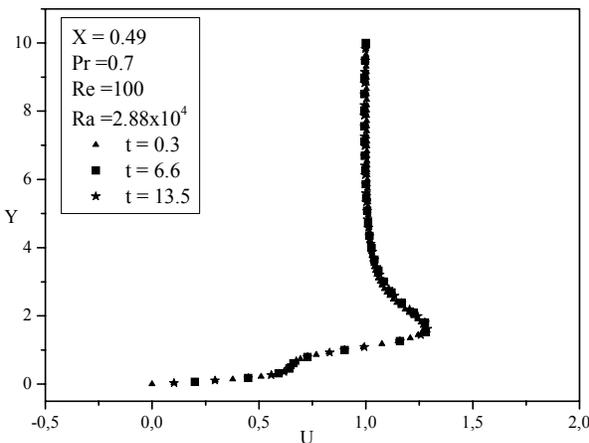


Figura 4.3 – Perfil de velocidade U antes do primeiro prédio

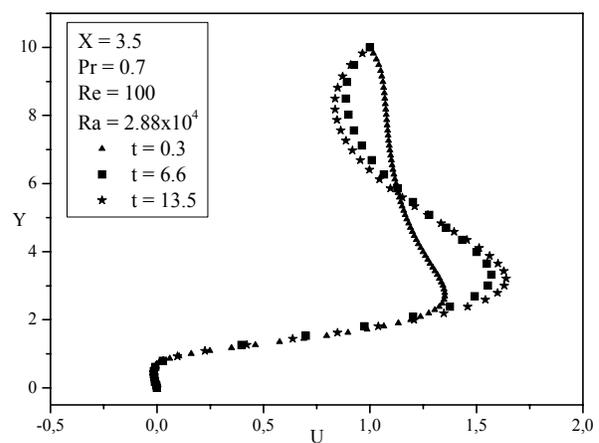


Figura 4.4 – Perfil de velocidade U entre os prédios

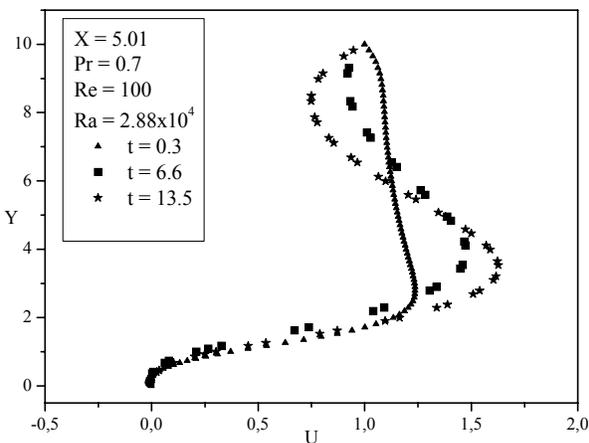


Figura 4.5 – Perfil de velocidade U depois do segundo prédio

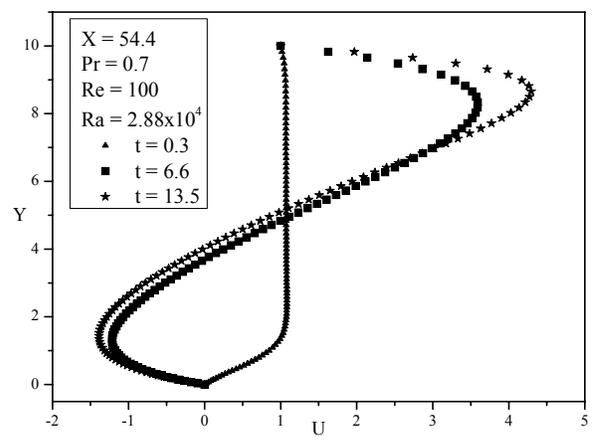


Figura 4.6 – Perfil de velocidade U no final da seção, $x = 54,4$

A função de corrente e o campo de temperatura são mostrados nas Figuras 4.7 e 4.8, respectivamente. Como esperado, o escoamento apresenta recirculações entre e depois dos prédios.

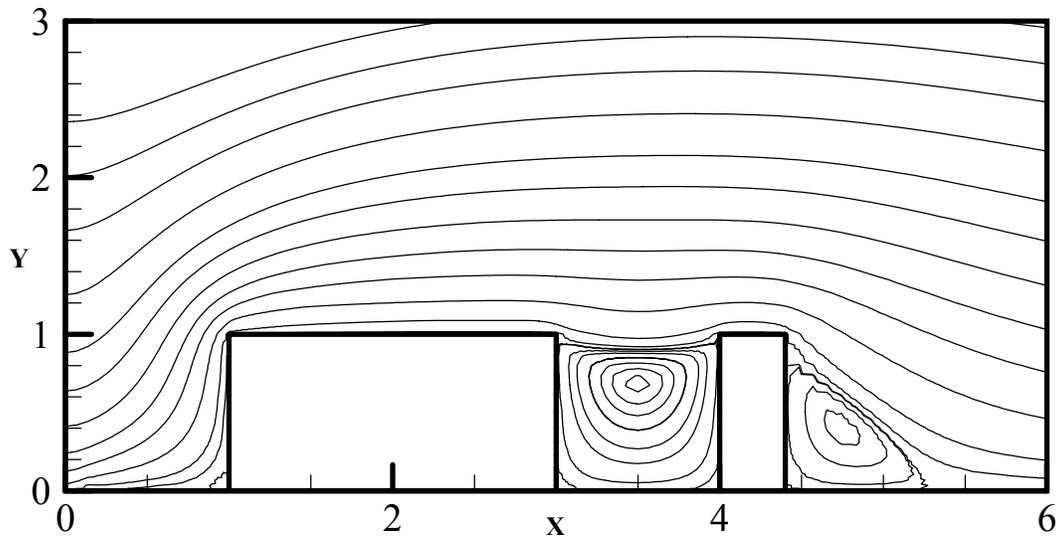


Figura 4.7 – Função de corrente em $t=13,5$

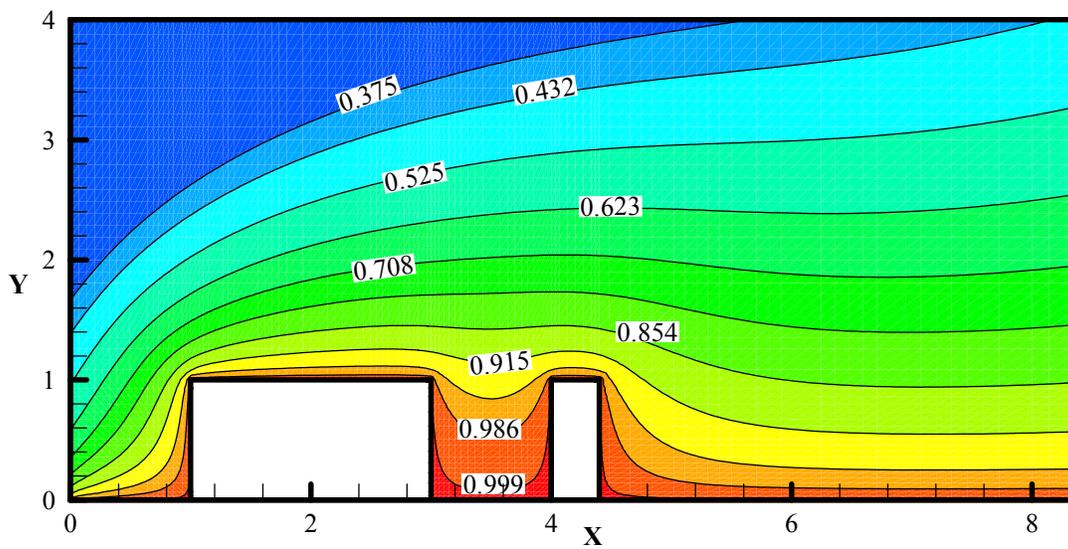


Figura 4.8 – Campo de Temperatura em $t=13,5$

A fonte de poluição no domínio foi fixada entre os prédios e a distribuição de concentração é mostrada nas Figuras 4.9 e 4.10. A difusão da poluição no domínio aumenta com o tempo e uma maior área é afetada.

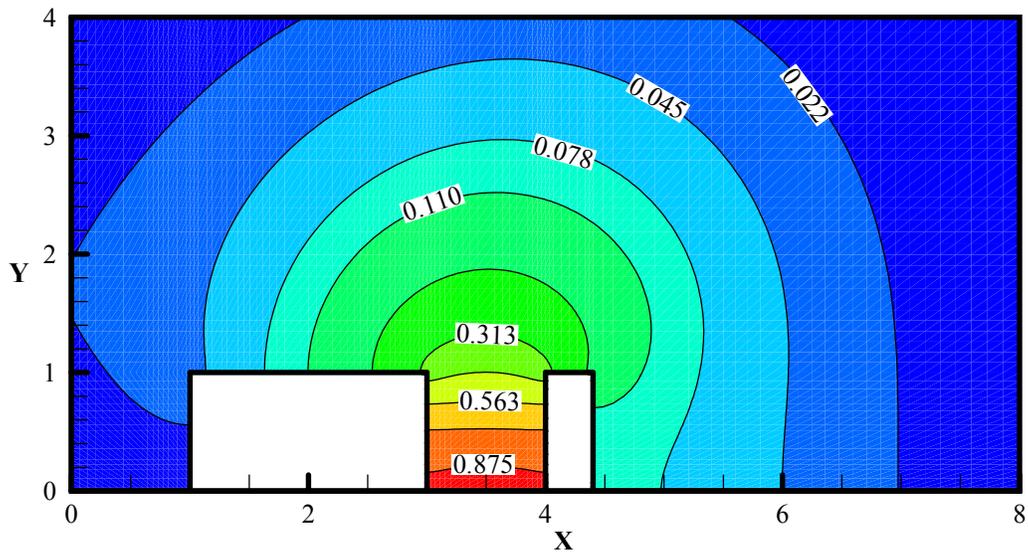


Figura 4.9 – Campo de concentração da poluição em $t=6$

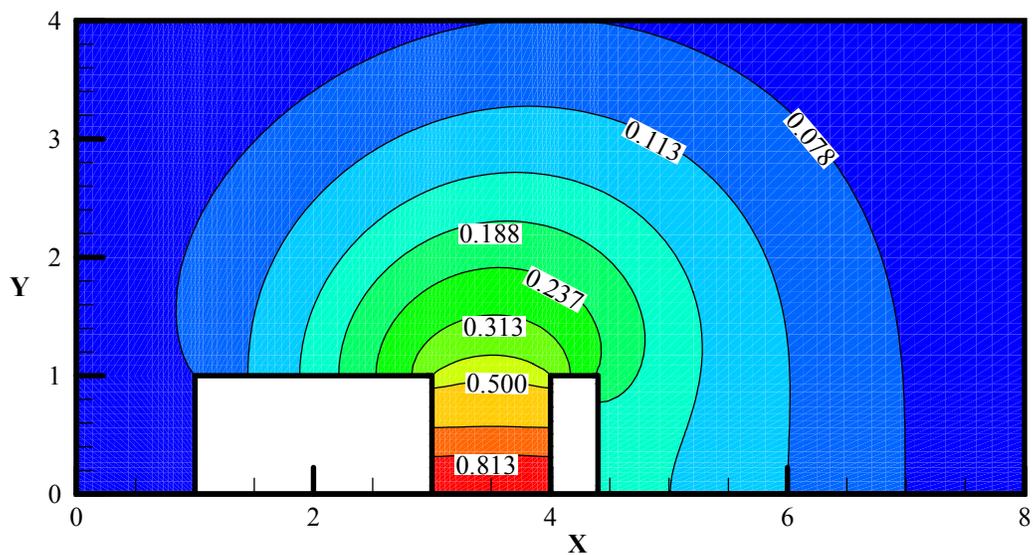


Figura 4.10 – Campo de concentração da poluição em $t=13,5$

Os resultados apresentados nesta seção foram obtidos usando a metodologia de simulação de grandes escalas através do método de elementos finitos baseado em volumes de controle com funções de interpolação quadrática para os campos de velocidade, concentração e temperatura e linear para o campo de pressão.

Embora, neste caso, o número de Reynolds no escoamento seja relativamente baixo ($Re=100$), a metodologia de LES foi importante para a convergência da solução. Não se aplicou técnica upwind e um método totalmente implícito foi usado para a discretização no tempo. Qualitativamente, o comportamento esperado do escoamento e dispersão de uma espécie de poluentes foi obtido.

4.1.2 – Dispersão de contaminante em um canal com dois obstáculos de alturas diferentes.

Agora, a dispersão do contaminante em um cânion de rua foi obtida tendo como domínio dois obstáculos de altura e comprimento distintos. A Figura 4.11 ilustra a geometria e condições de contorno para este caso investigado. O primeiro sólido possui altura 1 e o segundo, 1,5, ambos possuem comprimento igual a 0,4. O domínio possui comprimento 43 e altura 7. A origem do eixo de coordenadas cartesianas está fixada no canto inferior esquerdo do domínio, a distância da origem até o primeiro sólido é 10, o comprimento entre os sólidos é 1 e o comprimento do ultimo sólido até o final do cânion é 30.

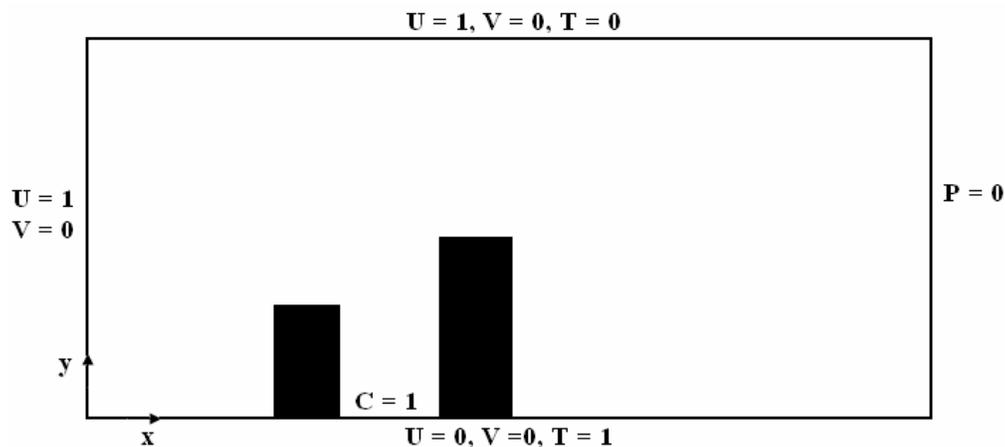


Figura 4.11 – Geometria e condições de contorno - Cânion Urbano, caso 2

A Figura 4.12 ilustra um recorte do domínio discretizado. A malha é estruturada, não uniforme, com 2288 elementos, o que equivale a 7121 pontos nodais, resultando em 30644 graus de liberdade. O parâmetro de Smagorinsky foi ajustado em 0,16 e os adimensionais fixados em $Sc = 0,2$, $Pr = 0,72$ e $Re = 100$.

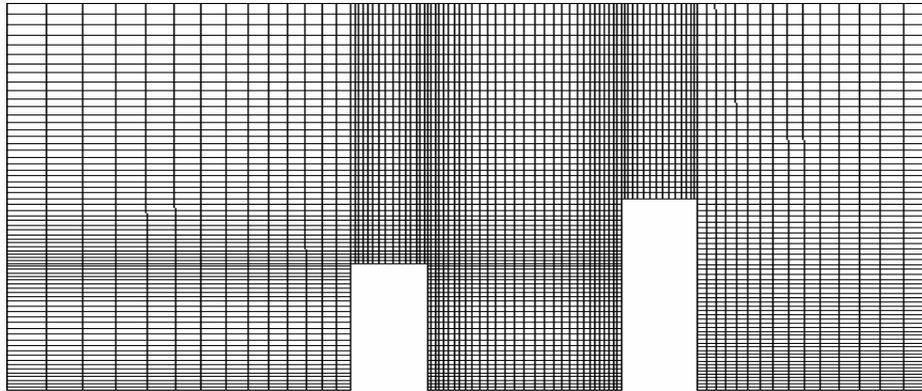


Figura 4.12 – Domínio discretizado, caso 2

A Figura 4.13 ilustra a evolução temporal da velocidade U ao longo do canal, em pontos situados antes do primeiro obstáculo, entre os obstáculos e após o segundo obstáculo, em regime permanente.

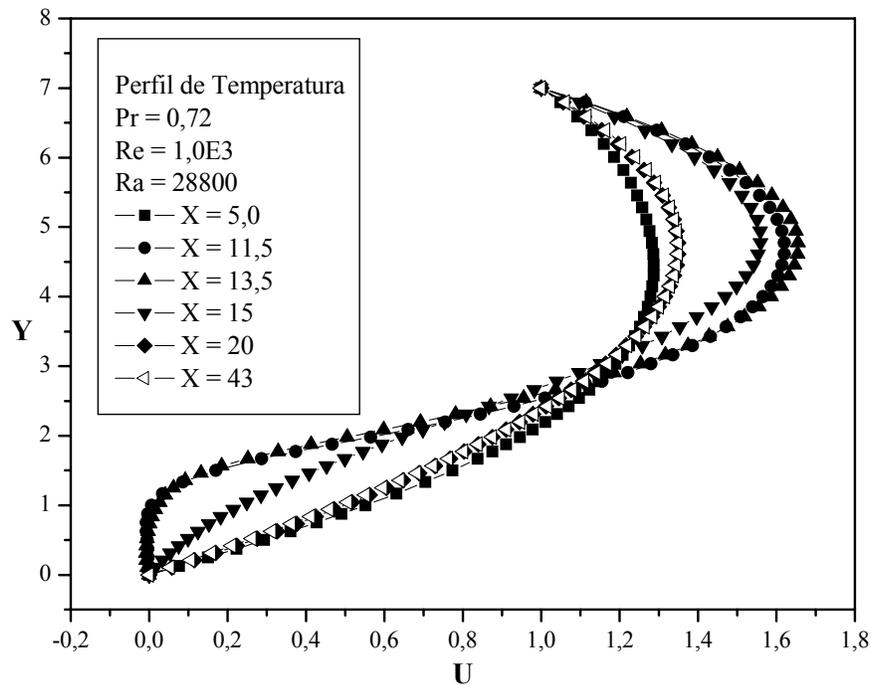


Figura 4.13 – Perfil de velocidade ao longo do domínio

A função de corrente e o campo de temperatura em regime permanente são mostrados nas Figuras 4.14 e 4.15, respectivamente. Os resultados apresentam o comportamento esperado.

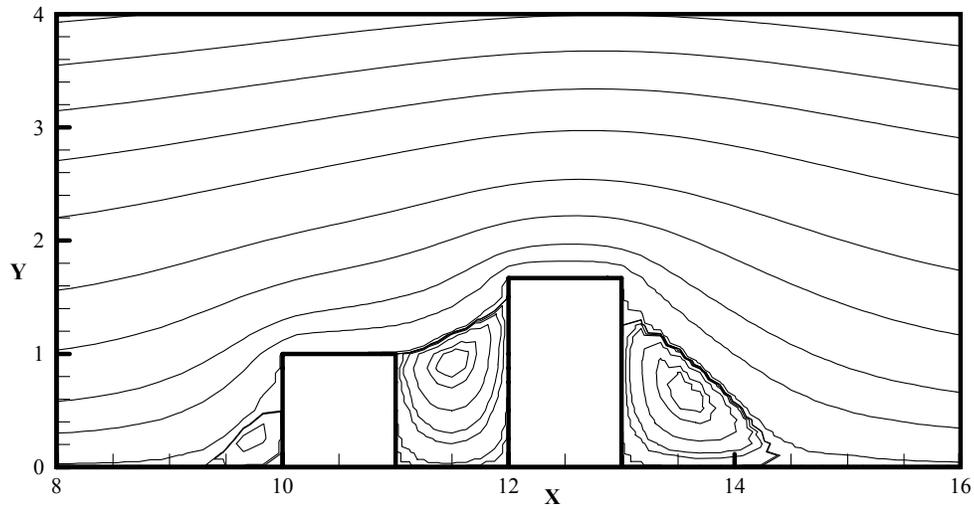


Figura 4.14 – Função de corrente

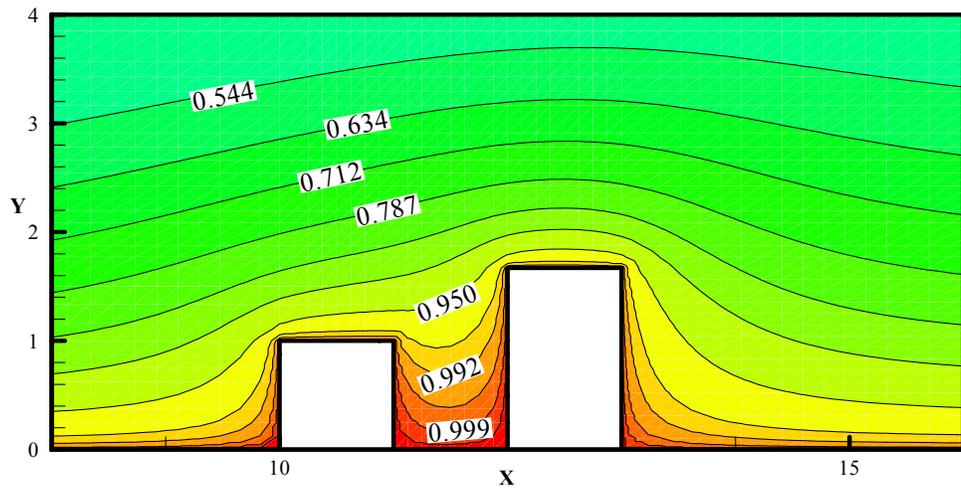


Figura 4.15 – Campo de Temperatura, regime permanente

A fonte de poluição no domínio foi fixada entre os prédios e é mostrado nas Figuras 4.16 e 4.17. A difusão da poluição no domínio aumenta com o tempo e uma maior área é afetada.

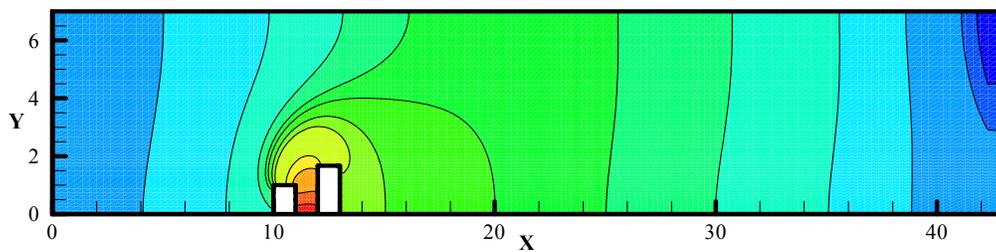


Figura 4.16 – Campo de concentração da poluição

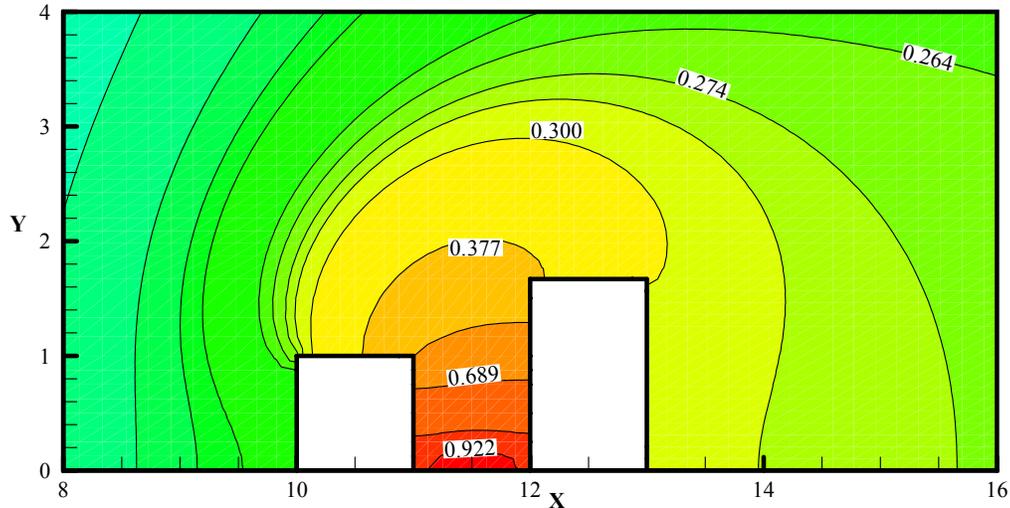


Figura 4.17 – Vista aproximada do campo de concentração

4.2 – Dispersão horizontal de uma espécie de contaminante numa região com cinco obstáculos.

Aqui, a simulação foi realizada para um escoamento no interior de cânion urbano baseado no trabalho de Savii (1998). Neste caso, o interesse é na dispersão horizontal de uma espécie de poluente ao redor de obstáculos.

As dimensões do domínio computacional são: $0 \leq X \leq 65$ e $0 \leq Y \leq 46$, o comprimento dos obstáculos são 10; a largura dos obstáculos inferiores e superiores são 2,0 e 4,0, respectivamente. As condições de contorno são $U = 1$, $V = 0$ e $T = 0$ na entrada (face esquerda) e contornos inferiores e superiores; $T = 1$, nos contornos dos obstáculos, $P = 0$ na seção de saída; $C = 1$ numa linha horizontal entre os obstáculos. A Figura 4.18 mostra um esquema da geometria juntamente com as condições de contorno. O número de Reynolds foi tomado igual a 100.

A malha não uniforme construída para a simulação possui 5100 elementos, 15796 pontos nodais, resultando em 68034 graus de liberdade. Um fragmento desta pode ser observado na Figura 4.19.

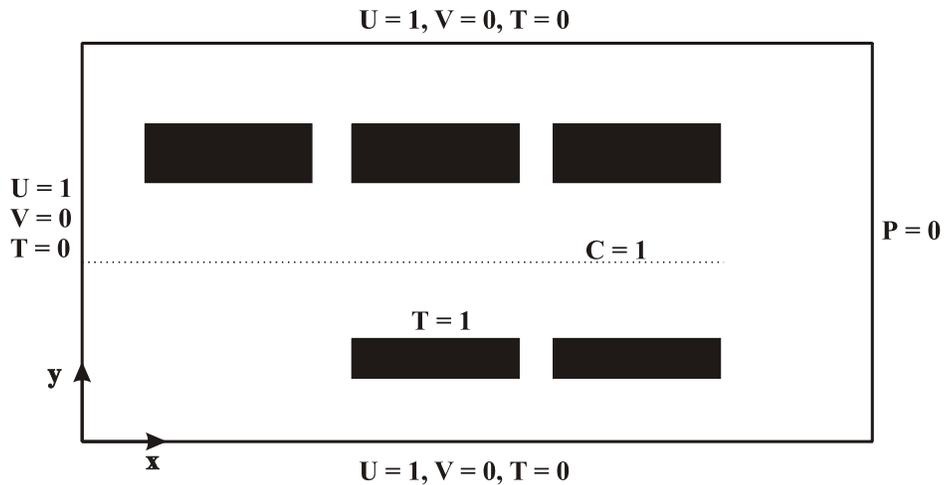


Figura 4.18 – Geometria e condições de contorno, caso 3

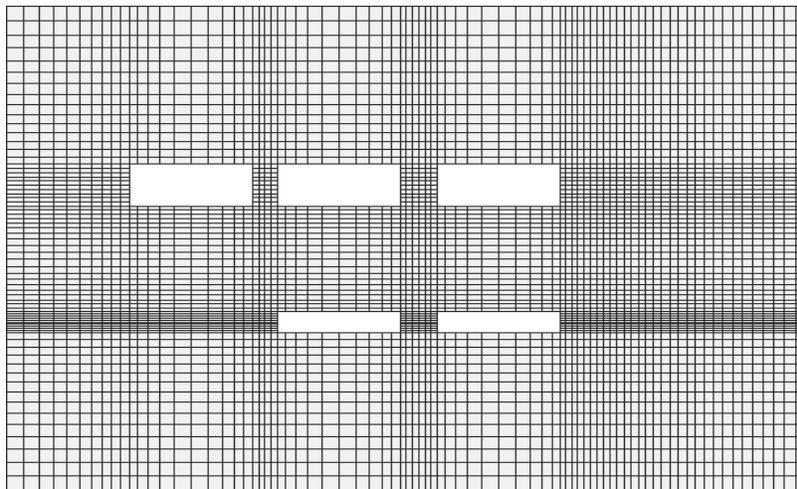


Figura 4.19 – Fragmento do domínio considerado, caso 3

As figuras 4.20a – 4.20h ilustram a evolução da velocidade U ao longo do tempo, em várias posições X . Como pode ser observado, a presença dos obstáculos tem influência acentuada sobre os perfis de velocidade. O perfil de velocidade foi tomado uniforme na seção de entrada do domínio e deforma pela presença dos obstáculos. Há regiões em que o escoamento acelera ou desacelera dependendo de qual lado dos obstáculos ele passa. Inicialmente a velocidade é considerada nula em todo o domínio exceto na seção de entrada.

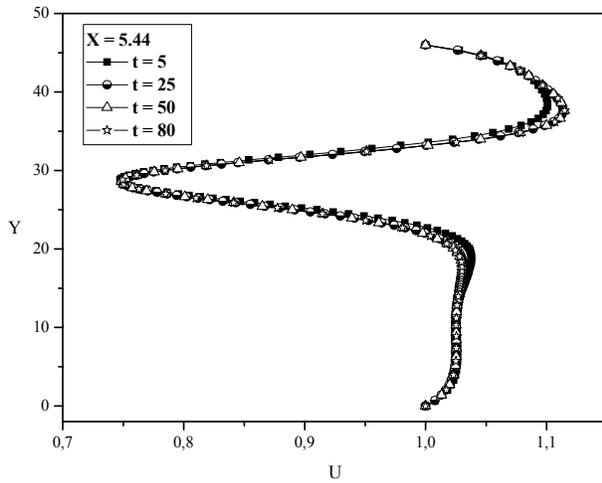


Figura 4.20a – Perfil de velocidade antes do primeiro obstáculo

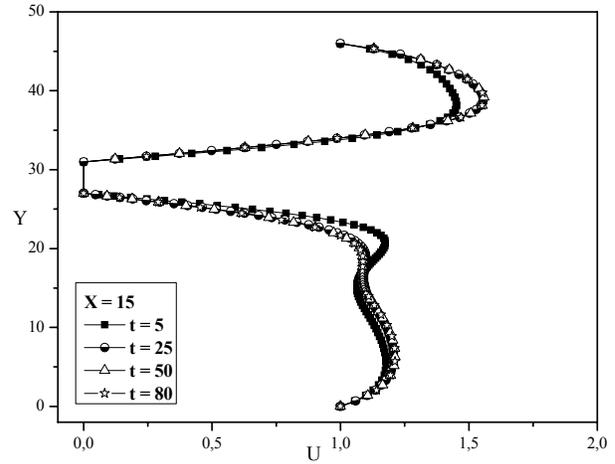


Figura 4.20b – Perfil de velocidade na metade do primeiro obstáculo

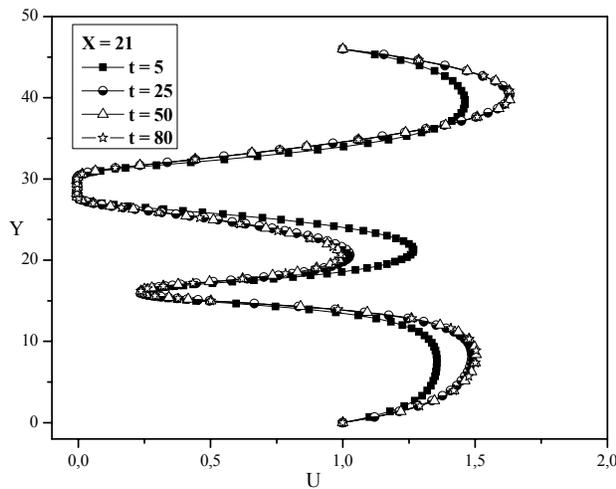


Figura 4.20c – Perfil de velocidade entre o primeiro e segundo obstáculo

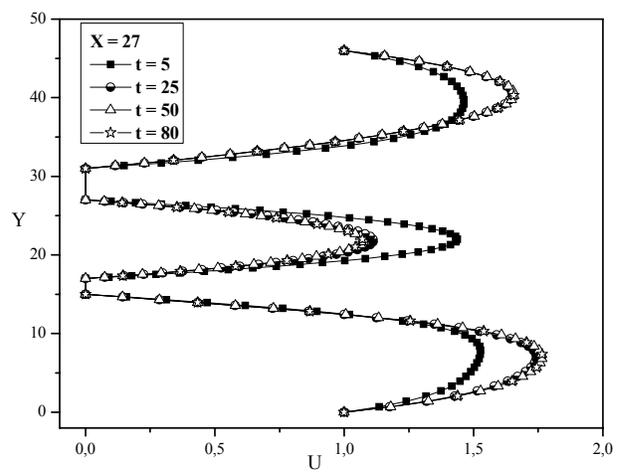


Figura 4.20d – Perfil de velocidade na metade do segundo obstáculo

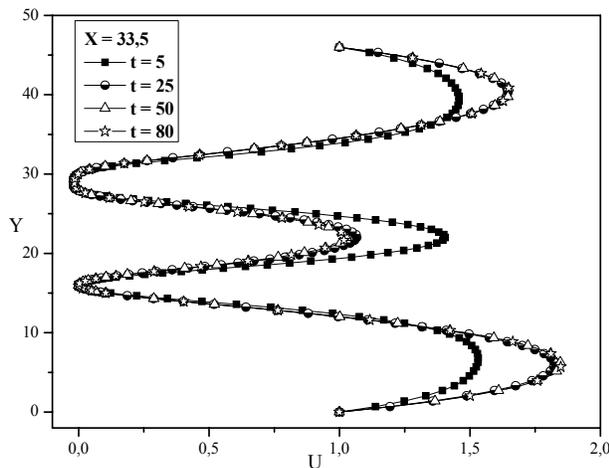


Figura 4.20e – Perfil de velocidade entre o segundo e terceiro obstáculos

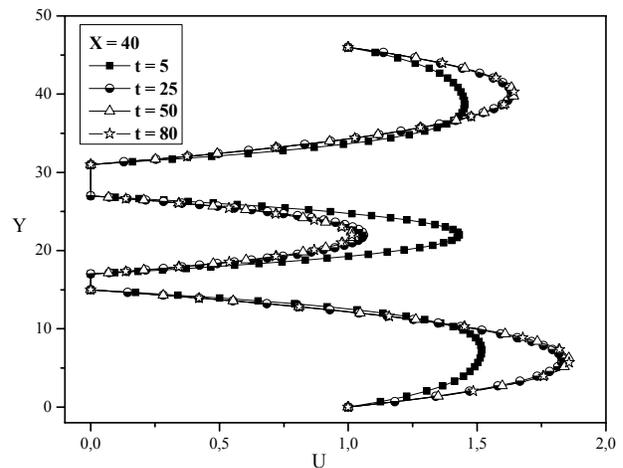


Figura 4.20f – Perfil de velocidade na metade do terceiro obstáculo

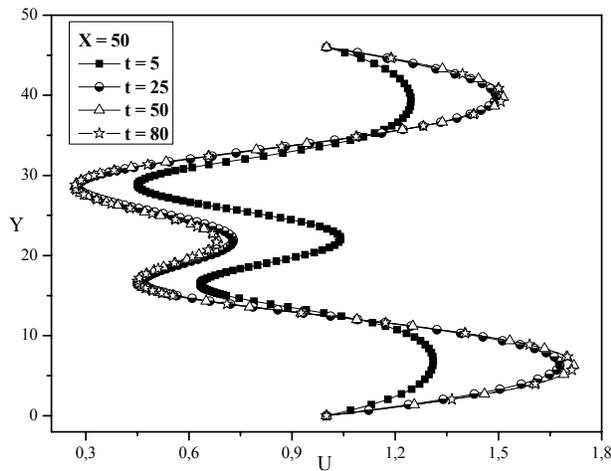


Figura 4.20g – Perfil de velocidade após o terceiro obstáculo

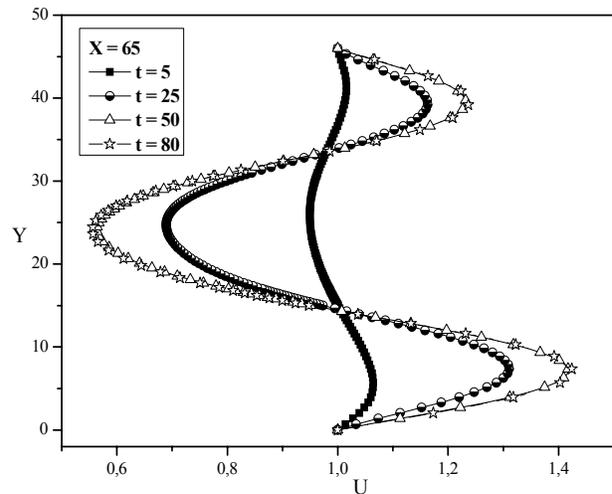


Figura 4.20h – Perfil de velocidade na saída do domínio

Qualitativamente, o comportamento da velocidade foi simulado, entretanto, o tamanho do domínio computacional deveria ser aumentado, tanto no início como no final. Como pode ser visto na figura 4.20h, a presença dos obstáculos ainda influencia muito na saída do perfil de velocidade. Se as dimensões computacionais fossem apropriadas, existiria uma maior probabilidade do perfil de velocidade na saída, ser parabólico ou mais uniforme. O tamanho do domínio deve ser insuficiente para as condições de contorno impostas.

A evolução temporal da concentração de poluição no domínio é apresentada nas figuras 4.21a – 4.21h. Qualitativamente, os resultados possuem o comportamento esperado. Não foi possível fazer comparações com resultados experimentais ou numéricos, pois não foram encontrados na literatura, resultados semelhantes disponíveis. Contudo, o modelo para esse tipo de simulação precisa ser mais investigado, principalmente, para escoamentos com altos números de Reynolds. A função de corrente e o campo de temperatura são mostrados nas figuras 4.22 e 4.23, respectivamente.

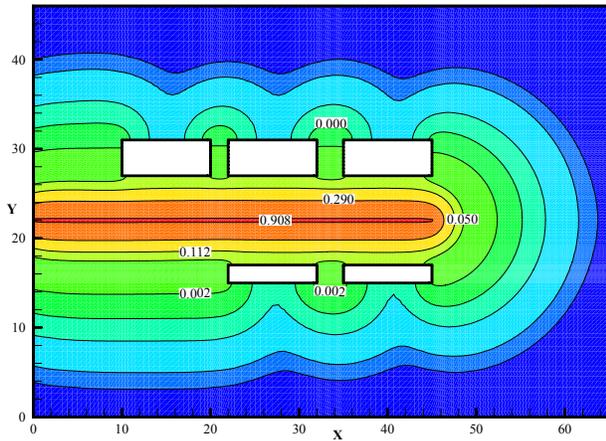


Figura 4.21a – Campo de concentração em t=3

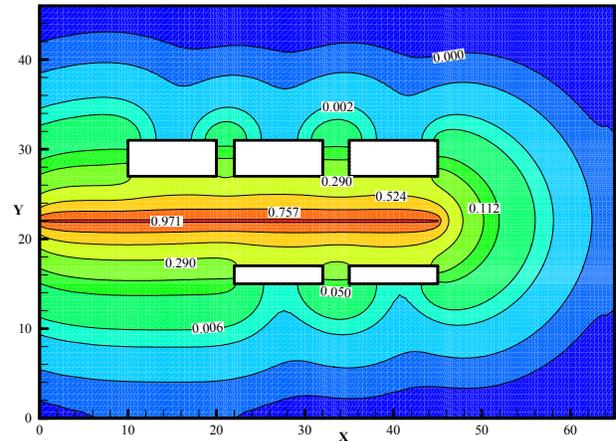


Figura 4.21b – Campo de concentração em t=12

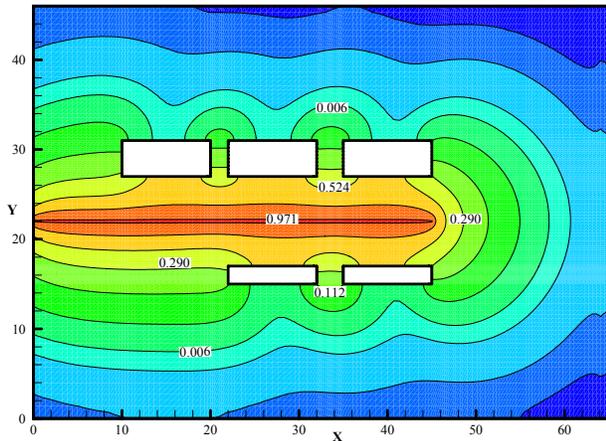


Figura 4.21c – Campo de concentração em t=20

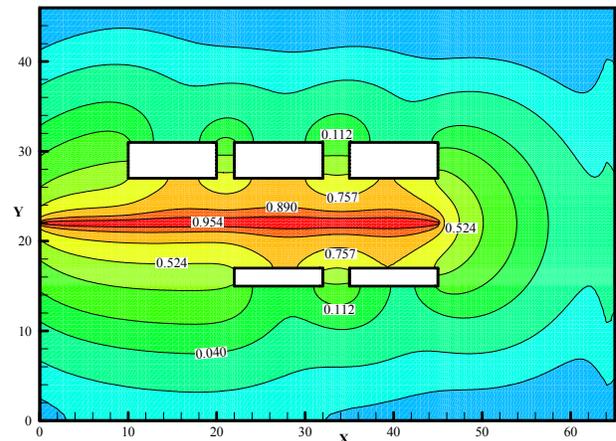


Figura 4.21d – Campo de concentração em t=30

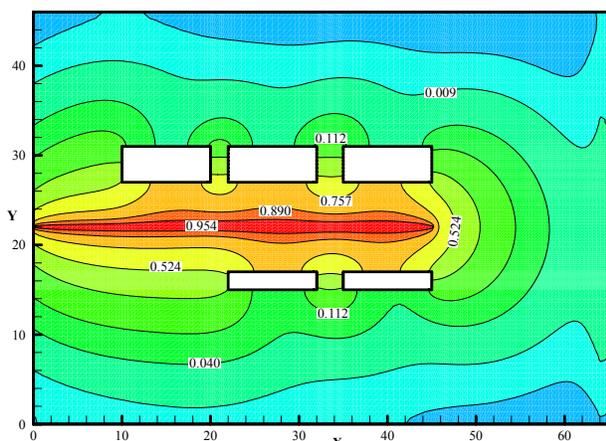


Figura 4.21e – Campo de concentração em t=35

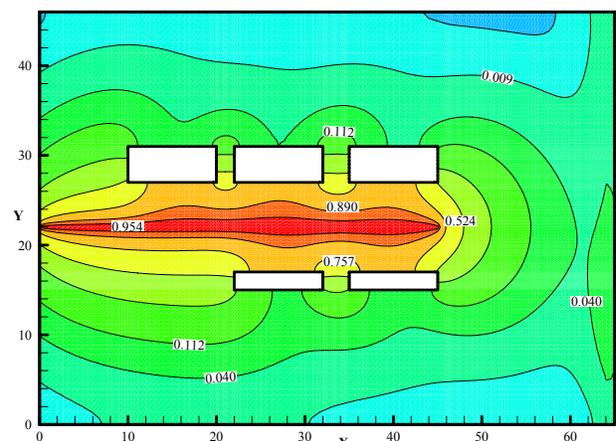


Figura 4.21f – Campo de concentração em t=40

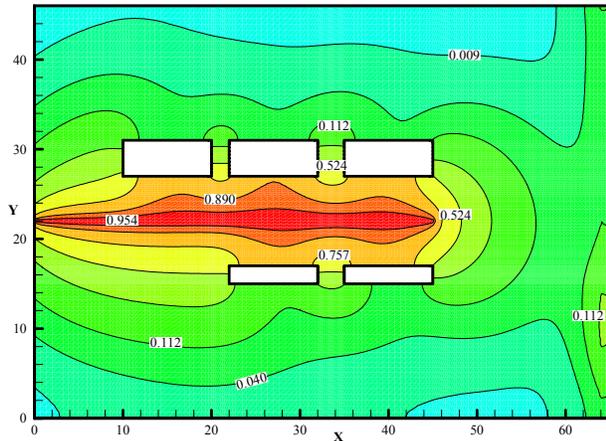


Figura 4.21g – Campo de concentração em $t=45$

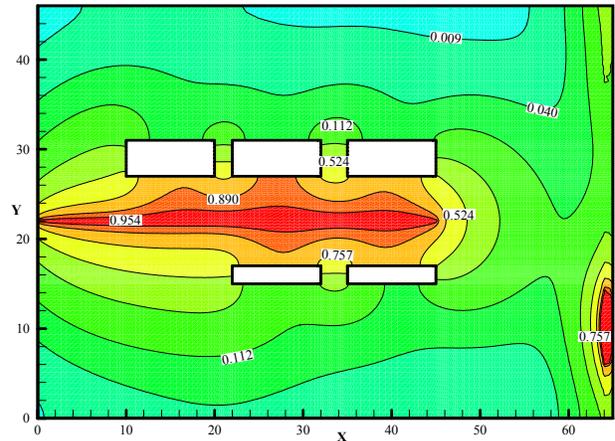


Figura 4.21h – Campo de concentração em $t=50$

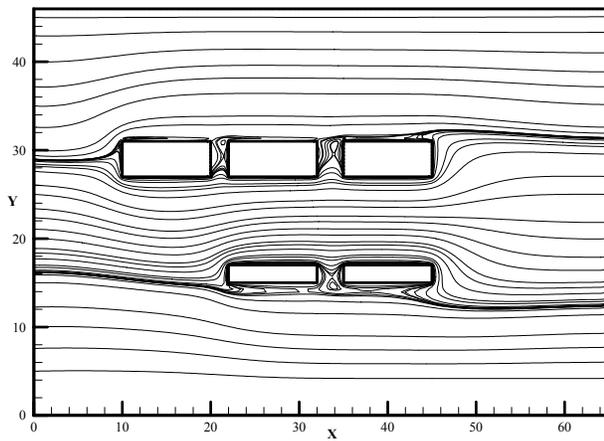


Figura 4.22a – Função de corrente, $t = 80$

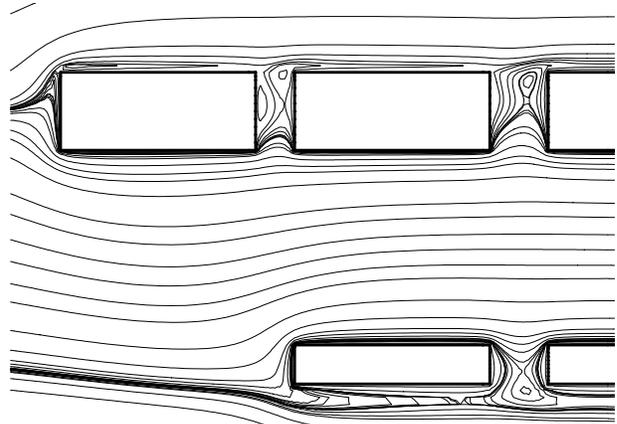


Figura 4.22b – Função de corrente, região ampliada

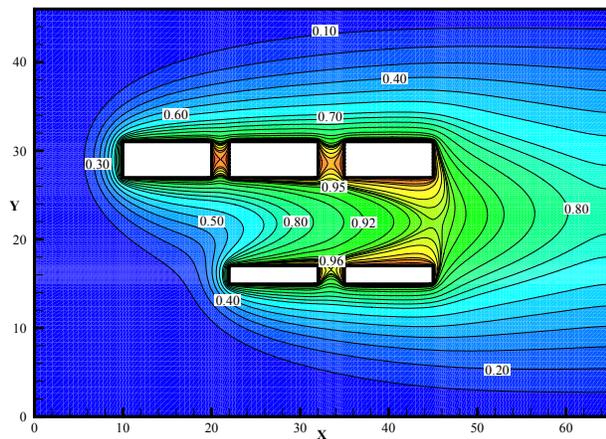


Figura 4.23a – Campo de Temperatura, $t = 80$

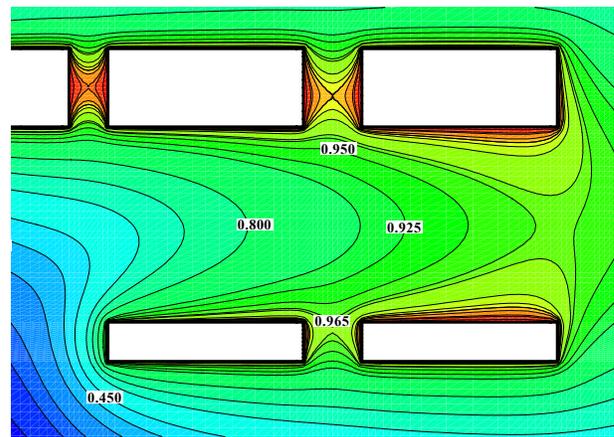


Figura 4.23b – Campo de Temperatura, região ampliada

CAPÍTULO 5

Soluções de Problemas Convectivo-Difusivos Tridimensionais

Como já foi dito no texto, o início desse trabalho se dá no código desenvolvido por Lima (2005) para o cálculo de escoamentos de fluidos bidimensionais laminares e turbulentos.

Na primeira versão obtida do código tridimensional, utilizou-se o elemento tetraedro com dez pontos nodais. Como, depois de vários testes o código não convergia, resolveu-se voltar para o elemento tetraedro com quatro nós. Com este, obteve-se resultados para um problema convectivo-difusivo. Acontece que para utilizar esse elemento na solução do campo de velocidades é conveniente utilizar um campo de pressão constante, o que pode dificultar a convergência se a malha não for bem refinada. A partir daí passou-se a fazer testes com o elemento hexaedro. Inicialmente o hexaedro linear de oito nós que tem a mesma deficiência do tetraedro de quatro nós para simulação do campo de escoamento. E, posteriormente, o elemento hexaedro de vinte e sete nós (elemento quadrático) que é apropriado para simulação quadrática das velocidades e linear do campo de pressão, o que satisfaz a condição de Brezzi-Babuska e evita soluções não realísticas, como acontece em interpolações co-localizadas de volumes finitos se certos cuidados não forem tomados.

Para problemas convectivos-difusivos que utiliza como elemento o hexaedro de oito pontos nodais foi desenvolvido um outro programa e posteriormente, criou-se uma versão para o elemento hexaedro com vinte e sete pontos nodais, porém ainda não foi possível obter soluções para as componentes de velocidade u , v , w e pressão. Principalmente, devido a deficiências do método de solução do sistema algébrico que é o método frontal. O método frontal é um método

de eliminação de Gauss localmente em um conjunto de elementos e , portanto, carece de um pivoteamento e quando o pivô se anula o programa pára o processamento.

A equação resolvida no presente caso é a equação de transporte tridimensional que tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial(U\phi)}{\partial X} + \frac{\partial(V\phi)}{\partial Y} + \frac{\partial(W\phi)}{\partial Z} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{1}{Pe} \frac{\partial \phi}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{1}{Pe} \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{1}{Pe} \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right) + S_\phi \quad (5.1)$$

A equação de transporte (5.1) pode representar transporte de entalpia no caso de transferência de calor; transporte de um poluente no caso de transporte de massa; ou outro escalar qualquer como energia cinética turbulenta ou dissipação da energia cinética turbulenta; ou mesmo, cada uma das equações de quantidade de movimento no caso do campo de escoamento.

Agora, apresentam-se resultados obtidos a partir da formulação de um método de elementos finitos baseado em volumes de controle para a solução de problemas convectivo-difusivos tridimensionais.

5.1 – Difusão – Convecção em uma Cavidade Cúbica

Os domínios para este problema estão ilustrados na Figura 5.1 e foram baseados naqueles apresentados por Ledain Muir e Baliga (1986).

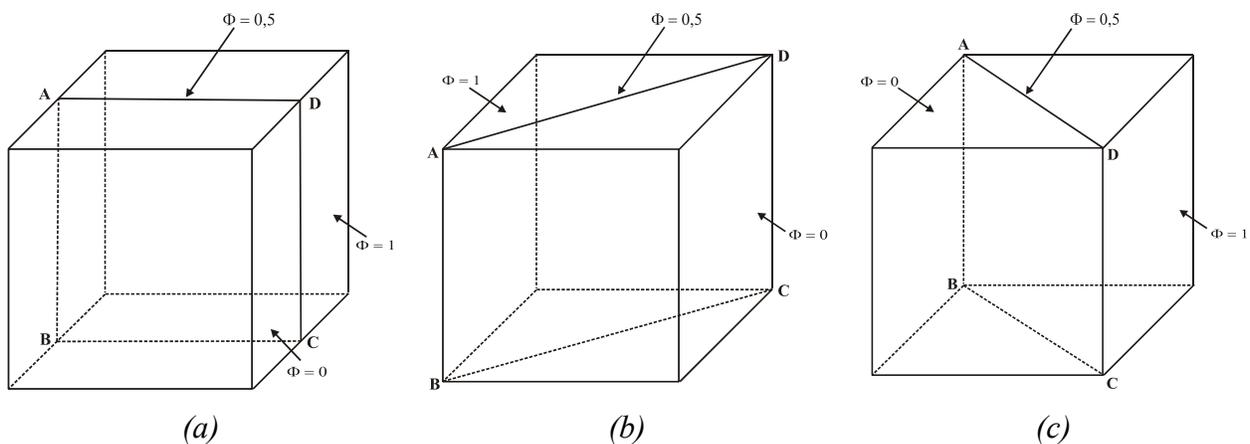


Figura 5.1 – Geometria e condições de contorno: (a) caso 1, (b) caso 2, (c) caso 3.

Em ambos os casos, o cubo de arestas unitárias foi dividido em duas partes iguais pelo plano $ABCD$. As condições de contorno para o computo do escalar ϕ (concentração ou temperatura), foi definido como sendo $\phi = 1$ de um lado do plano $ABCD$, do outro lado, $\phi = 0$ e

$\phi = 0,5$ nos pontos onde este plano intercepta com o contorno do domínio. Na discretização, utilizou-se uma malha com 1000 elementos, resultando em 9.261 pontos nodais e 37.044 variáveis.

Em conformidade com Ledain Muir e Baliga (1986), os perfis de velocidades nos três casos considerados são os seguintes:

$$\text{Caso 1: } u = \frac{1}{\sqrt{2}}; v = \frac{1}{\sqrt{2}}; w = 0; \quad (5.2)$$

$$\text{Caso 2: } u = \frac{1}{\sqrt{3}}; v = \frac{1}{\sqrt{3}}; w = \frac{-1}{\sqrt{3}}; \quad (5.3)$$

$$\text{Caso 3: } u = \frac{1}{\sqrt{3}}; v = \frac{1}{\sqrt{3}}; w = \frac{1}{\sqrt{3}}; \quad (5.4)$$

O perfil do escalar ϕ (concentração ou temperatura) na posição: $x = y = 0,5$, em função de z pode ser observado nas Figuras 5.2, 5.3 e 5.4. Como esperado, é evidente a influência do número de Peclet (Pe) nos resultados apresentados. O comportamento em ambos os casos se assemelham, nota-se que para baixos valores de Peclet a difusão predomina no problema. Já, para números de Peclet mais elevados, o problema torna-se convectivo dominante. A partir de um determinado valor para Peclet, a solução começa a apresentar oscilações que podem ser devidas a uma insuficiência de refino na malha.

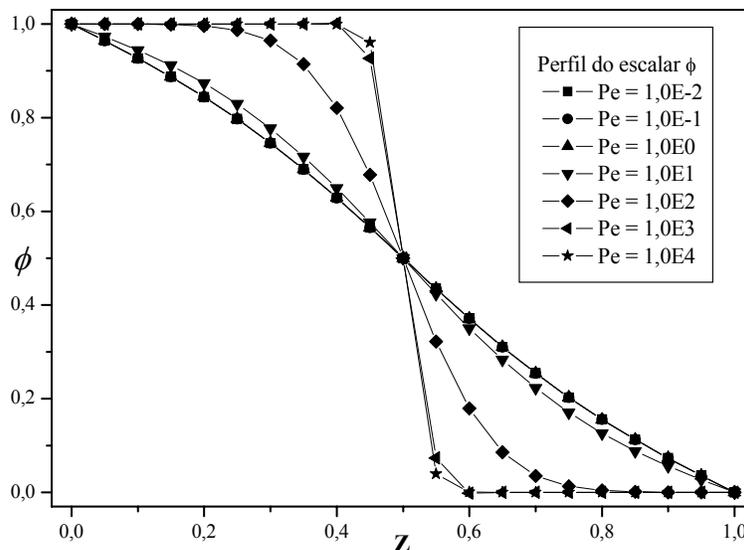


Figura 5.2 – Perfil do escalar ϕ , caso 1.

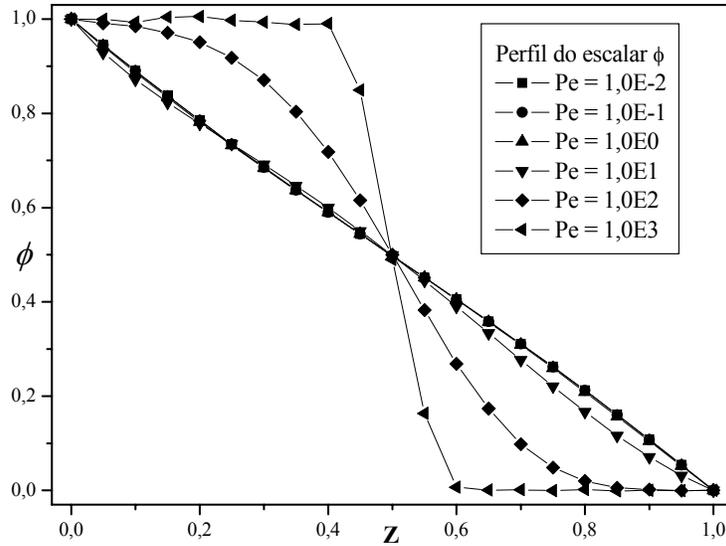


Figura 5.3 – Perfil do escalar ϕ , caso 2.

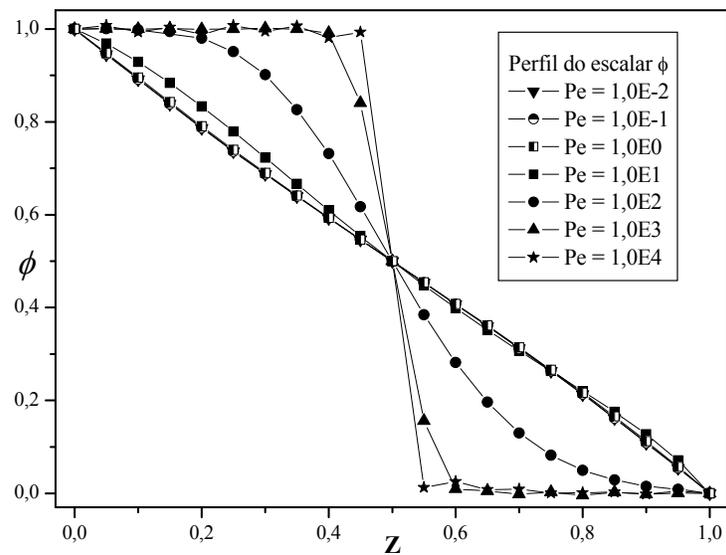
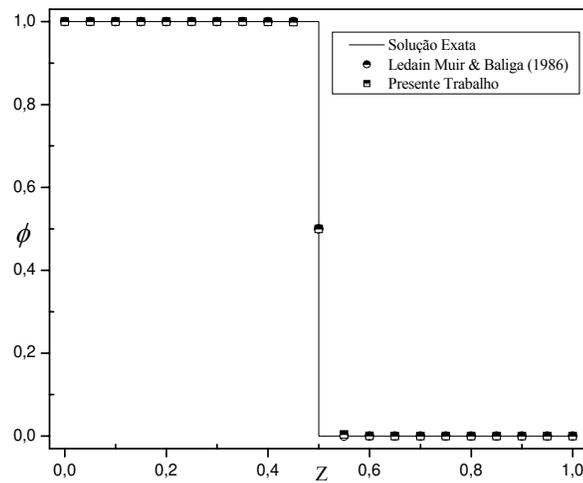


Figura 5.4 – Perfil do escalar ϕ , caso 3.

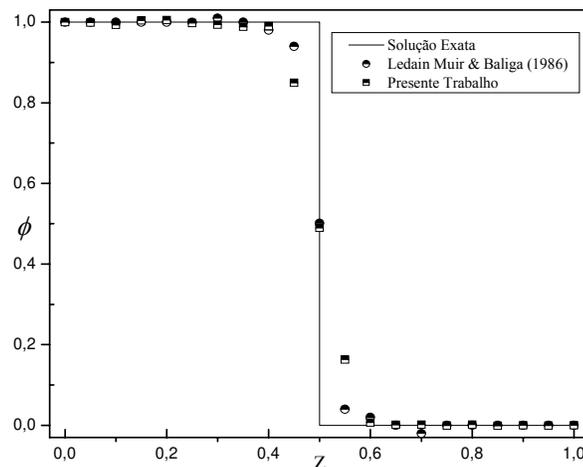
No caso 1, a distribuição de temperatura ou concentração tende mais rapidamente a valores próximos de zero, isso pode ser notado através de comparação da Figura 5.2 com as Figuras 5.3 e 5.4.

As Figuras 5.5a–c apresentam uma comparação dos resultados do presente trabalho com os de Ledain Muir e Baliga (1986), juntamente com a solução exata do problema para os três casos considerados. No caso 1, o escoamento é paralelo com o plano xy , então todos os resultados numéricos obtidos são idênticos à solução exata, como mostrado na Figura 5.5a. Nos outros dois

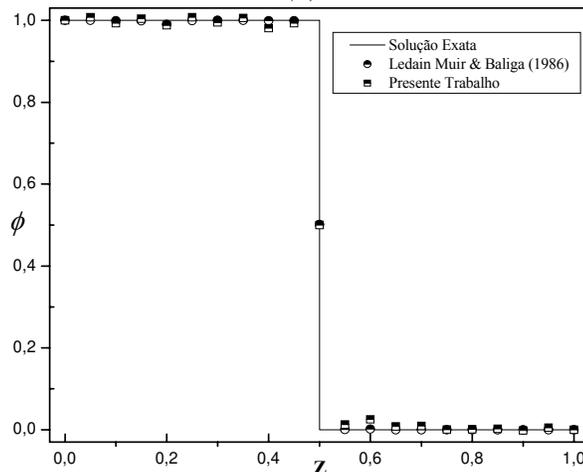
casos, os resultados se assemelham com os apresentados por Ledain Muir e Baliga (1986) e exibem pequenas oscilações quando comparados com a solução exata.



(a)



(b)



(c)

Figura 5.5 – Perfil do escalar ϕ para $Pe = 1,0e4$, (a) caso 1, (b) caso 2, (c) caso 3.

O perfil de temperatura no plano $x = 0,5$ da cavidade cúbica para $Pe = 0,1$ no caso 1, esta ilustrado na Figura 5.6.

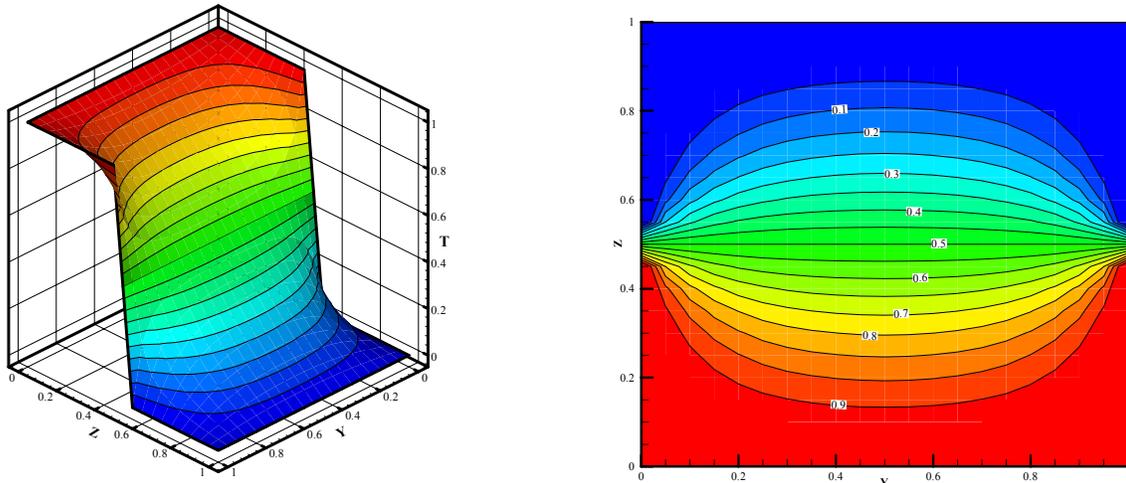


Figura 5.6 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,5$ com $Pe = 0,1$, caso 1.

Agora, as Figuras 5.7, 5.8 e 5.9 ilustram o perfil de temperatura para $Pe = 100$ em diferentes planos na cavidade.

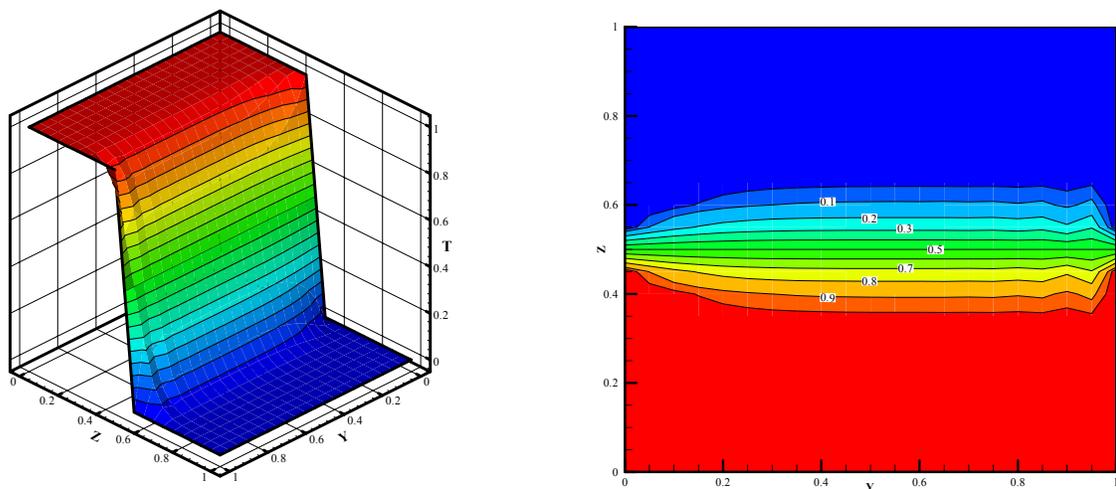


Figura 5.7 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,25$ com $Pe = 100$, caso 1.

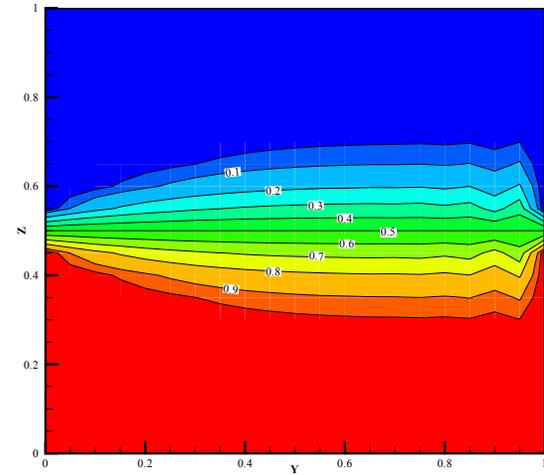
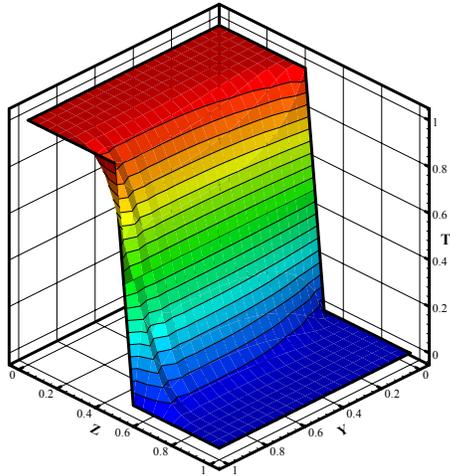


Figura 5.8 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,5$ com $Pe = 100$, caso 1.

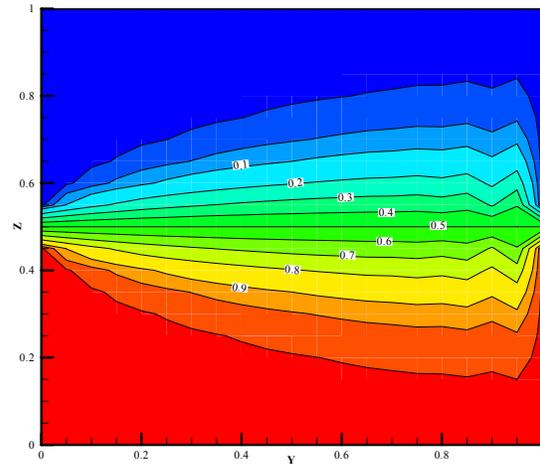
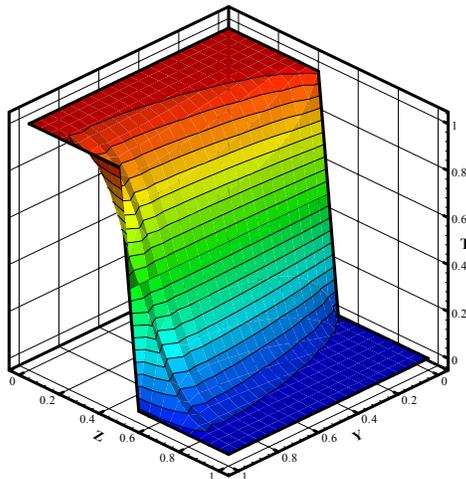


Figura 5.9 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,75$ com $Pe = 100$, caso 1.

Nas Figuras 5.10, 5.11 e 5.12 pode-se visualizar a distribuição de temperatura para $Pe = 100$ no caso 3. A distribuição de temperatura tridimensional nos casos 2 e 3 possuem o mesmo comportamento e tendências, a diferença esta na inversão no sinal da componente w do perfil de velocidade. Assim, a Figura 5.10 é uma boa representação da distribuição de temperatura para $x = 0,75$ no caso 2. O mesmo ocorre na Figura 5.12 para $x = 0,25$ no caso 2.

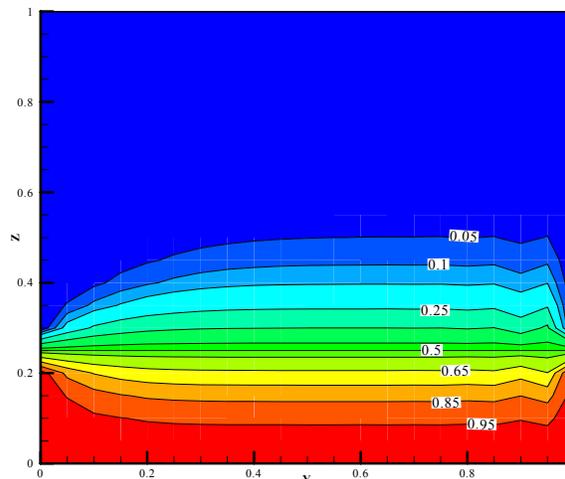
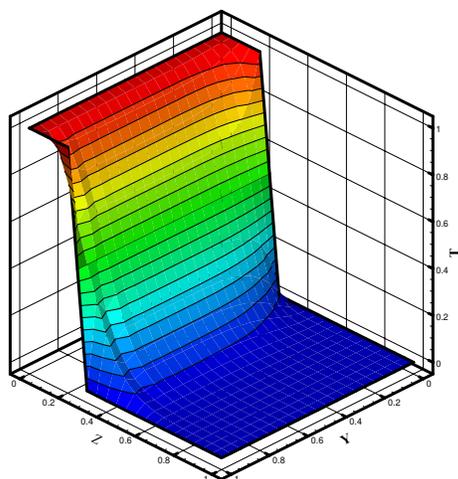


Figura 5.10 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,25$ com $Pe = 100$, caso 3.

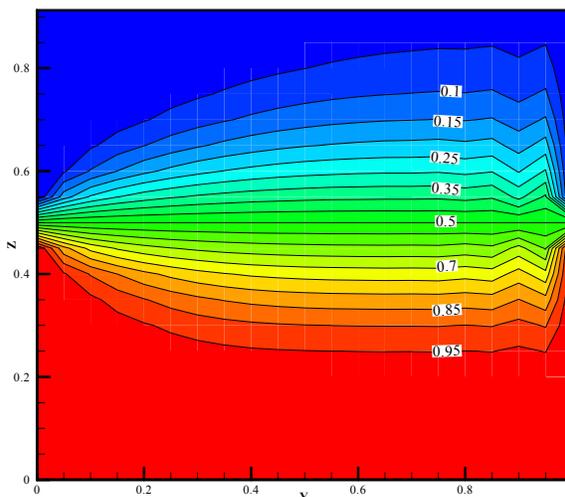
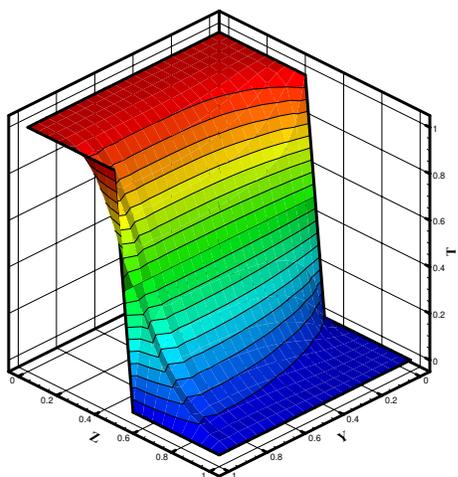


Figura 5.11 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,5$ com $Pe = 100$, caso 3.

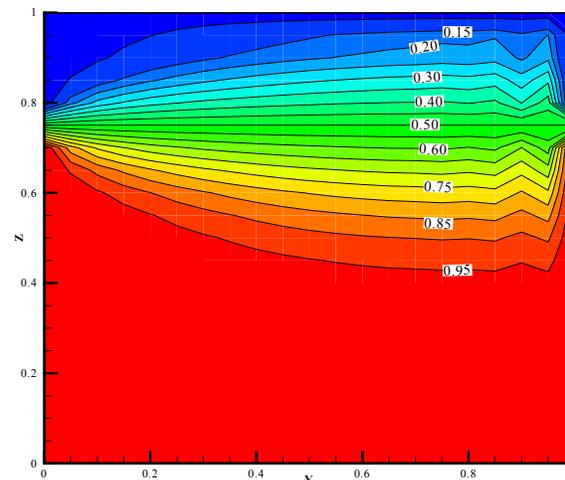
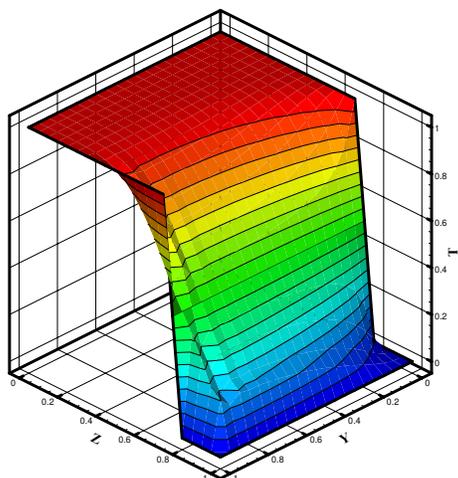


Figura 5.12 – Distribuição de Temperatura no plano $x = 0,75$ com $Pe = 100$, caso 3.

Uma vez resolvida a equação de transporte de um escalar qualquer, os resultados para a dispersão de um contaminante com número de Schmidt (Sc) fixado em 0,7 seguem os mesmos comportamentos e tendências dos já apresentados aqui para o campo de temperatura.

5.2 – Convecção – Difusão em um Canal

Um canal de $40 \times 10 \times 10$ foi adotado como domínio. Na discretização, utilizou-se 4.000 elementos o que implicam em 35.721 pontos nodais e 142.884 variáveis.

Um perfil de velocidade para escoamento laminar em dutos retangular descrito por Shah e London, (1978) foi escolhido para representar o campo de velocidades. Este perfil, apresentado a seguir já está com as dimensões do canal proposto.

$$\frac{u}{u_{max}} = \left[1 - \left(\frac{y}{5} \right)^{2,2} \right] \cdot \left[1 - \left(\frac{z}{5} \right)^{2,2} \right] \quad (5.5)$$

A condição de contorno na entrada, plano $x = 0$, é $\phi = 1$ e nos demais, exceto o plano $x = 40$ que é a saída, foi imposto condição de contorno para um escalar $\phi = 0$. A Figura 5.13 ilustra a geometria para este caso.

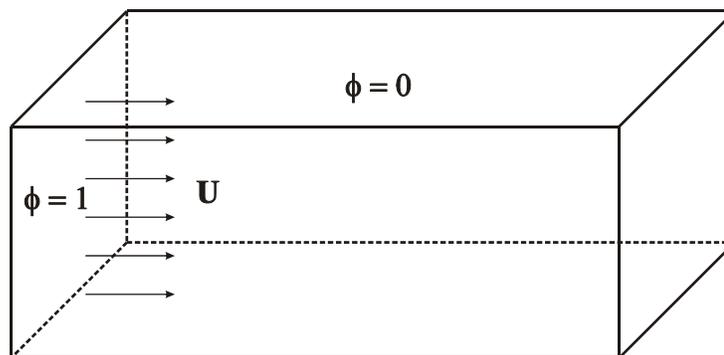


Figura 5.13 – Geometria e Condições de Contorno no Canal, caso 1

Os resultados que serão apresentados referem-se ao cálculo de um escalar ϕ (temperatura ou concentração). A Figura 5.14a mostra o perfil do escalar ϕ (temperatura ou concentração) para três valores distintos do número de Peclet (Pe). Na medida em que Pe é aumentado, o perfil vai se distanciando de seu valor inicial. A Figura 5.14b apresenta o desenvolvimento do perfil do escalar ϕ , nos planos $x = 5, 10, 15, 20, 25, 30$ e $y = 5$ em função de z . Como esperado, nota-se

que na medida em que x cresce a temperatura vai diminuindo, uma vez que, devido às condições de contorno impostas, o caso analisado refere-se a um problema de resfriamento.

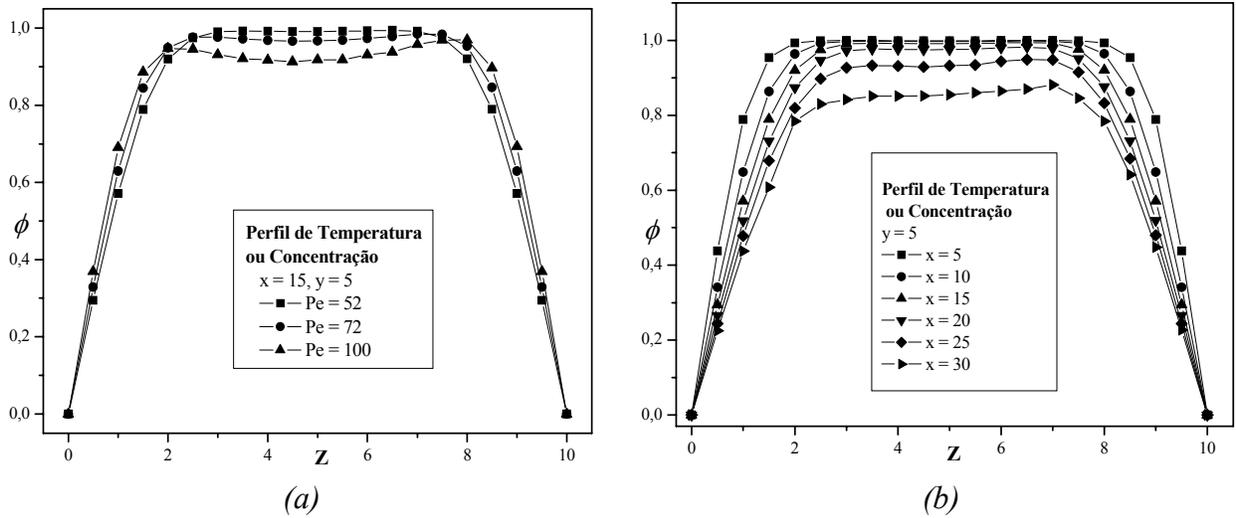


Figura 5.14 – Perfil do escalar ϕ para (a) Pe distintos e (b) com $Pe = 52$ em diferentes planos

Apesar da discussão que aqui será apresentada dizer respeito ao perfil de temperatura, os mesmos comportamentos, tendências valem para o campo de concentração levando em conta, é claro, as mesmas condições impostas no problema investigado. Agora, segue nas Figuras 5.15, 5.16 e 5.17 o perfil de temperatura ou concentração para alguns planos no canal.

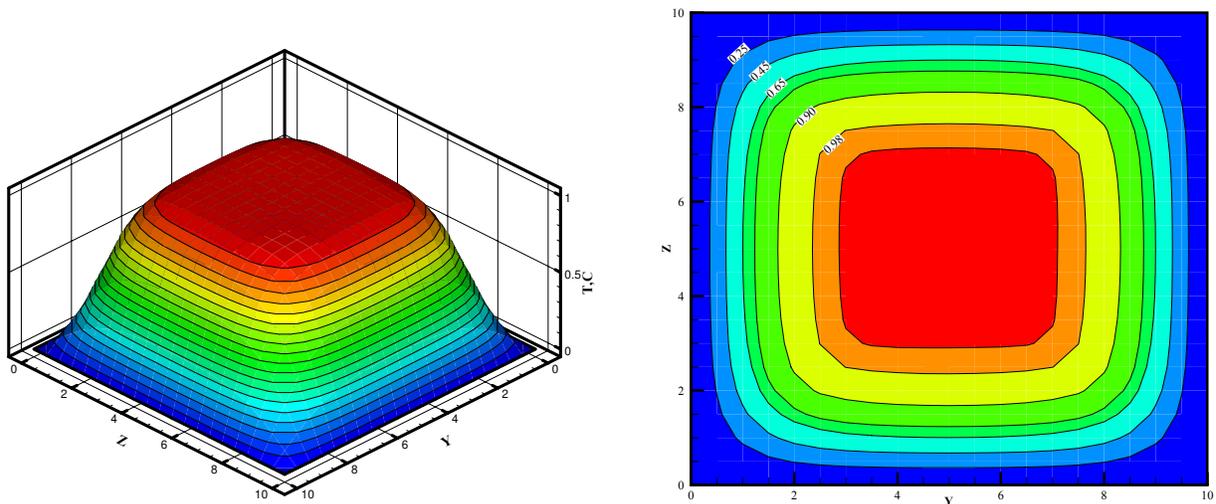


Figura 5.15– Perfil de Temperatura no plano $x = 10$ com $Pe = 52$

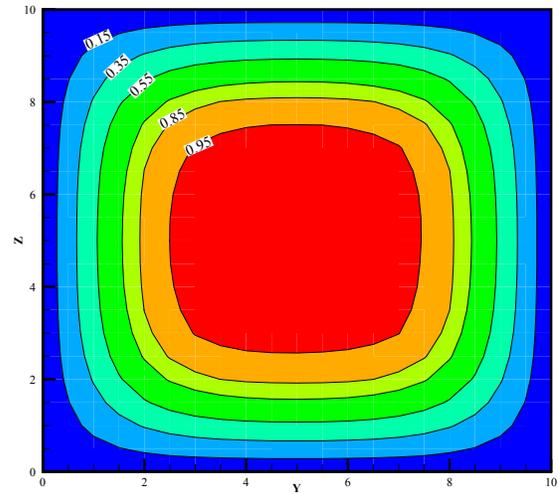
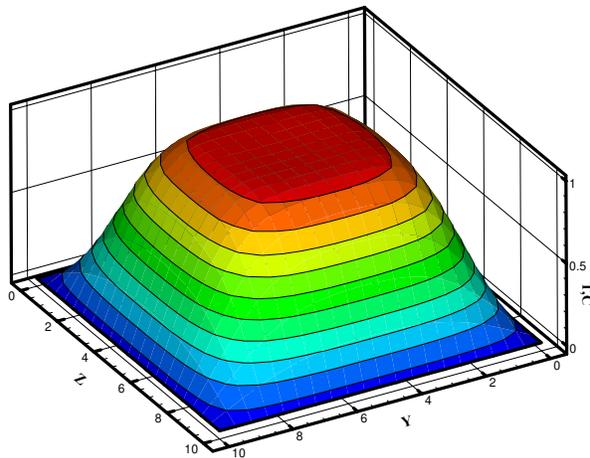


Figura 5.16– Perfil de Temperatura no plano $x = 20$ com $Pe = 52$

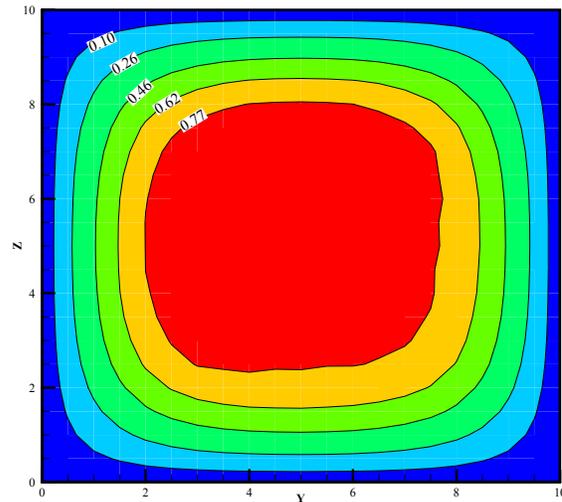
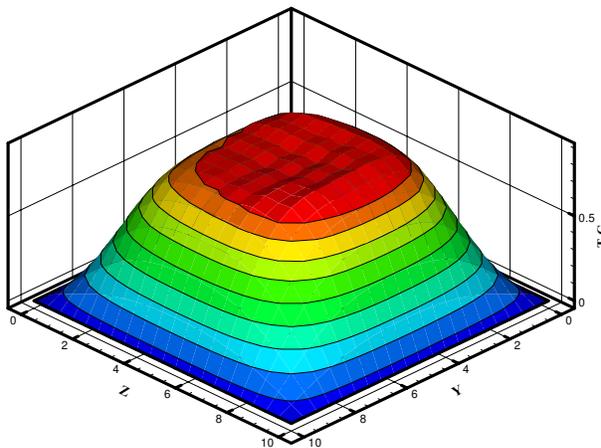


Figura 5.17 – Perfil de Temperatura no plano $x = 30$ com $Pe = 52$

Resultados para a dispersão de um contaminante cuja fonte poluidora foi fixada em um elemento localizado no solo, próximo do plano $x = 10$ foram obtidos para o número de Schmidt igual a 0,2. A Figura 5.18 mostra o comportamento da concentração ao longo do canal. O salto na concentração é devido coincidir com o local no qual a fonte poluidora foi fixada.

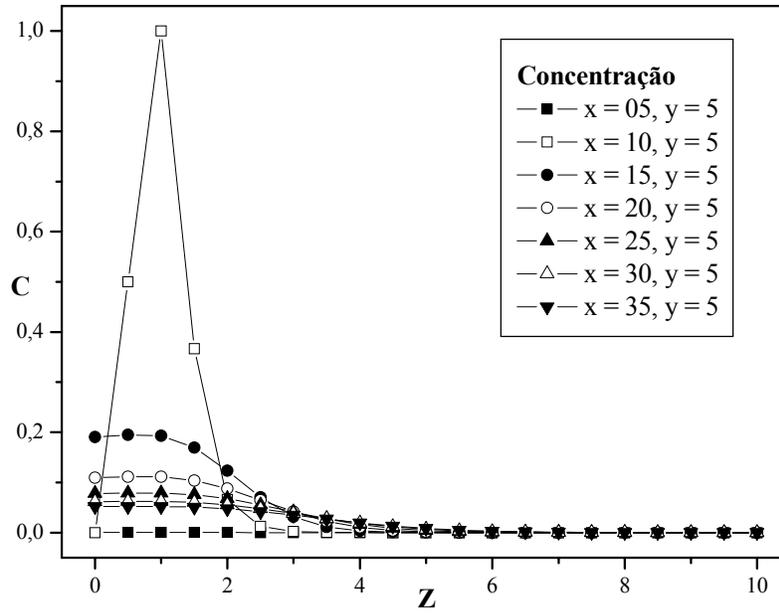


Figura 5.18 – Linhas de concentração ao longo do canal

Agora, os campos de concentração podem ser observados nas Figuras 5.19a–d para diferentes planos.

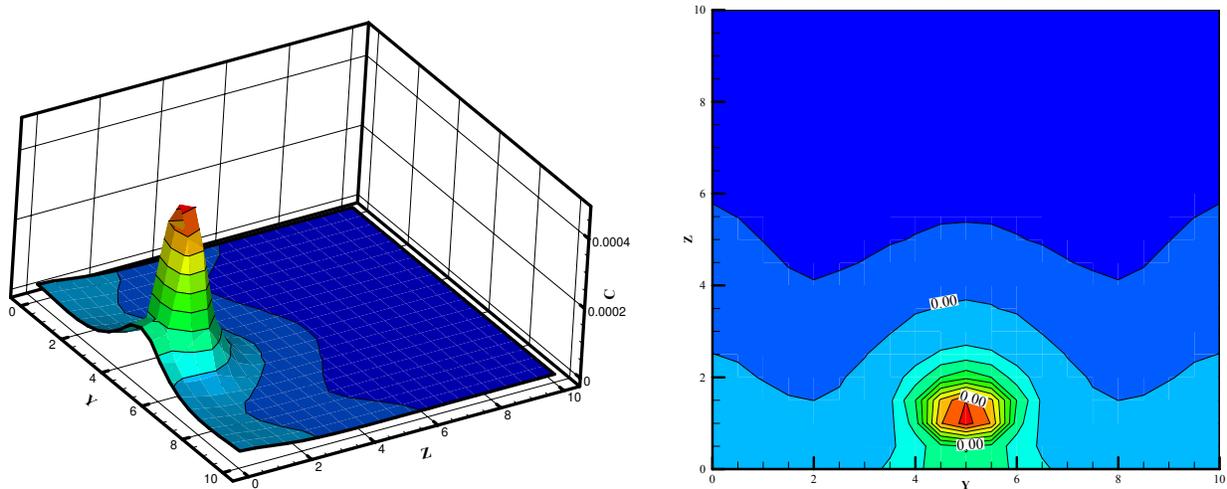


Figura 5.19a – Campo de concentração no plano $x = 5$

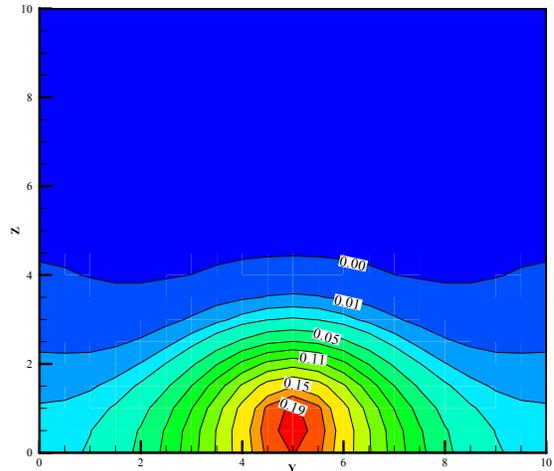
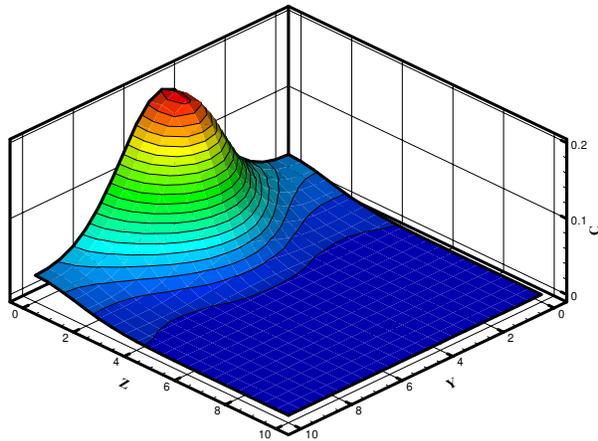


Figura 5.19b – Campo de concentração no plano $x = 15$

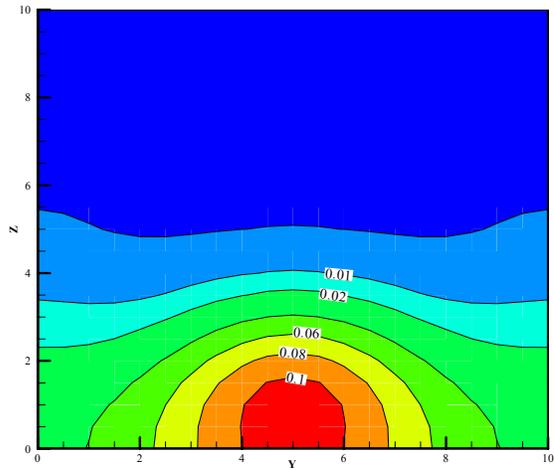
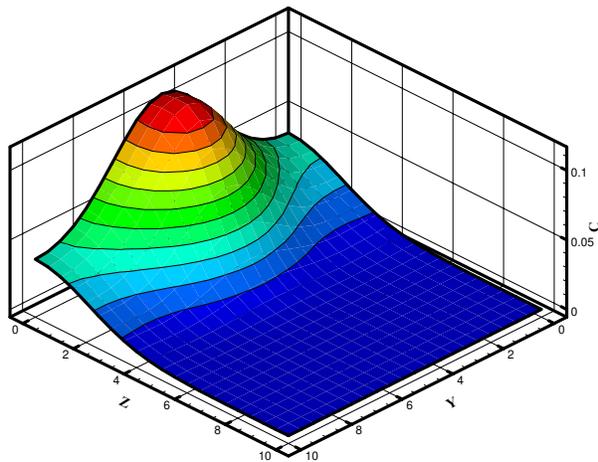


Figura 5.19c – Campo de concentração no plano $x = 20$

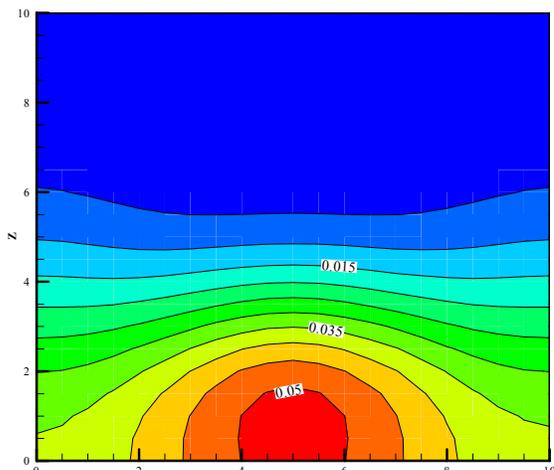
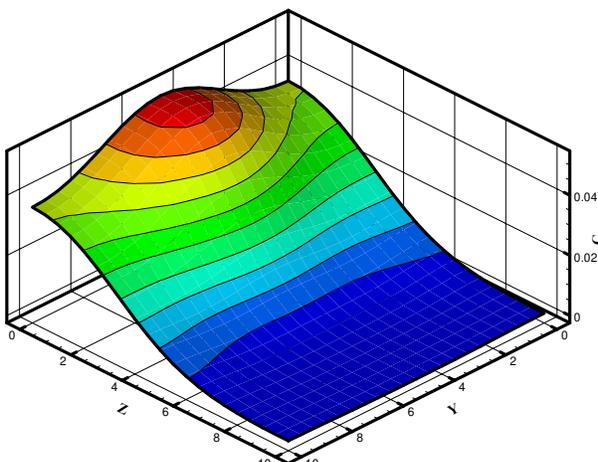


Figura 5.19d – Campo de concentração no plano $x = 35$

Na seqüência, têm-se resultados para a dispersão de um contaminante com a fonte poluidora fixada no centro do canal, na intersecção dos planos $x = 10$, $y = 5$ e $z = 5$. A Figura 5.20 mostra o comportamento da concentração ao longo do canal.

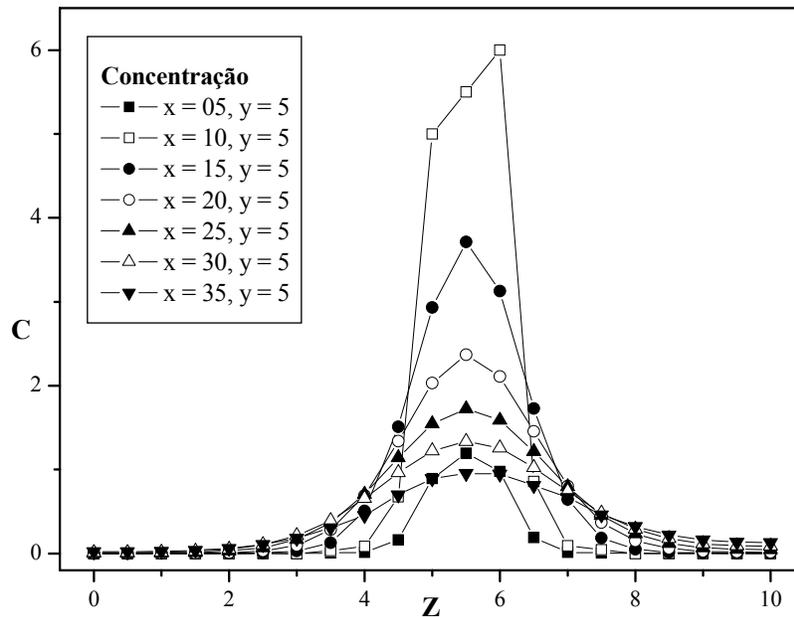


Figura 5.20 – Linhas de concentração ao longo do canal

A título de ilustração, os campos de concentração podem ser observados nas Figuras 5.21a – d para diferentes planos e número de Schmidt igual a 0,2.

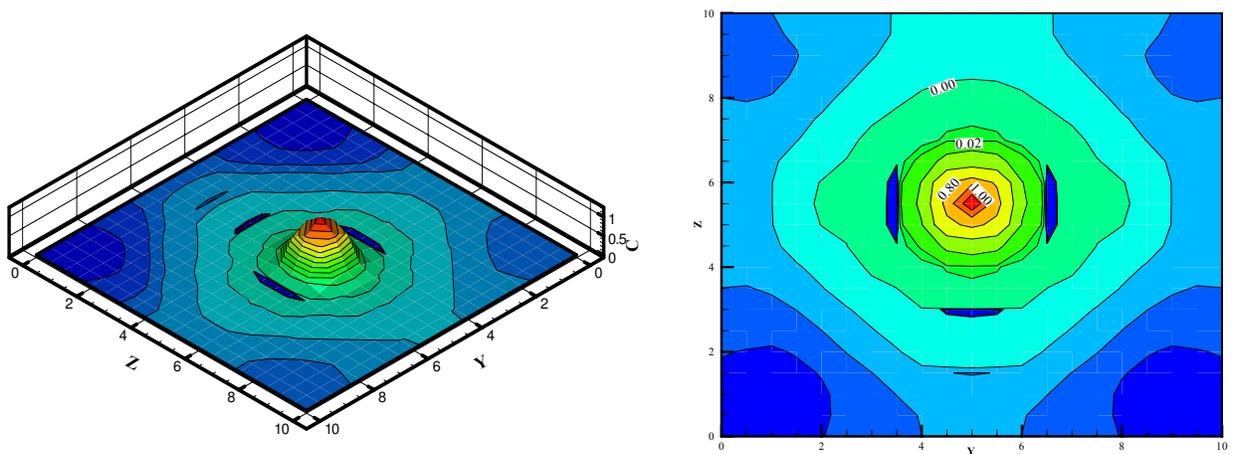


Figura 5.21a – Campo de concentração no plano $x = 5$

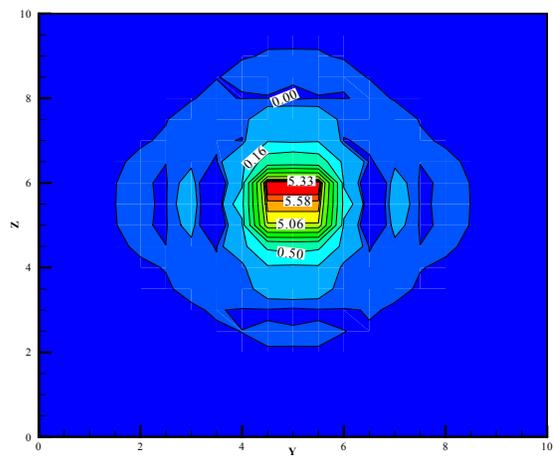
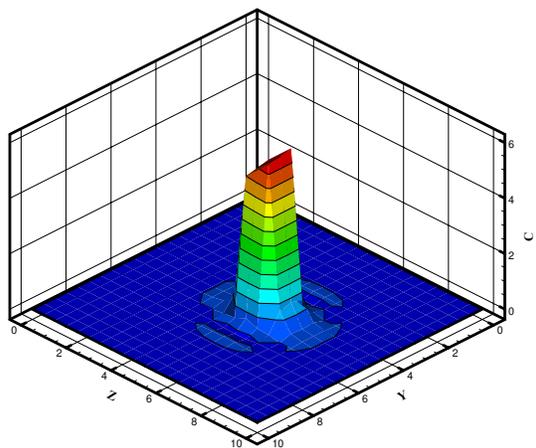


Figura 5.21b – Campo de concentração no plano $x = 10$

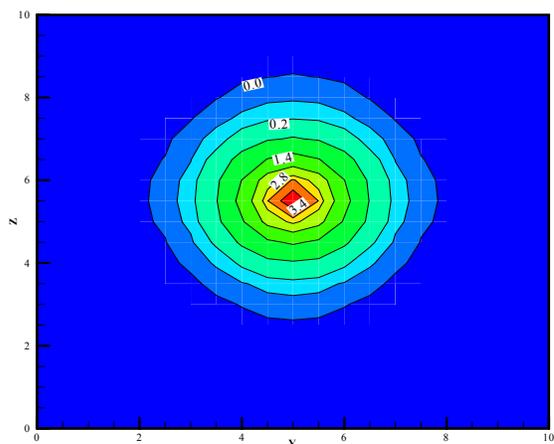
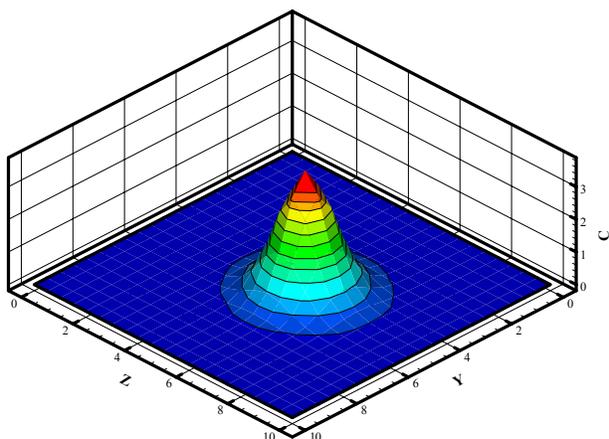


Figura 5.21c – Campo de concentração no plano $x = 15$

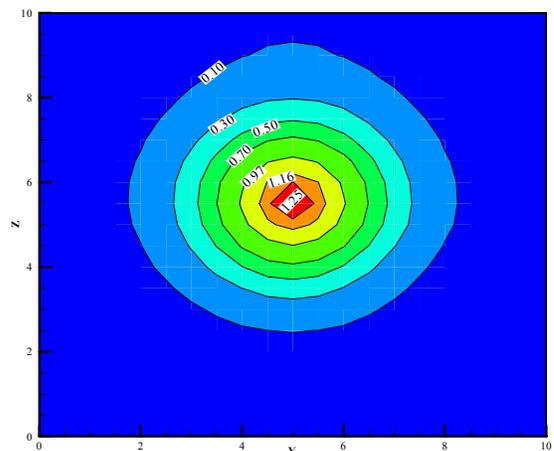
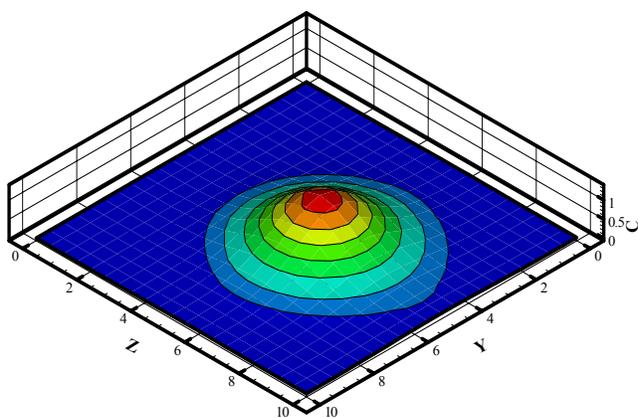


Figura 5.21d – Campo de concentração no plano $x = 30$

Agora, a condição de contorno na entrada do canal, plano $x = 0$, é $\phi = 0$ e nos demais, exceto o plano $x = 40$, foi imposto condição de contorno para o escalar $\phi = 1$. A Figura 5.22 ilustra a geometria e as condições de contorno para este caso.

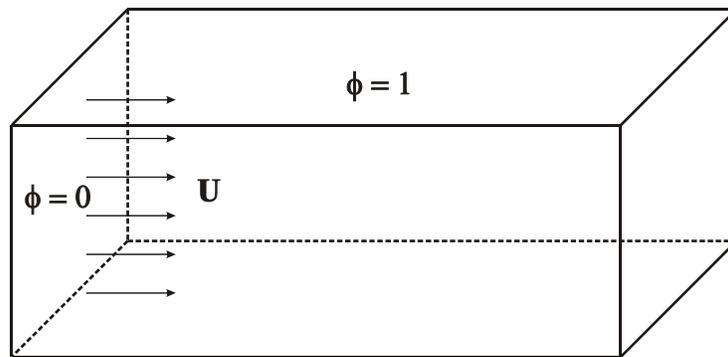


Figura 5.22 – Geometria e Condições de Contorno no Canal, caso 2

A Figura 5.23a mostra o perfil de temperatura ou concentração para alguns números de Peclet e na Figura 5.23b tem-se o desenvolvimento do perfil de temperatura ou concentração, nos planos $x = 5, 10, 15, 20, 25, 30$ e $y = 5$ em função de z . Como esperado, nota-se que na medida em que x cresce a temperatura vai aumentando, uma vez que, o caso analisado refere-se a um problema de aquecimento.

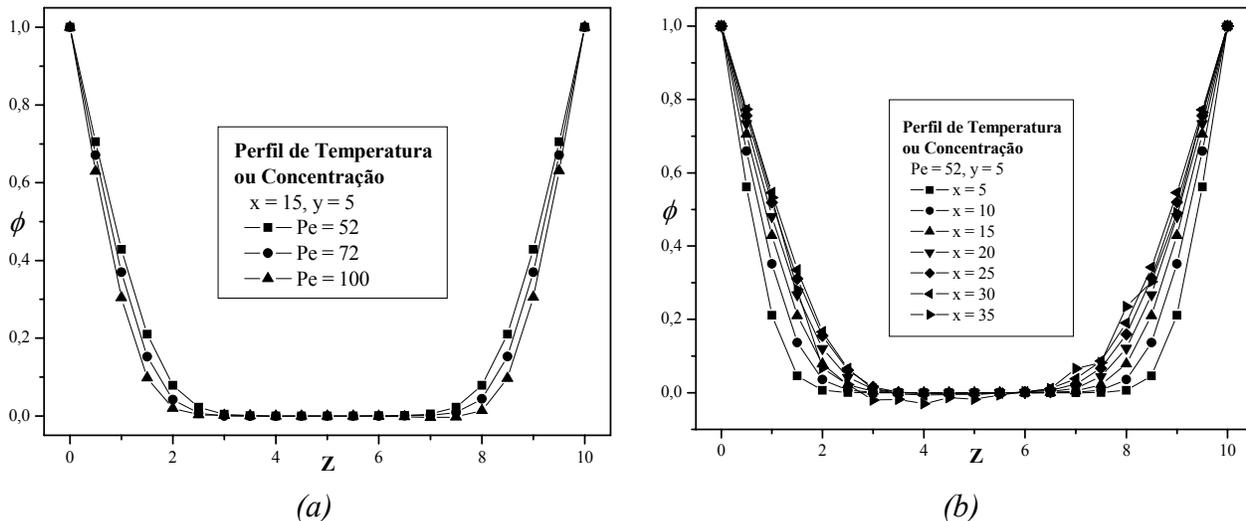


Figura 5.23 – Perfil do escalar ϕ para (a) Pe distintos e (b) com $Pe = 52$ em diferentes planos

As Figuras 5.24, 5.25 e 5.26 ilustram o campo de temperatura ou concentração para alguns planos no canal, para o segundo caso testado. Como já foi dito anteriormente, nota-se o comportamento esperado, ou seja, o aumento na temperatura na medida em que x se distancia do plano $x = 0$.

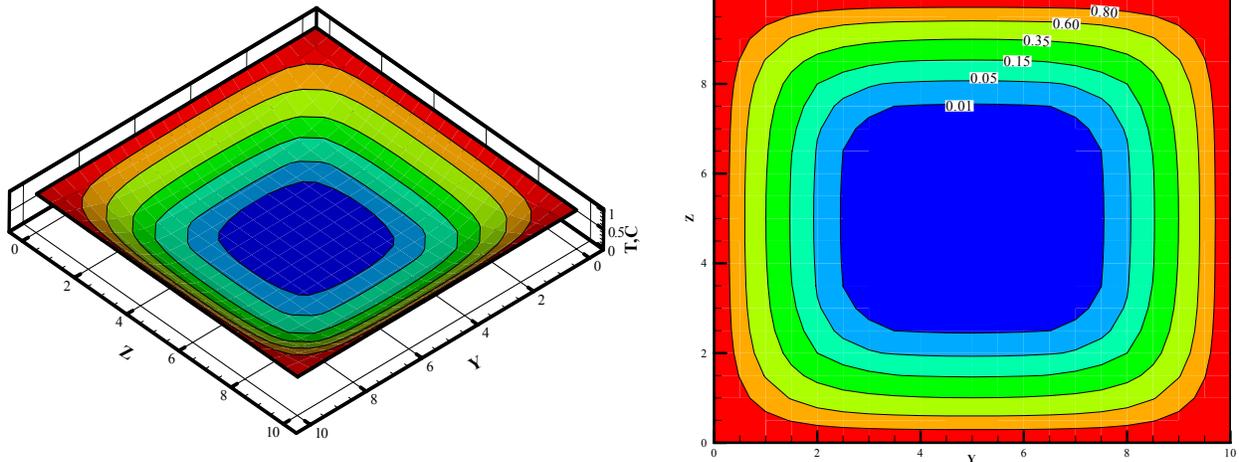


Figura 5.24 – Perfil de Temperatura no plano $x = 10$ com $Pe = 52$

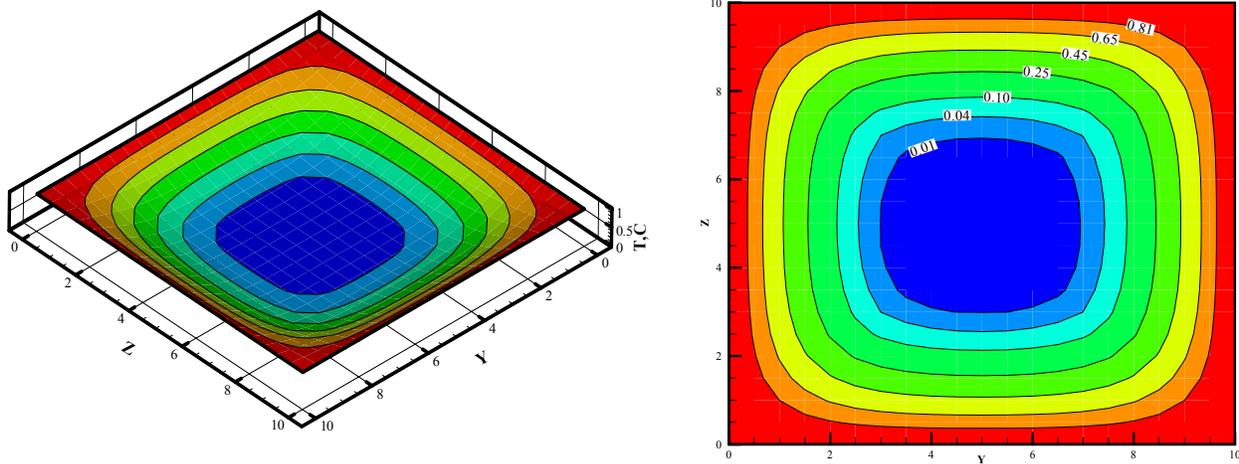


Figura 5.25 – Perfil de Temperatura no plano $x = 20$ com $Pe = 52$

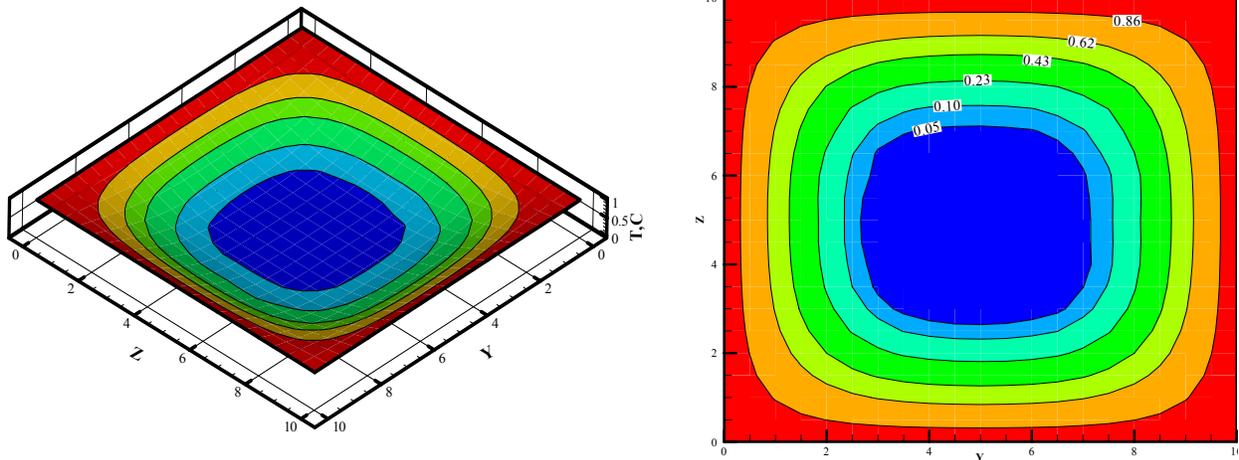


Figura 5.26 – Perfil de Temperatura no plano $x = 30$ com $Pe = 52$

Outro caso investigado no presente trabalho refere-se aquele no qual a origem do sistema de coordenadas cartesianas coincide com o centro geométrico do plano $x = 0$. Dessa forma, o canal foi dividido em quatro canais idênticos e analisou-se o perfil de temperatura ou concentração em apenas um desses novos canais, devido à condição de simetria imposta na parede. As dimensões do canal adotado para análise são $40 \times 1 \times 2$ e utilizou-se na discretização 4.000 elementos o que implica em 35.301 pontos nodais e 141.204 variáveis. A Figura 5.27 ilustra a geometria e as condições de contorno em um problema de resfriamento ou um caso onde o poluente é liberado na entrada do canal.

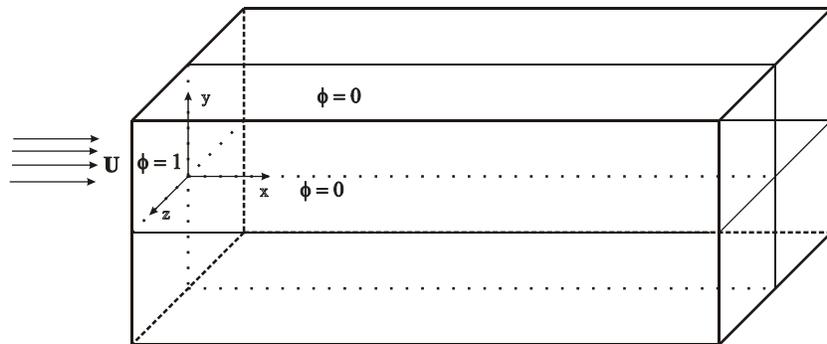


Figura 5.27: – Geometria e Condições de Contorno no Canal, caso 3

O perfil de velocidade escolhido para representar o campo de velocidades esta de acordo com Shah e London, (1978) e é apresentado a seguir.

$$\frac{u}{u_{\max}} = \left[1 - \left(\frac{y}{1} \right)^{2,05} \right] \cdot \left[1 - \left(\frac{z}{2} \right)^{3,02} \right] \quad (5.6)$$

O perfil de temperatura ou concentração para os números de Peclet 52, 72 e 100 em $y = 0,5$, $x = 5$ e 15 é apresentado na Figura 5.28a,b, respectivamente. Na Figura 5.29 tem-se o desenvolvimento do perfil em função do eixo z para o número de Peclet igual a 52 em alguns planos em x . Pode-se observar o comportamento e tendências esperado em problemas desta natureza.

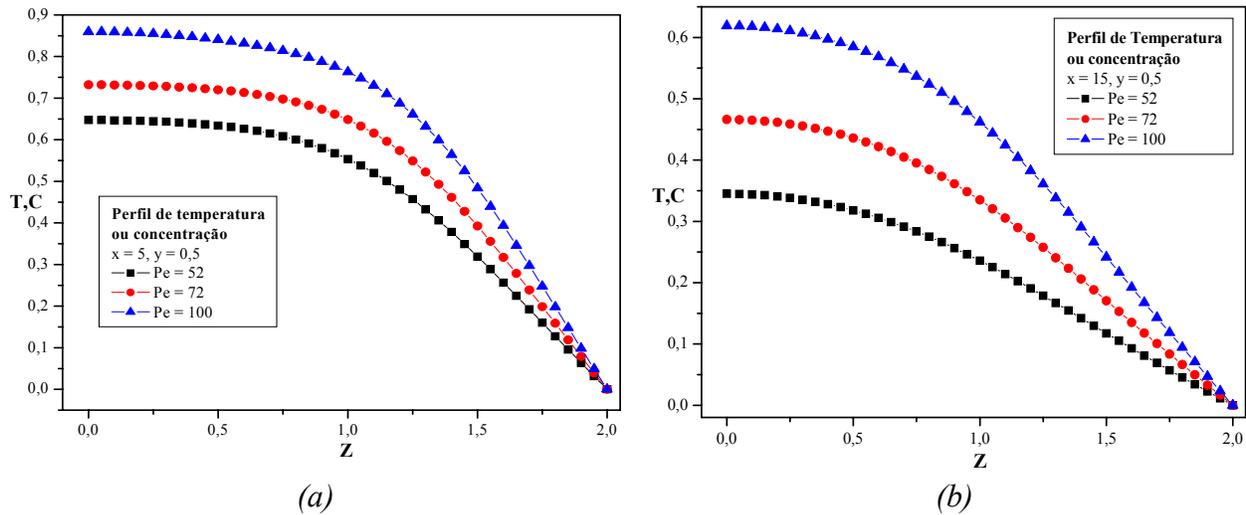


Figura 5.28 – Perfil do escalar ϕ para Pe distintos em (a) $x = 5$, $y = 0,5$ e (b) $x = 15$, $y = 0,5$

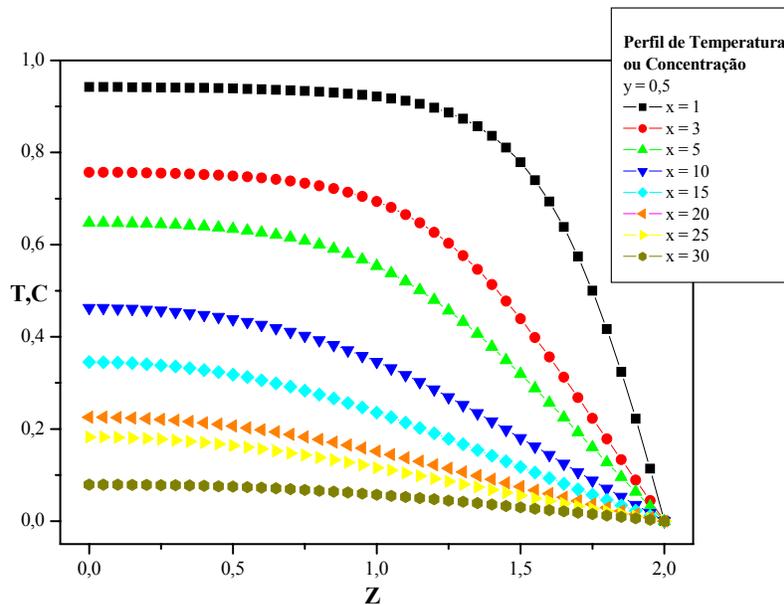


Figura 5.29 – Perfil do escalar ϕ para $Pe = 52$.

A distribuição de temperatura ou concentração para o caso de resfriamento com $Pe = 52$ pode ser visto nas Figuras 5.30, 5.31 e 5.32.

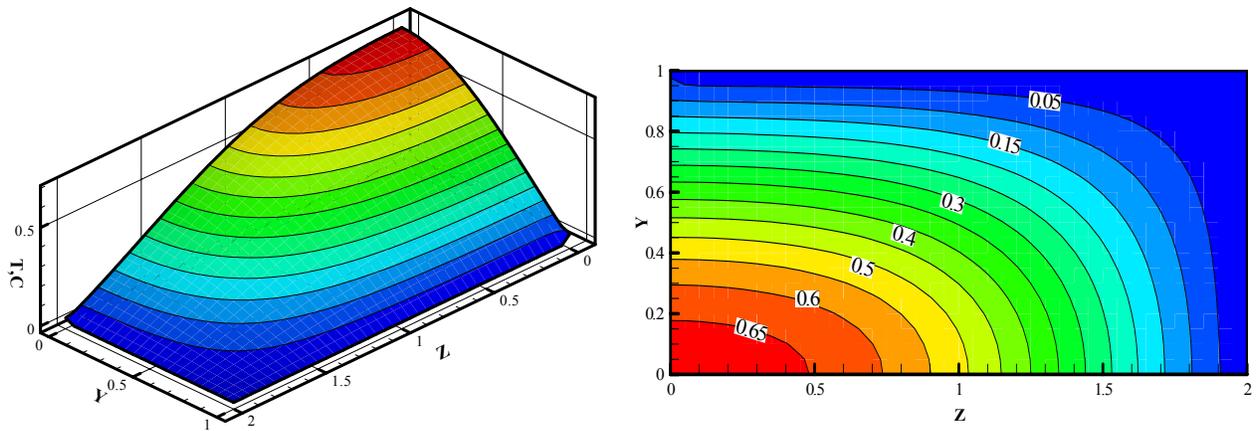


Figura 5.30 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 10$ com $Pe = 52$

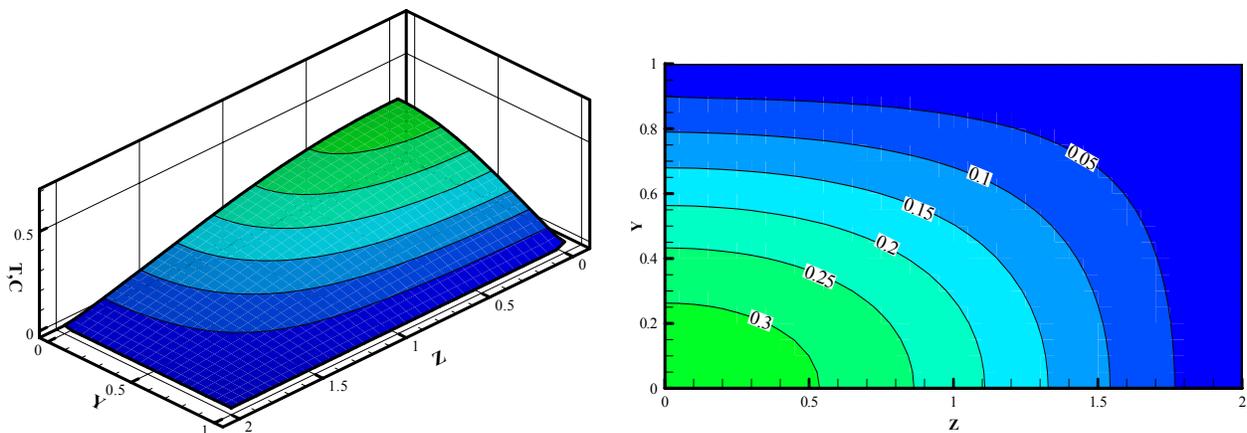


Figura 5.31 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 20$ com $Pe = 52$

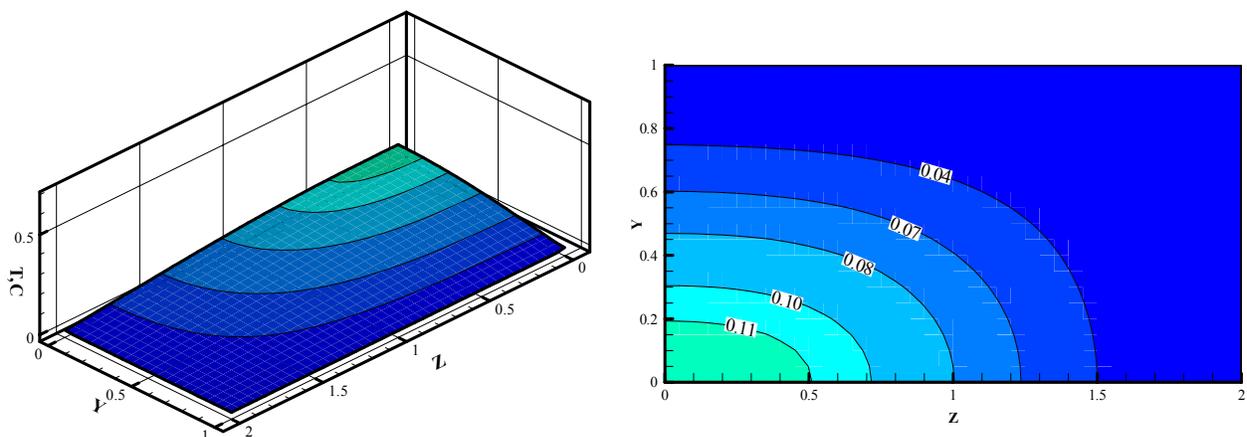


Figura 5.32 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 30$ com $Pe = 52$

As condições de contorno mostradas na Figura 5.27 foram invertidas com o objetivo de simular um problema de aquecimento ou um caso, no qual o poluente é liberado em todo o comprimento das paredes do canal. As Figuras 5.33, 5.34 e 5.35 mostram a distribuição de temperatura ou concentração em algumas faces do canal. Observa-se que o aquecimento ou a dispersão do poluente acontece rapidamente no decorrer do processo.

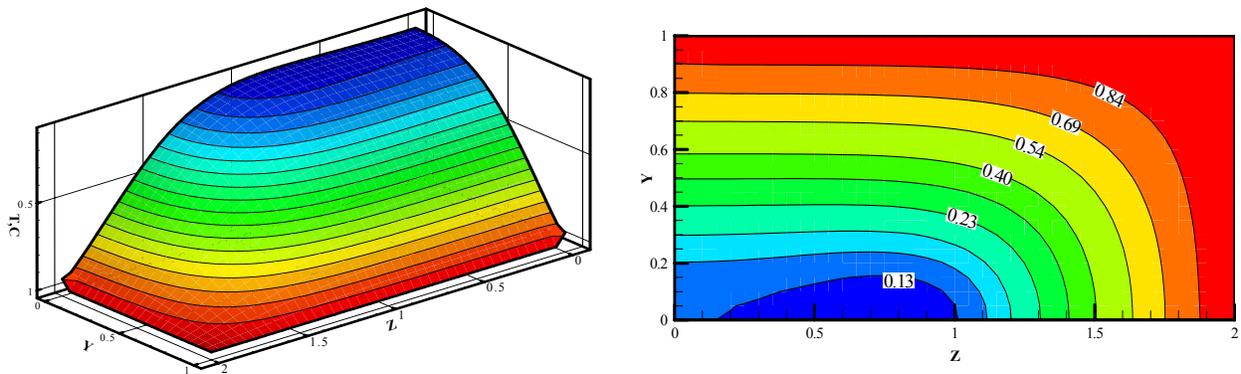


Figura 5.33 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 3$ com $Pe = 52$

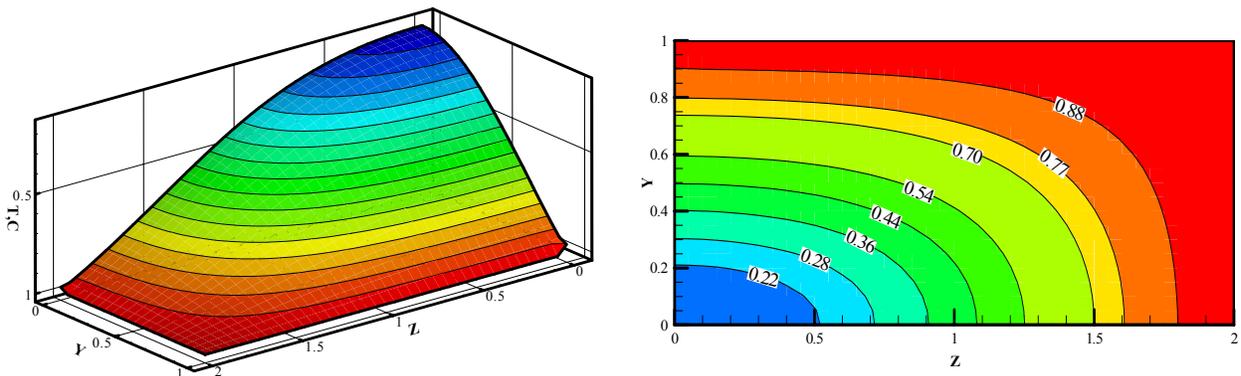


Figura 5.34 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 10$ com $Pe = 52$

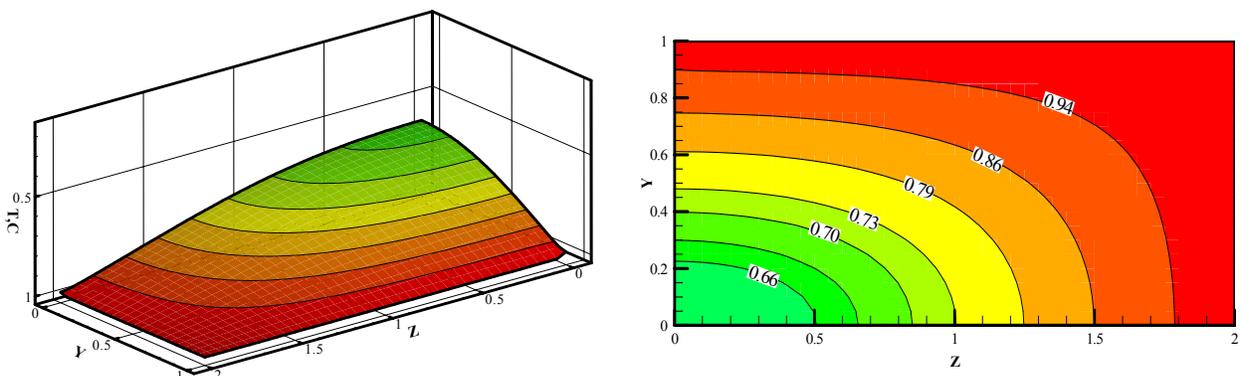


Figura 5.35 – Distribuição de temperatura ou concentração no plano $x = 15$ com $Pe = 52$

CONCLUSÃO E SUGESTÃO PARA FUTUROS TRABALHOS

Neste trabalho um método de elementos finitos baseado em volumes de controle (CVFEM) foi aplicado à simulação de escoamentos de fluidos com transferência de calor e massa. No caso de escoamentos bidimensionais, o campo de escoamento foi resolvido através da solução das equações de Navier-Stokes acopladas ou não à equação de energia térmica. No caso de escoamentos tridimensionais, apenas a equação de transporte foi resolvida usando elementos hexaédricos de oito nós (elemento linear) e vinte e sete pontos nodais (elemento quadrático). Testes foram feitos com elementos tetraédricos de quatro nós (lineares) e dez nós (quadráticos), mas as soluções apresentaram muitas oscilações. Tetraedros que são mais apropriados para malhas não estruturadas têm de ser melhor investigados em futuros trabalhos.

Os resultados obtidos nos casos simulados apresentaram o comportamento qualitativo e quantitativo esperado concordando com resultados da literatura. No caso bidimensional a complicação é o fato de se considerar obstáculos no domínio do escoamento. Isto dificulta bastante o processo de convergência quando o número de Reynolds aumenta. Desta forma, ainda não foi possível simular casos de números Reynolds realmente elevados, o que requer um tempo de simulação elevado, devido à exigência de malhas muito refinadas. O caso tridimensional leva a cálculos com um elevado número de variáveis e muito tempo de processamento nos computadores disponíveis. Uma dificuldade neste tipo de solução foi a falta de um gerador de malha para o elemento de vinte e sete nós, que é a extensão natural do elemento de nove nós usado no caso bidimensional. Só, recentemente, se teve acesso a um gerador para este tipo de elemento. No caso de usar um elemento linear (oito nós) teria-se que refinar bastante a malha para se ter soluções satisfatórias.

Uma outra deficiência que ainda não foi sanada foi o método de solução do sistema linear: método frontal que é eficiente para computadores de pequeno porte, mas que demanda um tempo de computação elevado e as vezes falha na definição do pivô, parando o processo de solução quando o pivô se anula ou é menor do que um determinado valor. De qualquer forma, um protótipo de programa está construído e, embora, o campo de escoamento ainda não tenha sido simulado nos casos tridimensionais, o programa criado poderá ser usado sem grandes modificações para solução das equações de Navier-Stokes, se for adotada a estratégia de solução segregada daquelas equações, pois, cada uma delas pode ser considerada como uma equação de transporte que foi resolvida neste trabalho.

Vários testes ainda devem ser realizados, mesmo nos casos de escoamentos bidimensionais com obstáculos colocados no domínio de cálculo para elevados números de Reynolds. Pois o método ainda apresenta problemas de convergência para os refinamentos de malha que são possíveis para os computadores disponíveis na realização deste trabalho. No caso tridimensional, o programa construído tem de ser aperfeiçoado para cálculo de campo de velocidades e seja possível simular situações mais realísticas de dispersão de poluentes no meio ambiente.

Como conclusão final acredita-se que este trabalho foi mais um passo no método CVFEM desenvolvido. Os casos de escoamentos com altos números de Reynolds ainda representam um desafio que tem de ser vencido em trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Baliga, B.R. & Patankar, S.V. A new finite-element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer*, vol. 3, pp. 393-409, 1980.
- Baliga, B.R. & Patankar, S.V. A control volume finite-element method for two-dimensional fluid flow and heat transfer. *Numerical Heat Transfer*, vol. 6, pp. 245-261, 1983.
- Baliga, B. R.; Pham, T. T. & Patankar, S. V. Solution of some two-dimensional incompressible fluid flow and heat transfer problems, using a control volume finite-element method. *Numerical Heat Transfer*, vol. 6, pp. 263-282, 1983.
- Baker, A.J. *Finite Element Computational Fluid Mechanics*. New York, McGraw-Hill, 1983, 510 p.
- Bei, N. & Shao, Y. *Computational simulation of turbulent flows and pollution dispersion in complex urban canyons*. (s/d), 281 p.
- Boçon, F. T. *Modelagem matemática do escoamento e da dispersão de poluentes na microescala atmosférica*. Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 1998, 308 p. Tese (Doutorado).
- Bogey, C.; Bailly, C. & Juvé, D. Noise investigation of a high subsonic, moderate Reynolds number jet using a compressible large eddy simulation. *Theoretical Computational Fluid Dynamics*, vol. 16: p. 273–297, 2003.

- Braga, F. C. *et. al.* Estudos de aerossóis atmosféricos e aplicações de modelos numéricos. *Quim. Nova*, vol. 27, (4), pp. 567-573, 2004.
- Campos-Silva, J.B. *Simulação Numérica de Escoamentos de Fluidos pelo Método de Elementos Finitos Baseado em Volumes de Controle*. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 1998, 159 p. Tese (Doutorado).
- Chidambaram, N. *Colocated-grid finite volume formulation for the large eddy simulation of incompressible and compressible turbulent flows*. Ames, Iowa, USA: Graduate College, Department of Mechanical Engineering, Iowa State University, 1998, Thesis (M.Sc.).
- Chung, T.J. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics*. New York: McGraw-Hill, 1978, 378 p.
- Connor, J.J. & Brebbia, C.A. *Finite Element Techniques for Fluid Flow*. London: Butterworth & Co (Publishers) Ltd., 1976, 330 p.
- Deardorff, J. W. A numerical study of tri-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds number. *Journal Fluids Mechanics*, vol. 41, pp. 342-379, 1970.
- Dhatt, G. & Touzot, G. *The Finite Element Method Displayed*, Chichester: John Wiley & Sons, 1984, 509 p.
- Ding, F, Palarya, S. & Y.-L., Lin, Large-Eddy Simulation of the Atmospheric Boundary Layer Using a New Subgrid-Scale Model. *Environmental Fluid Mechanics*, part I, vol. 1, pp. 29-47, 2001.
- Ding, F, Palarya, S. & Y.-L., Lin, Large-Eddy Simulation of the Atmospheric Boundary Layer Using a New Subgrid-Scale Model. *Environmental Fluid Mechanics*, part II, vol. 1, pp. 49-69, 2001.
- El Hamdani, S. et al, *Étude de la dispersion d'un polluant dans un écoulement d'air le long d'un canal*. Marrakech, Maroc : Groupe de Recherche sur l'Energie et la Thermique (GRETH), EST B.P 33/S – Agadir, Maroc. Laboratoire d'Automatique, Faculté des sciences Semlalia, 2002.

- Enger, L. A Higher Order Closure Model Applied to Dispersion in a Convective PBL. *Atmospheric Environment*, vol. 20, (5), pp. 879-894, 1986.
- Fortuna, A. O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: Conceitos básicos e aplicações*. São Paulo, SP: Edusp, Universidade de São Paulo, 2002.
- Fox, R. W. & MacDonald, A. T. *Introdução à mecânica dos fluidos*. Traduzido por Melo, A. M. S., Rio de Janeiro ,RJ: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. 1995.
- Freire, A. Turbulência e seu desenvolvimento histórico. *III Escola de Primavera de Transição & Turbulência*. Florianópolis, SC: Universidade Federal de Santa Catarina, 2002, p. 53-81.
- Friço, L. M. *Simulação numérica de escoamentos incompressíveis tridimensionais turbulentos e em transição*. Ilha Solteira, SP: Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual Paulista, 2004, 139 p. Dissertação (Mestrado).
- Galperin, B., Kantha, L.H., Hassid, S. & Rosati, A. A Quasi-equilibrium Turbulent Energy Model for Geophysical Flows. *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 45, (1), pp. 55-62, 1988.
- Gerdes, F. & Olivari, D. *Analysis of pollutant dispersion in an urban street canyon*. Von Karman Institute, 72, Chauss' e de Waterloo, B-1640 Rhode-Saint-Genese, Belgium. *Preprint submitted to Elsevier*. Preprint 12 February 2000.
- Hirsch, C. Numerical Computation of External and Internal Flows. vol. 1: Fundamentals of Numerical Discretization, John Wiley & Sons, Chichester. 1988, 515p.
- Kovar-Panskus, A. Influence of geometry on the mean flow within urban street canyons – A comparison of wind tunnel experiments and numerical simulations. *Water, Air, and Soil Pollution: Focus 2*: 365–380, 2002. *Kluwer Academic Publishers. Printed in the Netherlands*.

- Ledain Muir, B. & Baliga, B. R. Solution of Three-Dimensional Convection-Diffusion Problems using Tetrahedral Elements and Flow-Oriented Upwind Interpolation Functions, *Numerical Heat Transfer*, vol.9, pp.163-182, 1986.
- Lewis, R.W., Morgan, K., Thomas, H.R. & Seetharamu, K.N. *The Finite Element Method in Heat Transfer Analysis*, Chichester: John Wiley & Sons LTD., 1996, 279 p.
- Lima, R. C. *Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Incompressíveis com Transferência de Calor e Massa por um Método de Elementos Finitos de Subdomínio.* , Ilha Solteira: Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual Paulista, Campus de Ilha Solteira,SP, Brasil, 2005, 161 p. Dissertação (Mestrado).
- Löner, R. *Applied computational fluid dynamics techniques – An introduction based on finite element methods.* School of Computational Sciences, George Mason University Fairfax, Virgínia, USA, 2001, 1 p.
- Matos, A. et. al. Large-eddy simulation of turbulent flow over a two-dimensional cavity with temperature fluctuations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 42, pp. 49-59, 1999.
- Möller, S. V. & Silvestrini, J. H. *Turbulência: Fundamentos, IV Escola de Primavera de Transição e Turbulência.* Porto Alegre, RS: Universidade Pontifícia Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2004, p. 1-32.
- Pai, P. & Tsang, T.T.H. A Finite Element Solution to Turbulent Diffusion in a Convective Boundary Layer, *International Journal Numerical Methods in Fluids*, vol. 12, pp. 179-195, 1991.
- Pai, P. & Tsang, T.T.H. A Finite Element Method for a Three-Dimensional Second-Order Closure Model of Turbulent Diffusion in a Convective Boundary Layer, *International Journal Numerical Methods in Fluids*, vol. 15, pp. 571-578, 1992.
- Patankar, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* Washington: Hemisphere, 1980, 525p.

- Pereira, M. M. R. Modelos lagrangianos de partículas aplicados a dispersão de poluentes na atmosfera. XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica – COBEM. *Proceedings of COBEM 2001, Fluid Mechanics*, Vol. 8, pp 150-158, 2001.
- Piomelli, U. Large-eddy simulation: achievements and challenges. *Progress in Aerospace Sciences*, 35, pp. 335-362, 1999.
- Raw, M.J, Schneider, G.E & Hassani, V. A nine-node quadratic control-volume-based finite element for heat conduction. *J. Spacecraft*, vol. 22, (5), p. 523-529, 1985.
- Reddy, J.N. *An Introduction to the Finite Element Method*. Second Edition, New York : McGraw-Hill, 1993, 684 p.
- Saabas, H.J. *A control volume finite element method for three-dimensional, incompressible, viscous fluid flow*. Montreal, Quebec, Canada.: Dept. of Mech. Eng., McGill University, 1991, Ph.D. Thesis.
- Savii, G.G. “Simulation of Air Pollution in Urban Area using Finite Element Methods”, *Proceedings of 3rd International Conference on Technical Informatics – CONTI'98*, Timisoara, Romania, October, 1998. *Sci.Bull."Politehnica" Univ. Timisoara, Trans. Comp. Autom.*, Vol.43 (57), 1998, pp.96-99.
- Schneider, G. E. & Raw, M. J. A skewed, positive influence coefficient upwinding procedure for control-volume-based finite-element convection-diffusion computation. *Numerical Heat Transfer*, vol. 9, p.1-26, 1986.
- Schneider, G. E. & Raw, M. J. Control volume finite-element method for heat transfer and fluid flow using colocated variables – 1. Computation procedure. *Numerical Heat Transfer*, vol. 11, p. 363-390, 1987a.
- Schneider, G. E. & Raw, M. J. Control volume finite-element method for heat transfer and fluid flow using colocated variables – 2. Application and validation. *Numerical Heat Transfer*, vol. 11, p. 391-416, 1987b.

- Shah, R. K. & London, A. L. *Laminar flow forced convection in ducts, A Source book for compact heat exchanger analytical data*. New York: Academic Press, 1978, 477 p.
- Shaw, C.T. *Using Computational Fluid Dynamics*. New York: Prentice Hall, 1992, 251p.
- Shyy, W. et. al. *Computational techniques for complex transport phenomena*, Cambridge: Cambridge university Press, 1997, 321p.
- Silveira-Neto, A. *Fundamentos da turbulência nos fluidos. III Escola de Primavera de Transição & Turbulência*. Florianópolis, SC: Universidade Federal de Santa Catarina, pp. 1-50, 2002.
- Silveira-Neto, A. *Turbulência nos fluidos aplicada*. Apostila. Uberlândia, MG: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2003.
- Silveira-Neto, A. et. al. A numerical investigation of the coherent vortices in turbulence behind a backward facing step. *Journal Fluid Mechanics*, 256, pp. 1-25, 1993.
- Sorbjan, Z. & Uliasz, M. Large-eddy simulation of air pollution dispersion in the nocturnal cloud-topped atmospheric boundary layer. *Submitted to Boundary Layer Meteorology, May 1998*. Marquette University, Milwaukee, WI 53201, Mission Research Corporation, ASTER Division, 2629 Redwing Rd, Suite 310, Fort Collins, CO 80523
- Sun, W.-Y. Air Pollution in a Convective Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, vol. 20, (10), pp. 1877-1886, 1986.
- Tejada-Martínez, A. E. *Dynamic subgrid-scale modeling for large-eddy simulation of turbulent flows with a stabilized finite element method*. Troy, New York, USA: Faculty of Rensselaer Polytechnic Institute, 158 p. 2002, PhD Thesis.
- Vachon, G. et. al. Pollutant dispersion in an urban street canyon in Nantes: experimental study. A contribution to subproject SATURN. *Laboratoire de Mécanique des Fluides UMR 6598 CNRS, Ecole Centrale de Nantes BP 92101, 44321 Nantes Cedex3, France, 1999*.

Whiting, C. H. *Stabilized finite element methods for fluid dynamics using a hierarchical basis*, Troy, New York, USA: Faculty of Rensselaer Polytechnic Institute, 134 p. 1999, PhD Thesis.

Wong, A.Y.T.; Chan, A.T. & So, E.S.P. Computational Analysis of Wind Flow and Pollutant Dispersion in an Urban Street Canyon. In: *The 15th Engineering Mechanics Division Conference of the American Society of Civil Engineers at Columbia University in the City of New York, New York, NY June 2-5, 2002*.

Taylor, C. & Hughes, T.G. *Finite Element Programming of the Navier-Stokes Equations*. Pineridge Press Limited, Swansea, U.K. 1981, 244 p.

Zienkiewicz, O.C. & Morgan, K. *Finite Elements and Approximations*. Singapore: John Willey & Sons, 1993, 328 p.

Zienkiewicz, O. C & Taylor, R. L. The finite element method: vol. 3 *Fluid Dynamics*, Fifth Edition, Butterworth Heinemann, Oxford, 2000, 334 p.

APÊNDICE A

Na tabela A.1, apresentada neste apêndice têm-se as funções de interpolação e suas derivadas de primeira ordem, referentes ao elemento hexaedro com vinte e sete pontos nodais.

Tabela A.1 – Funções de Interpolação e Derivadas de primeira ordem

α	$8(N_\alpha)$	Ψ	$8(\partial N_\alpha / \partial \Psi)$
1	$\xi(-1+\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(-1+2\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$\xi(-1+\xi)(-1+2\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)\eta(-1+\eta)(-1+2\zeta)$
2	$\xi(1+\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(1+2\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$\xi(1+\xi)(-1+2\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$\xi(1+\xi)\eta(-1+\eta)(-1+2\zeta)$
3	$\xi(1+\xi)\eta(1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(1+2\xi)\eta(1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$\xi(1+\xi)(1+2\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$\xi(1+\xi)\eta(1+\eta)(-1+2\zeta)$
4	$\xi(-1+\xi)\eta(1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(-1+2\xi)\eta(1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$\xi(-1+\xi)(1+2\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)\eta(1+\eta)(-1+2\zeta)$
5	$\xi(-1+\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(-1+2\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(1+\zeta)$
		η	$\xi(-1+\xi)(-1+2\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)\eta(-1+\eta)(1+2\zeta)$
6	$\xi(1+\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(1+2\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(1+\zeta)$
		η	$\xi(1+\xi)(-1+2\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$\xi(1+\xi)\eta(-1+\eta)(1+2\zeta)$
7	$\xi(1+\xi)\eta(1+\eta)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(1+2\xi)\eta(1+\eta)\zeta(1+\zeta)$
		η	$\xi(1+\xi)(1+2\eta)\zeta(1+\zeta)$

		ζ	$\xi(1+\xi)\eta(1+\eta)(1+2\zeta)$
8	$\xi(-1+\xi)\eta(1+\eta)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(-1+2\xi)\eta(1+\eta)\zeta(1+\zeta)$
		η	$\xi(-1+\xi)(1+2\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)\eta(1+\eta)(1+2\zeta)$
9	$2(1-\xi^2)\eta(-1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(-4\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$2(1-\xi^2)(-1+2\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$2(1-\xi^2)\eta(-1+\eta)(-1+2\zeta)$
10	$\xi(1+\xi)2(1-\eta^2)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(1+2\xi)2(1-\eta^2)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$\xi(1+\xi)(-4\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$\xi(1+\xi)2(1-\eta^2)(-1+2\zeta)$
11	$2(1-\xi^2)\eta(1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(-4\xi)\eta(1+\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$2(1-\xi^2)(1+2\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$2(1-\xi^2)\eta(1+\eta)(-1+2\zeta)$
12	$\xi(-1+\xi)2(1-\eta^2)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(-1+2\xi)2(1-\eta^2)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$\xi(-1+\xi)(-4\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)2(1-\eta^2)(-1+2\zeta)$
13	$\xi(-1+\xi)\eta(-1+\eta)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(-1+2\xi)\eta(-1+\eta)2(1-\zeta^2)$
		η	$\xi(-1+\xi)(-1+2\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)\eta(-1+\eta)(-4\zeta)$
14	$\xi(1+\xi)\eta(-1+\eta)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(1+2\xi)\eta(-1+\eta)2(1-\zeta^2)$
		η	$\xi(1+\xi)(-1+2\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$\xi(1+\xi)\eta(-1+\eta)(-4\zeta)$
15	$\xi(1+\xi)\eta(1+\eta)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(1+2\xi)\eta(1+\eta)2(1-\zeta^2)$
		η	$\xi(1+\xi)(1+2\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$\xi(1+\xi)\eta(1+\eta)(-4\zeta)$
16	$\xi(-1+\xi)\eta(1+\eta)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(-1+2\xi)\eta(1+\eta)2(1-\zeta^2)$
		η	$\xi(-1+\xi)(1+2\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)\eta(1+\eta)(-4\zeta)$
17	$2(1-\xi^2)\eta(-1+\eta)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(-4\xi)\eta(-1+\eta)\zeta(1+\zeta)$
		η	$2(1-\xi^2)(-1+2\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$2(1-\xi^2)\eta(-1+\eta)(1+2\zeta)$

18	$\xi(1+\xi)2(1-\eta^2)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(1+2\xi)2(1-\eta^2)\zeta(1+\zeta)$
		η	$\xi(1+\xi)(-4\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$\xi(1+\xi)2(1-\eta^2)(1+2\zeta)$
19	$2(1-\xi^2)\eta(1+\eta)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(-4\xi)\eta(1+\eta)\zeta(1+\zeta)$
		η	$2(1-\xi^2)(1+2\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$2(1-\xi^2)\eta(1+\eta)(1+2\zeta)$
20	$\xi(-1+\xi)2(1-\eta^2)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(-1+2\xi)2(1-\eta^2)\zeta(1+\zeta)$
		η	$\xi(-1+\xi)(-4\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)2(1-\eta^2)(1+2\zeta)$
21	$2(1-\xi^2)2(1-\eta^2)\zeta(-1+\zeta)$	ξ	$(-4\xi)2(1-\eta^2)\zeta(-1+\zeta)$
		η	$2(1-\xi^2)(-4\eta)\zeta(-1+\zeta)$
		ζ	$2(1-\xi^2)2(1-\eta^2)(-1+2\zeta)$
22	$2(1-\xi^2)\eta(-1+\eta)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(-4\xi)\eta(-1+\eta)2(1-\zeta^2)$
		η	$2(1-\xi^2)(-1+2\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$2(1-\xi^2)\eta(-1+\eta)(-4\zeta)$
23	$\xi(1+\xi)2(1-\eta^2)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(1+2\xi)2(1-\eta^2)2(1-\zeta^2)$
		η	$\xi(1+\xi)(-4\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$\xi(1+\xi)2(1-\eta^2)(-4\zeta)$
24	$2(1-\xi^2)\eta(1+\eta)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(-4\xi)\eta(1+\eta)2(1-\zeta^2)$
		η	$2(1-\xi^2)(1+2\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$2(1-\xi^2)\eta(1+\eta)(-4\zeta)$
25	$\xi(-1+\xi)2(1-\eta^2)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(-1+2\xi)2(1-\eta^2)2(1-\zeta^2)$
		η	$\xi(-1+\xi)(-4\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$\xi(-1+\xi)2(1-\eta^2)(-4\zeta)$
26	$2(1-\xi^2)2(1-\eta^2)\zeta(1+\zeta)$	ξ	$(-4\xi)2(1-\eta^2)\zeta(1+\zeta)$
		η	$2(1-\xi^2)(-4\eta)\zeta(1+\zeta)$
		ζ	$2(1-\xi^2)2(1-\eta^2)(1+2\zeta)$
27	$2(1-\xi^2)2(1-\eta^2)2(1-\zeta^2)$	ξ	$(-4\xi)2(1-\eta^2)2(1-\zeta^2)$
		η	$2(1-\xi^2)(-4\eta)2(1-\zeta^2)$
		ζ	$2(1-\xi^2)2(1-\eta^2)(-4\zeta)$

APÊNDICE B

As matrizes difusivas e convectivas para um elemento hexaedro com vinte e sete pontos nodais são mostradas neste apêndice. Tais matrizes foram obtidas obedecendo às expressões que seguem, sendo que, os números de 1 a 27, que aparecem dentro dos termos difusivos ($K(\alpha,\beta)$) e convectivos ($C(\alpha,\beta)$) referem-se aos vinte e sete volumes do elemento hexaedro e os números de 1 a 54 que estão nos fluxos difusivos e convectivos são as áreas do elemento.

Assim sendo, as expressões das matrizes difusivas são as seguintes:

$$K(1,\beta) = -FLUD(10, \beta)+FLUD(21, \beta)-FLUD(43, \beta);$$

$$K(2, \beta) = +FLUD(1, \beta)+FLUD(19, \beta)-FLUD(37, \beta);$$

$$K(3, \beta) = -FLUD(28, \beta)+FLUD(3, \beta)-FLUD(39, \beta);$$

$$K(4, \beta) = -FLUD(30, \beta)-FLUD(12, \beta)-FLUD(45, \beta);$$

$$K(5, \beta) = +FLUD(27, \beta)-FLUD(16, \beta)+FLUD(52, \beta);$$

$$K(6, \beta) = +FLUD(7, \beta)+FLUD(25, \beta)+FLUD(46, \beta);$$

$$K(7, \beta) = +FLUD(9, \beta)-FLUD(34, \beta)+FLUD(48, \beta);$$

$$K(8, \beta) = -FLUD(36, \beta)-FLUD(18, \beta)+FLUD(54, \beta);$$

$$K(9, \beta) = -FLUD(1, \beta)+FLUD(10, \beta)+FLUD(20, \beta)-FLUD(40, \beta);$$

$$K(10, \beta) = -FLUD(19, \beta)+FLUD(28, \beta)-FLUD(38, \beta)+FLUD(2, \beta);$$

$$K(11, \beta) = -FLUD(29, \beta)-FLUD(3, \beta)+FLUD(12, \beta)-FLUD(42, \beta);$$

$$K(12, \beta) = -FLUD(21, \beta)+FLUD(30, \beta)-FLUD(11, \beta)-FLUD(44, \beta);$$

$$K(13, \beta) = +FLUD(24, \beta)-FLUD(52, \beta)+FLUD(43, \beta)-FLUD(13, \beta);$$

$$K(14, \beta) = +FLUD(37, \beta)-FLUD(46, \beta)+FLUD(4, \beta)+FLUD(22, \beta);$$

$$K(15, \beta) = -FLUD(31, \beta)+FLUD(39, \beta)-FLUD(48, \beta)+FLUD(6, \beta);$$

$$K(16, \beta) = -FLUD(33, \beta)-FLUD(54, \beta)+FLUD(45, \beta)-FLUD(15, \beta);$$

$$\begin{aligned}
K(17, \beta) &= +FLUD(26, \beta) - FLUD(7, \beta) + FLUD(16, \beta) + FLUD(49, \beta); \\
K(18, \beta) &= -FLUD(25, \beta) + FLUD(34, \beta) + FLUD(47, \beta) + FLUD(8, \beta); \\
K(19, \beta) &= -FLUD(35, \beta) - FLUD(9, \beta) + FLUD(18, \beta) + FLUD(51, \beta); \\
K(20, \beta) &= -FLUD(27, \beta) + FLUD(36, \beta) - FLUD(17, \beta) + FLUD(53, \beta); \\
K(21, \beta) &= -FLUD(20, \beta) + FLUD(29, \beta) - FLUD(2, \beta) + FLUD(11, \beta) - FLUD(41, \beta); \\
K(22, \beta) &= +FLUD(23, \beta) - FLUD(49, \beta) + FLUD(40, \beta) - FLUD(4, \beta) + FLUD(13, \beta); \\
K(23, \beta) &= -FLUD(22, \beta) + FLUD(31, \beta) + FLUD(38, \beta) - FLUD(47, \beta) + FLUD(5, \beta); \\
K(24, \beta) &= -FLUD(32, \beta) - FLUD(51, \beta) + FLUD(42, \beta) - FLUD(6, \beta) + FLUD(15, \beta); \\
K(25, \beta) &= -FLUD(24, \beta) + FLUD(33, \beta) - FLUD(53, \beta) + FLUD(44, \beta) - FLUD(14, \beta); \\
K(26, \beta) &= -FLUD(26, \beta) + FLUD(35, \beta) - FLUD(8, \beta) + FLUD(17, \beta) + FLUD(50, \beta); \\
K(27, \beta) &= -FLUD(23, \beta) + FLUD(32, \beta) - FLUD(50, \beta) + FLUD(41, \beta) - FLUD(5, \beta) + \\
&\quad + FLUD(14, \beta);
\end{aligned}$$

As matrizes convectivas foram obtidas obedecendo as seguintes regras:

$$\begin{aligned}
C(1, \beta) &= -FLUC(10, \beta) + FLUC(21, \beta) - FLUC(43, \beta); \\
C(2, \beta) &= +FLUC(1, \beta) + FLUC(19, \beta) - FLUC(37, \beta); \\
C(3, \beta) &= -FLUC(28, \beta) + FLUC(3, \beta) - FLUC(39, \beta); \\
C(4, \beta) &= -FLUC(30, \beta) - FLUC(12, \beta) - FLUC(45, \beta); \\
C(5, \beta) &= +FLUC(27, \beta) - FLUC(16, \beta) + FLUC(52, \beta); \\
C(6, \beta) &= +FLUC(7, \beta) + FLUC(25, \beta) + FLUC(46, \beta); \\
C(7, \beta) &= +FLUC(9, \beta) - FLUC(34, \beta) + FLUC(48, \beta); \\
C(8, \beta) &= -FLUC(36, \beta) - FLUC(18, \beta) + FLUC(54, \beta); \\
C(9, \beta) &= -FLUC(1, \beta) + FLUC(10, \beta) + FLUC(20, \beta) - FLUC(40, \beta); \\
C(10, \beta) &= -FLUC(19, \beta) + FLUC(28, \beta) - FLUC(38, \beta) + FLUC(2, \beta); \\
C(11, \beta) &= -FLUC(29, \beta) - FLUC(3, \beta) + FLUC(12, \beta) - FLUC(42, \beta); \\
C(12, \beta) &= -FLUC(21, \beta) + FLUC(30, \beta) - FLUC(11, \beta) - FLUC(44, \beta); \\
C(13, \beta) &= +FLUC(24, \beta) - FLUC(52, \beta) + FLUC(43, \beta) - FLUC(13, \beta); \\
C(14, \beta) &= +FLUC(37, \beta) - FLUC(46, \beta) + FLUC(4, \beta) + FLUC(22, \beta); \\
C(15, \beta) &= -FLUC(31, \beta) + FLUC(39, \beta) - FLUC(48, \beta) + FLUC(6, \beta); \\
C(16, \beta) &= -FLUC(33, \beta) - FLUC(54, \beta) + FLUC(45, \beta) - FLUC(15, \beta); \\
C(17, \beta) &= +FLUC(26, \beta) - FLUC(7, \beta) + FLUC(16, \beta) + FLUC(49, \beta);
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C(18, \beta) &= -\text{FLUC}(25, \beta) + \text{FLUC}(34, \beta) + \text{FLUC}(47, \beta) + \text{FLUC}(8, \beta); \\
C(19, \beta) &= -\text{FLUC}(35, \beta) - \text{FLUC}(9, \beta) + \text{FLUC}(18, \beta) + \text{FLUC}(51, \beta); \\
C(20, \beta) &= -\text{FLUC}(27, \beta) + \text{FLUC}(36, \beta) - \text{FLUC}(17, \beta) + \text{FLUC}(53, \beta); \\
C(21, \beta) &= -\text{FLUC}(20, \beta) + \text{FLUC}(29, \beta) - \text{FLUC}(2, \beta) + \text{FLUC}(11, \beta) - \text{FLUC}(41, \beta); \\
C(22, \beta) &= +\text{FLUC}(23, \beta) - \text{FLUC}(49, \beta) + \text{FLUC}(40, \beta) - \text{FLUC}(4, \beta) + \text{FLUC}(13, \beta); \\
C(23, \beta) &= -\text{FLUC}(22, \beta) + \text{FLUC}(31, \beta) + \text{FLUC}(38, \beta) - \text{FLUC}(47, \beta) + \text{FLUC}(5, \beta); \\
C(24, \beta) &= -\text{FLUC}(32, \beta) - \text{FLUC}(51, \beta) + \text{FLUC}(42, \beta) - \text{FLUC}(6, \beta) + \text{FLUC}(15, \beta); \\
C(25, \beta) &= -\text{FLUC}(24, \beta) + \text{FLUC}(33, \beta) - \text{FLUC}(53, \beta) + \text{FLUC}(44, \beta) - \text{FLUC}(14, \beta); \\
C(26, \beta) &= -\text{FLUC}(26, \beta) + \text{FLUC}(35, \beta) - \text{FLUC}(8, \beta) + \text{FLUC}(17, \beta) + \text{FLUC}(50, \beta); \\
C(27, \beta) &= -\text{FLUC}(23, \beta) + \text{FLUC}(32, \beta) - \text{FLUC}(50, \beta) + \text{FLUC}(41, \beta) - \text{FLUC}(5, \beta) + \\
&\quad + \text{FLUC}(14, \beta);
\end{aligned}$$