

Eliene Bezerra Simão da Silva

**DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÃO DE CÓDIGO DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE TRANSIENTE 3D DE MECÂNICA DE
FLUIDOS E TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM TRANSPORTE E DECAIMENTO
DE MATERIAL RADIOATIVO**

Dissertação submetida ao programa de Pós Graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear da Comissão Nacional de Energia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciências e Tecnologia Nucleares – Ênfase Acadêmica em Engenharia de Reatores.

Orientador: Prof. Paulo Augusto Berquó de Sampaio (PPGIEN/CNEN)

Rio de Janeiro

2013

SILV Eliene Bezerra Simão

Desenvolvimento e aplicação de código de fluidodinâmica computacional para análise transiente 3d de mecânica de fluidos e transferência de calor com transporte e decaimento de material radioativo / Eliene Bezerra Simão da Silva – Rio de Janeiro: CNEN/IEN, 2013.

93f.

Orientador: Paulo Augusto Berquó de Sampaio
Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares) – Instituto de Engenharia Nuclear, PPGIEN, 2013.

1. Método dos Elementos Finitos. 2. Fluidodinâmica Computacional. 3. Simulação das Grandes Escalas de Turbulência. 4. Dispersão de Radionuclídeos.

CDD

CDU

DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÃO DE CÓDIGO DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE TRANSIENTE 3D DE MECÂNICA DE
FLUIDOS E TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM TRANSPORTE E DECAIMENTO
DE MATERIAL RADIOATIVO

Eliene Bezerra Simão da Silva

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA
NUCLEAR DA COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR COMO PARTE
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR – ÊNFASE ACADÊMICA EM
ENGENHARIA DE REATORES

Aprovada por:

Prof. Paulo Augusto Berquó de Sampaio, Ph.D.

Prof. Maria de Lourdes Moreira, D. Sc.

Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2013

"Na Ciência (...) o trabalho científico do indivíduo está tão inseparavelmente conectado ao de seus antecessores e contemporâneos, que parece ser quase um produto impessoal de sua geração."

Albert Einstein

Dedico esta dissertação às pessoas que mais amo, meus pais Maria de Lourdes e Manoel Simão, pela educação recebida, por seu esforço em tornar-me uma pessoa de bem em meio à diversidade de obstáculos presentes em nosso caminho e pelo apoio dado aos meus estudos.

AGRADECIMENTOS

Agradecer não é só um ato de respeito por algo que nos auxiliou no crescimento e aprendizado, mais do que isso, agradecer é um dom.

Agradeço a Deus por estar sempre presente na minha vida;

Agradeço aos meus pais, Maria de Lourdes e Manoel Simão, pelo apoio diário, formação moral e educacional;

Agradeço ao governo brasileiro, não às figuras passageiras da política, mas à concepção governamental de ser representante da sociedade que através da instituição IEN/CNEN concedeu-me a oportunidade de realização desse trabalho. Por meio dele, eu pude usufruir do investimento público para o meu aprendizado, aperfeiçoamento e crescimento profissional consciente de que em breve deverei oferecer a minha contrapartida;

Agradeço ao meu orientador, Dr. Paulo Berquó, pelas longas horas de dedicação e primorosa orientação;

Agradeço aos professores do instituto, em especial, à professora Maria de Lourdes Moreira pelo apoio e paciência; ao professor Reinaldo Jospin pelo suporte com a programação computacional desde “o bloquinho”, trabalhoso, mas de grandes ensinamentos; ao professor Carlos Renke, pela recepção e por me ensinar sobre o nosso reator Argonauta;

Agradeço aos colegas de mestrado, Tob Rodrigues, Nádia Rodrigues, Danilo Leite, Renato Raoni, André Felipe, Francisco Rogério, Carlos Alberto e àqueles que estiveram ao meu lado e que de alguma forma contribuíram para a confecção deste trabalho;

Agradeço ao Leonardo Koblikz pela amizade e orientação;

Agradeço ao Adino, pelo suporte com a configuração do sistema operacional;

Agradeço à Janaína, Ana Paula, Joana, Sr. Antônio Sérgio e em especial à dona Claudia constituintes da equipe da secretaria do CENS, sempre dispostos a ajudar;

Agradeço à dona Lucia da direção do instituto, pela paciência e atenção sempre prestada;

Agradeço às meninas da minha república Rozieli, Priscila, Bárbara, Beatriz e Nathany, pelas prévias assistidas e pelos toques finais na postura para a apresentação;

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

DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÃO DE CÓDIGO DE FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL PARA ANÁLISE TRANSIENTE 3D DE MECÂNICA DE FLUIDOS E TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM TRANSPORTE E DECAIMENTO DE MATERIAL RADIOATIVO

Eliene Bezerra Simão da Silva

Abril de 2013

Orientador: Paulo Augusto Berquó de Sampaio (PPGIEN/CNEN)

Programa: Ciência e Tecnologia Nucleares – IEN/CNEN

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) oferece ferramentas eficientes para o estudo de dispersão de radionuclídeos, inclusive em problemas onde há decaimento radioativo. Este trabalho apresenta um tratamento via fluidodinâmica computacional da dispersão de radionuclídeos, aplicável tanto na dispersão em ambientes internos quanto na dispersão externa e, em ambos os casos, tanto por via atmosférica quanto aquática. A primeira situação é de fundamental importância para a otimização do projeto de salas que abrigam material radioativo visando à segurança e minimização da dose em caso de dispersão. A segunda situação diz respeito à dispersão para o exterior de instalações nucleares ou radiativas, sendo de grande relevância para oferecer subsídios para a análise de segurança e de impacto ambiental no entorno da instalação. Neste trabalho as equações de quantidade de movimento, energia e transporte com decaimento de material radioativo são discretizadas para obtenção de soluções numéricas. O programa desenvolvido emprega simulação das grandes escalas de turbulência (LES) combinadas com técnicas de computação paralela e distribuída.

Palavras-chave: Método dos Elementos Finitos, Fluidodinâmica computacional, Simulação das Grandes Escalas de Turbulência, dispersão de radionuclídeos.

Abstract of dissertation submitted to PPGIEN/CNEN as part of the necessary requirements for obtaining of Master's degree Science (M. Sc.)

DEVELOPMENT AND APPLICATION OF A CFD CODE FOR THE
TRANSIENT 3D ANALYSIS OF FLUID MECHANICS, HEAT TRANSFER AND
TRANSPORT AND DECAY OF RADIOACTIVE MATERIAL

Eliene Bezerra Simão da Silva

April / 2013

Advisors: Prof. Paulo Augusto Berquó de Sampaio (PPGIEN/CNEN)

Program: Ciência e Tecnologia Nucleares – IEN/CNEN

The computational fluid dynamics (CFD) offers efficient tools for the study of dispersion of radionuclides, including problems where radioactive decay needs to be considered. This work presents a CFD approach for the analysis of radionuclides dispersion, applicable both for internal and external environments, either through air or aquatic ways. The first case is relevant for the optimization of the design of rooms that keep or store radioactive material and is also important for safety and the minimization of doses in the event of dispersion. The second case concerns external dispersion from nuclear and radioactive installations and is essential for safety analysis and the evaluation of environment impact of such installations. In this work the equations governing momentum, energy and transport with decay of radioactive materials are discretized in order that numerical solutions can be obtained. Additionally, the code developed employs Large Eddy Simulation (LES) of turbulence combined with techniques of parallel distributed computing.

Keywords: Finite Element Method, Computational fluid dynamics, Large Eddy Simulation, radionuclide dispersion

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Estrutura do sistema de simulação CFD (HIRSCH, 1990).	17
Figura 2: Aproximação para α , por Hughes e Brooks e obtida naturalmente por De Sampaio, sobreposta pela curva exata.	36
Figura 3: Esquema de decomposição do domínio feita pelo METIS. À esquerda, uma geometria bidimensional quadrada com elementos triangulares e à direita, uma geometria tridimensional cúbica com elementos tetraédricos.	47
Figura 4: Modelo esquemático da convecção natural em uma cavidade cúbica (WAKASHIMA & SAITOH, 2004).	50
Figura 5: Ilustração qualitativa da temperatura, com perfis, isossuperfícies e isolinhas de temperatura. A parede vertical à esquerda está isotermicamente aquecida à temperatura $T = 12$ (parede quente) e a parede à direita a $T = -12$ (parede fria).	55
Figura 6: Isossuperfícies de temperatura para $Ra = 104$ e $Pr = 0,71$	56
Figura 7: Isossuperfícies de temperatura para $Ra = 105$ e $Pr = 0,71$	57
Figura 8: Perfil de temperatura para $Ra = 106$ e $Pr = 0,71$	57
Figura 9: Ilustração qualitativa de fluxo de calor. Isossuperfícies e isolinhas de fluxo de calor.	58
Figura 10: Resultado da simulação computacional mostrando o fluxo de calor para $Ra = 104$ e $Pr = 0,71$	59
Figura 11: Resultado da simulação computacional mostrando o fluxo de calor para $Ra = 105$ e $Pr = 0,71$	60

Figura 12: Resultado da simulação computacional mostrando o fluxo de calor para $Ra = 106$ e $Pr = 0,71$	61
Figura 13: Ilustração qualitativa do perfil de pressão. Isossuperfícies e isolinhas de pressão.	62
Figura 14: Isossuperfícies de pressão para $Ra = 104$ e $Pr = 0,71$	63
Figura 15: Isossuperfícies de pressão para $Ra = 105$ e $Pr = 0,71$	63
Figura 16: Isossuperfícies de pressão para $Ra = 106$ e $Pr = 0,71$	64
Figura 17: Vetores velocidade para $Ra = 105$ e $Pr = 0,71$	64
Figura 18: Vetores do módulo da velocidade para $Ra = 105$ e $Pr = 0,71$. Próximo às paredes isotérmicas a velocidade é maior.....	65
Figura 19: Vetores do módulo da velocidade para $Ra = 106$ e $Pr = 0,71$. Próximo às paredes isotérmicas a velocidade é maior.....	66
Figura 20: Gráfico $\ln Nu \times \ln Ra$, estabelece a relação entre Nu e Ra	67
Figura 21: Gráfico de $\ln(Ra) \times \ln(Nu)$ com barra de erro entre $Nuref_1$, $Nuref_2$, $Nupresent_1$ e $Nupresent_2$	68
Figura 22: <i>Streamline velocity</i> ($Ra = 5 \times 105$). À esquerda, <i>streamline</i> produzido no ponto de coordenadas (-4,0.5,0.5) e à direita (-4,0.5,0.1).	69
Figura 23: Gráfico de decaimento radioativo.....	71
Figura 24: Isossuperfícies de temperatura.	72
Figura 25: Perfil de pressão.	73
Figura 26: Perfil de fluxo de calor.....	74

Figura 27: Isossuperfícies de temperatura para o caso A.	79
Figura 28: Isossuperfícies de concentração da primeira espécie para o caso A.	80
Figura 29: Isossuperfícies de concentração para a segunda espécie do caso A.	80
Figura 30: Isossuperfícies de temperatura para o caso B.	81
Figura 31: Isossuperfícies de concentração da primeira espécie para o caso B.	81
Figura 32: Isossuperfícies de concentração da segunda espécie para o caso B.	82
Figura 33: Isossuperfícies de temperatura para o caso C.	82
Figura 34: Isossuperfícies de concentração da primeira espécie para o caso C.	83
Figura 35: Isossuperfícies de concentração da segunda espécie para o caso C.	83
Figura 36: Desempenho do processamento em paralelo com 12 cpus ao iniciar o processo.	84

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: <i>Benchmark 1</i> - cavidade cubica (WAKASHIMA & SAITOH, 2004).....	52
Tabela 2: <i>Benchmark 2</i> - da cavidade cubica (TRIC, LABROSSE, & BETROUNI, 2000).....	52
Tabela 3: Dados para a geração dos resultados de validação da fluidodinâmica.	53
Tabela 4: Características das malhas utilizadas.	54
Tabela 5: Números de Nusselt para os Ra variando de 10^4 a 10^6 , obtidos pelo código <code>ns_solver_MPI_3d_cd</code> para M1 e M2.....	54
Tabela 6: Resultados obtidos comparados aos <i>benchmarks</i>	67
Tabela 7: Dados de entrada para a validação do decaimento radioativo.	70
Tabela 8: Características das malhas testadas.....	76
Tabela 9: Características da fonte nos três casos de simulação apresentados.....	76
Tabela 10: Características no interior do túnel no momento do acidente.....	77
Tabela 11: Números adimensionais para os casos A, B e C.....	78
Tabela 12: Resultados de parâmetros das simulações (malha M2).....	78

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

FEM	–	Método dos Elementos Finitos (<i>Finite Element Method</i>)
LES	–	Simulação das Grandes Escalas de Turbulência (<i>Large Eddy Simulation</i>)
DNS	–	Simulação Direta das Escalas de Turbulência (Direct Numerical Simulation)
CFD	–	Fluidodinâmica Computacional (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
GiD	–	<i>The Personal Pre and Post Processor</i>
IEN	–	<i>Instituto de Engenharia Nuclear</i>
CNEN	–	Comissão Nacional de Energia Nuclear

LISTA DE SÍMBOLOS

Ω	–	Domínio limitado aberto
Γ	–	Contorno de limitação do domínio
ϕ	–	Concentração da primeira espécie
$\Delta \phi$	–	Variação temporal da concentração ϕ
ϕ_0	–	Concentração inicial da primeira espécie
φ	–	Concentração da segunda espécie
$\Delta \varphi$	–	Variação temporal da concentração φ
u_α	–	Componentes cartesianas da velocidade
Δu_α	–	Componentes cartesianas da variação temporal do campo de velocidade
p	–	Pressão
Δp	–	variação temporal do campo de pressão
T	–	Temperatura
ΔT	–	variação temporal do campo de temperatura
Δt	–	Passo de tempo
τ_{ab}	–	Componentes cartesianas do tensor de tensão viscosa
μ	–	Viscosidade do fluido

q_b	–	Componentes cartesianas do fluxo de calor
k	–	Difusividade térmica
ξ_b	–	Componentes cartesianas do fluxo difusivo de ϕ
η_b	–	Componentes cartesianas do fluxo difusivo de φ
t_a	–	Componentes cartesianas da tensão
$G(\mathbf{x}, t)$	–	Velocidade normal à fronteira
λ	–	Constante radioativa
β	–	Coefficiente de expansão volumétrica
ρ	–	Densidade do fluido
ψ	–	Difusividade molecular de ϕ
ζ	–	Difusividade molecular de φ
c	–	Capacidade térmica
λ_i	–	Parâmetros de normalização
$w^{n+\theta}$	–	valor de uma variável w no tempo $n + \theta$
\bar{w}	–	valor prescrito de w
w'	–	w unidimensional
\hat{w}	–	valor de uma variável w
$\Delta\hat{w}$	–	variações de w para passos de tempo específicos

w_j^*	–	Solução sincronizada em t^*
Δw_j^*	–	Variações nodais das variações de w de t^n a t^* .
w_j	–	Valor de w no nó j
N_j	–	Função de forma no nó j
Π_i	–	Resíduos quadrados da discretização
\hat{R}_a	–	Componentes cartesianas do resíduo da discretização da equação de quantidade de movimento
\hat{E}	–	Resíduo da discretização da equação de energia
\hat{C}	–	Resíduo da discretização da equação de concentração ϕ
\hat{S}	–	Resíduo da discretização da equação de concentração φ
W_i	–	Função peso do nó i
$G(\mathbf{r})$	–	Função de filtro
Δ	–	Largura do filtro
h_e	–	Tamanho característico do elemento
t_c	–	Escala de tempo de convecção
t_d	–	Escala de tempo de difusão
Re_h	–	Número de Reynolds do elemento finito
Pe_h	–	Número de Peclet do elemento finito

- R_e - Número de Reynolds do problema
- P_e - Número de Peclet do problema
- R_a - Número de Rayleigh
- D_a - Número de Damköhler
- P_r - Número de Prandtl
- R_i - Número de Richardson
- α - Parâmetro ótimo de *upwind*
- α' - Parâmetro de *upwind* definido pelas escalas de tempo de convecção/difusão
- Δt^* - Passo de tempo de sincronização

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	CONTEXTUALIZAÇÃO	1
1.2	OBJETIVO	2
1.3	JUSTIFICATIVA	3
1.4	ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	6
2	MODELAGEM FÍSICA	7
2.1	NÍVEIS DE MODELAGEM	7
2.2	MODELOS DE TURBULÊNCIA	12
2.2.1	<i>Método RANS</i>	14
2.2.2	<i>Método LES</i>	15
3	METODOLOGIA	16
3.1	EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DE MOMENTO, ENERGIA E TRANSPORTE COM DECAIMENTO RADIOATIVO.....	18
3.1.1	<i>Equações governantes na forma adimensional</i>	22
3.2	FORMULAÇÃO ESTABILIZADA DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS	23
3.2.1	<i>Modelagem Submalha Implícita</i>	30
3.2.2	<i>Passos Locais de Tempo e Sincronização, a Escolha do Δt</i>	34
4	CÓDIGO COMPUTACIONAL	42
4.1	SISTEMA DE COMPUTAÇÃO PARALELA	45
5	VALIDAÇÃO	49
5.1	CAVIDADE CUBICA 3D – VALIDANDO A FLUIDODINÂMICA	50
5.1.1	<i>Resultados para as validações de fluidodinâmica</i>	53
5.2	CAVIDADE CUBICA 3D – VALIDANDO O DECAIMENTO RADIOATIVO	69
6	APLICAÇÃO	75
6.1	ESTUDO DE CASOS	75
6.1.1	<i>Caso A</i>	78
6.1.2	<i>Caso B</i>	81
6.1.3	<i>Caso C</i>	82
6.2	DESEMPENHO DO PROCESSAMENTO EM PARALELO	84
7	CONCLUSÕES	85
7.1	RESULTADOS	85
7.2	RECOMENDAÇÕES	86

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS89

1 INTRODUÇÃO

1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

Durante as últimas décadas acidentes isolados como o de Fukushima Daiichi em 2011 (VIVODA, 2012) e (YUE ZHAO, 2012) e o de Goiânia em 1987 envolvendo a dispersão de radionuclídeos, a contaminação do meio ambiente e doses de radiação para o ser humano, alimentaram a visão prematura estabelecida socialmente de que o uso de radiação seja uma potencial ameaça à vida.

Paralelamente, a cada dia, novas técnicas nucleares são desenvolvidas nos diversos campos da atividade humana, possibilitando a execução de tarefas impossíveis de serem realizadas pelos meios convencionais e otimizando as já existentes. Um exemplo de otimização é a produção de energia elétrica por meio de fontes nucleares, uma vez que em quantidade de energia, 1kg de urânio corresponde a 10 toneladas de petróleo e 20 toneladas de carvão (INB). Além disso, sua emissão de gases causadores do efeito estufa é mínima, se comparada com aquela dos combustíveis fósseis. Mas, infelizmente, os benefícios da tecnologia nuclear são pouco divulgados, dando espaço para que a sociedade mantenha a postura conservadora de oposição quando se trata de apoiar o desenvolvimento dessas tecnologias.

O uso de radiação para benefícios humanos depende de contínua informação e esclarecimento à sociedade e aos governantes, e de que seja demonstrado de maneira convincente que os benefícios superam amplamente os riscos da sua utilização. Para isso, é necessário atingir os principais pontos que afetam a percepção social do risco e que se traduzem no estabelecimento de uma aversão aos impactos da radioatividade. Disso depende o financiamento futuro de pesquisas envolvendo elementos radioativos e a ampliação da produção de energia elétrica a partir de fontes nucleares. Caso contrário, a opinião pública continuará contrária ao avanço de tecnologias ligadas a radiação.

Contudo, instalações radiativas e/ou nucleares de diversas naturezas - como centrais nucleares e plantas de produção de radiofármacos - embora obedeçam às rígidas normas de segurança para sua construção e operação, estão sujeitas à algum tipo de dispersão de radionuclídeos e, embora de pequena probabilidade, acidental de efluentes radioativos. Ocorrências como estas últimas são peculiares e tendem a se desenvolver de maneira particular em cada situação. Por isso é importante o desenvolvimento de métodos ou técnicas que permitam o estudo dos fatores que influenciam a forma como ocorre a dispersão, e a predição do comportamento da pluma. Buscando antever o direcionamento da maior concentração na pluma e/ou de maior dose radioativa, de modo a possibilitar a mitigação de suas consequências radiológicas e evitar possíveis danos à vida.

Dentre os propósitos de se estudar a dispersão de radionuclídeos produzidos e/ou liberados por essas instalações é primordial a obtenção de dados para análises de segurança e ambiental. Este trabalho alinha-se à necessidade de prover as informações necessárias para mitigar as consequências no caso de um acidente.

Em qualquer um desses cenários, modelos apropriados e ferramentas computacionais são imprescindíveis, impactando também na concepção e dimensionamento das instalações, desde o prédio de contenção de um reator até os dutos de ventilação de plantas de mineração subterrânea de urânio.

1.2 OBJETIVO

Diante da importância dos estudos de dispersão de radionuclídeos para a ciência e tecnologia, essa dissertação se propõe ao desenvolvimento e aplicação de um código computacional em linguagem Fortran. Esse código computacional é capaz de simular de forma bastante realística a fluidodinâmica da dispersão e o decaimento radioativo dos elementos constituintes da pluma, bem como a produção dos radionuclídeos subsequentes.

Nesta dissertação, o código produzido, chamado `ns_solver_MPI_3d_cd` gera resultados satisfatórios na simulação e análise do comportamento dinâmico da pluma radioativa em dispersões dessa natureza. Sua característica tridimensional associada ao transiente permite estimar a concentração e natureza dos radionuclídeos próximo à fonte e em qualquer momento após o acidente. Característica importante, não presente em estudos bidimensionais anteriores (DE SAMPAIO; GONÇALVES & LAPA, 2008), resultando neste caso em superestimar a concentração e a possível dose radioativa no domínio de estudo. De fato, o código produzido no presente trabalho oferece uma ferramenta poderosa de simulação desses fenômenos.

Esse estudo é feito via Fluidodinâmica Computacional – *Computational Fluid Dynamics* - CFD, aplicada à dispersão de radionuclídeos e utilizando-se um método estabilizado de elementos finitos. A principal característica do método é a derivação de uma equação discretizada para a pressão, onde as contribuições de pressão provenientes dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia são tomadas de forma implícita na discretização temporal. Dessa forma, a estrutura dos termos de estabilização aparece naturalmente a partir da minimização do resíduo do quadrado das equações de conservação. A escolha do *time-step* local de acordo com as escalas de tempo relevantes dos processos físicos, desempenha o papel dos parâmetros de estabilização.

A Simulação das Grandes Escalas de turbulência – Large Eddy Simulation - LES, baseada nas equações de Navier-Stokes tridimensional, em sua forma incompressível, malha de elementos finitos e técnicas de computação paralela e distribuída compõem essa dissertação.

1.3 JUSTIFICATIVA

Um grande número de trabalhos tem sido feitos com o objetivo de entender e simular a dispersão de radionuclídeos, alguns exemplos são (GONÇALVES JR, 2006) e (VENKATESAN, MATHIYARASU e M., 2002). De forma geral, esses

estudos são baseados em modelos simples e limitados, que usam equações médias ou muitas simplificações, apresentando um custo computacional relativamente baixo. Isso faz com que o problema se torne consideravelmente simplificado e, possivelmente, discrepante da situação real. Esses modelos são extremamente úteis para a análise a que se propõem, contudo, são falhos no nível de realidade espacial exigido para determinados fins (GONÇALVES, 2006) e/ou no tratamento da turbulência gerada localmente (VENKATESAN; MATHIYARASU, 2002).

A turbulência é um fenômeno muito comum em movimento de fluidos, porém, gera modelagens matemáticas sem soluções analíticas. Portanto, torna-se necessário o uso de métodos numéricos para a obtenção das soluções. escoamentos turbulentos possuem algumas características comuns, como elevado número de Reynolds e dissipação viscosa, no entanto, a descrição da turbulência em modelos matemáticos não é uma tarefa simples. Dadas as dificuldades, muitos estudos foram realizados com o intuito de representar de forma mais fidedigna possível a turbulência em modelos solucionáveis numericamente. Essa realidade levou à pesquisas e ao desenvolvimento das mais diversas formas de tratamento do problema do escoamento turbulento.

Dentre outras coisas, a fidedignidade da solução tem relação direta com a escala espaço-tempo adotada. Sabe-se que os vórtices constituintes do escoamento turbulento são de tamanhos variados e seu limite superior de tamanho tem relação com as dimensões dos obstáculos existentes ao escoamento. Já o limite inferior de tamanho dos vórtices é determinado pela viscosidade. Por conseguinte, a turbulência é um fenômeno que pode ser abordado pela mecânica do contínuo, visto que as menores escalas ainda são muito maiores que o comprimento molecular.

Quando se pretende capturar todas as escalas espaciais e temporais do problema, algumas das soluções numéricas tornam-se inviáveis devido ao elevado custo computacional. Por outro lado, a viabilidade pode ser alcançada a partir de algumas restrições aplicadas ao objeto de análise. Por exemplo, no contexto em que se insere esta dissertação, analisar-se-á o comportamento da pluma principalmente nas regiões circundantes à fonte.

Essa perspectiva, subsidiada por aspectos afetos à análise de segurança, cria dificuldades no que tange a seleção, modelagem e solução dos fenômenos relevantes, sem, porém, constituir um demérito a este trabalho. Na verdade esse é um de seus méritos, pois, considerar a influência e o comportamento da fonte emissora e sua interação com o escoamento são características comumente ausentes em estudos de dispersão. Ainda nesse contexto, a natureza da dispersão e fenômenos locais (como gradientes de velocidade e temperatura) também são aqui considerados como parâmetros responsáveis pelos fenômenos turbulentos.

Para tratar fenômenos com essas características, este trabalho propõe, com base em (DE SAMPAIO, *et al.*, 2008), uma formulação estabilizada dos elementos finitos para aproximar a solução do modelo físico que é baseado nas equações de Navier-Stokes, uma equação de convecção-difusão de energia para a temperatura e equações de transporte e decaimento para as concentrações de radionuclídeos liberados. A formulação estabilizada de elementos finitos pode ser interpretada como um método Multiescala Variacional – Variational Multiscale (VMS) (HUGHES, 1995) (HUGHES, *et al.*, 1998) (HUGHES, *et al.*, 2001) (GRAVEMEIER, 2006), cuja aplicação resulta na Simulação das Grandes Escalas – (LES), com um modelo submalha implícito e gerado pela própria formulação (MARGOLIN; RIDER, 2002), (DE SAMPAIO, *et al.*, 2004) e (GRINSTEIN, *et al.*, 2005).

De fato, o método selecionado (CFD/LES), reúne as características necessárias à simulação dos fenômenos relevantes à dispersão para esta dissertação. A CFD/LES baseia-se na proposta de simular diretamente a turbulência nas grandes escalas e introduzir as influências dos pequenos vórtices através dos chamados termos de estabilização da formulação dos elementos finitos. Essa é uma metodologia conceitualmente adequada às características naturais da turbulência. Os grandes vórtices, que surgem da interação do escoamento com os grandes obstáculos, têm características individuais e são mais bem representados quando capturados diretamente pela discretização. Por outro lado, os pequenos vórtices têm características mais universais, guardando uma relação mais distante com a fonte de turbulência original. Isto torna os pequenos vórtices mais adequados a uma modelagem universal através dos modelos submalha. Tais modelos podem ser explícitos ou implícitos, como o que é utilizado neste trabalho.

1.4 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

No capítulo 1 foi feita a introdução, nela foi exposta a contextualização do assunto tendo em vista o objetivo da dissertação, estudos de dispersão de radionuclídeos via fluidodinâmica computacional. Nessa parte foram desenvolvidas também a justificativa e organização do trabalho. O capítulo 2 discute a modelagem física para escoamentos, bem como alguns níveis de modelagem que usualmente são empregados. Apresenta ainda, alguns modelos de turbulência. O capítulo 3 apresenta a metodologia seguida, a formulação estabilizada de elementos finitos, onde se enfatiza a conexão entre o presente método e a aproximação Multiescala Variacional/Simulação das Grandes Escalas de Turbulência (VMS/LES). A implementação computacional, incluindo técnicas de programação paralela são descritas no capítulo 4. No capítulo 5 o código computacional é validado, sendo aplicado a problemas clássicos, e seus resultados, comparados a *benchmarks* da literatura. O capítulo 6 mostra uma aplicação em que se utiliza o código validado em uma ideia bastante geral, simples, mas que representa bem a fluidodinâmica com transporte de energia e de radionuclídeos com decaimento. Dessa forma, demonstra-se o potencial da ferramenta para simulação da pluma radioativa em situação de acidente. Finalmente, o capítulo 7 apresenta as conclusões finais e faz sugestões para a continuação do desenvolvimento da metodologia proposta neste trabalho.

2 MODELAGEM FÍSICA

Quando se deseja obter e analisar o comportamento de uma pluma radioativa há de se entender e estudar a fluidodinâmica e o decaimento radioativo presentes no problema. Neste capítulo discutem-se os aspectos relevantes a modelagem física para um problema desse tipo.

2.1 NÍVEIS DE MODELAGEM

Para viabilizar a modelagem de problemas em mecânica dos fluidos, assim como em outras ciências, algumas aproximações devem ser feitas. Essas aproximações qualificam os diversos modelos de escoamentos existentes e são feitas em vários níveis hierárquicos. De acordo com a classificação proposta por (HIRSCH, 1990), os níveis de aproximação são os seguintes:

- Nível de realidade

Esse nível de aproximação corresponde às descrições utilizadas para retratar o mundo físico. Isso compreende as várias escalas, desde a escala subatômica, passando pela escala macroscópica, da mecânica clássica, até a escala astronômica. Cada nível abordado tem seu número de variáveis dependentes.

O movimento estatístico de um gás rarefeito usa variáveis microscópicas para sua descrição. Nesse nível não é possível lidar apropriadamente com os conceitos macroscópicos e de escoamento de fluidos. Dessa forma, a dinâmica de fluidos só começa a existir quando o número de interações entre as moléculas aumenta e a ideia de um movimento médio torna-se significativo. Essa é a chamada mecânica do contínuo, onde o conceito de partícula de fluido é indubitável. Desse modo,

não há necessidade de referência explícita ao mundo microscópico de átomos e moléculas (SPENCER, 1980).

A mecânica de fluidos pode então ser entendida como o estudo do comportamento médio das quantidades e propriedades de um grande número de elementos interagindo entre si. As quantidades macroscópicas podem então, ser tratadas como resultados de médias sobre um grande número de interações entre moléculas, que ocorrem no nível microscópico. A validade da hipótese de meio contínuo restringe-se a situações em que a escala de interesse da análise é muito maior do que o livre caminho médio das moléculas do fluido considerado, como é o caso do presente trabalho. Todavia, ao tomar médias perde-se informação e são necessárias informações empíricas adicionais a respeito do fluido em estudo. Essas informações são as chamadas equações constitutivas.

Quando considerada essa hipótese e dos princípios de conservação de massa, quantidade de movimento e energia, é possível descrever matematicamente o comportamento dos fluidos Newtonianos pelas equações de Navier-Stokes. Essas equações originam-se na descrição básica da dinâmica dos fluidos desenvolvida por Euler em 1741 e que foi corrigida para incluir as forças de viscosidade por Navier em 1827 e Stokes em 1945 (BERTULANI).

- Nível temporal

A resolução temporal requerida do modelo de escoamento é conseguida a partir destas considerações. As equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia, que descrevem o escoamento, podem ser obtidas integrando-se as leis de conservação sobre todas as escalas de tempo menores que a escala temporal necessária para a análise do problema. Novamente, essas médias causam perda de informação de modo que os modelos necessitam de complementação através de dados externos adicionais. Um exemplo dessas classes de aproximação são as equações médias de Reynolds, utilizadas em simulações de escoamentos

turbulentos. Essas equações são obtidas fazendo-se as médias das equações de Navier-Stokes e necessitam de modelos de fechamento, baseados em dados experimentais.

- Nível espacial

Embora os escoamentos, de fato, sejam tridimensionais, existem modelos simplificados que utilizam a média das leis de conservação fundamentais ao longo de uma ou duas dimensões espaciais diminuindo com isso o número de dimensões do problema. Esse tipo de modelagem está relacionada a isso, ao número de variáveis espaciais usadas para descrever o escoamento.

Como exemplo desse tipo de aproximação, modelos unidimensionais são frequentemente usados em escoamentos dentro de tubulações e canais no núcleo de reatores nucleares. Os efeitos tridimensionais são introduzidos através de fatores de fricção, correlações de transferência de calor e coeficientes de perda de pressão localizada.

De fato, há limitações quando se reduz o número de variáveis espaciais usadas para descrever o escoamento. Por exemplo, no caso em que se deseja simular a dispersão atmosférica de radionuclídeos, um modelo bidimensional pode não levar em consideração os detalhes tridimensionais dos obstáculos dentro da geometria do problema. Se o objetivo de estimar a concentração e/ou a dose em determinado ponto, um modelo bidimensional pode superestimá-la.

- Nível dinâmico

O nível dinâmico está relacionado à importância relativa entre as forças que governam o escoamento. Dependendo da importância de uma determinada força ou processo, esse(a) pode ser desconsiderado, resultando em uma descrição matemática mais simples.

Em problemas de lubrificação, onde os efeitos viscosos são dominantes, as forças de inércia são normalmente desprezadas. Em outros casos, modelos simplificados são aplicados em diferentes regiões do escoamento. Um exemplo é a aproximação da camada limite de Prandtl para a análise de escoamentos viscosos externos. Neste caso, uma aproximação para escoamento invíscido é corrigida para levar em conta os efeitos viscosos em regiões próximas à paredes sólidas (SCHLICHTING, 1971).

- o Nível de homogeneidade

O nível de homogeneidade pode ser aplicado a escoamentos multifásicos e escoamentos em meios porosos. Nesse caso, as equações dos modelos são obtidas tomando-se a média das equações de conservação em volumes contendo misturas de diferentes materiais. Dados externos, contendo informações sobre trocas de massa, quantidade de movimento e energia nas interfaces dos materiais, são necessários.

Os vários níveis de aproximação podem estar presentes, simultaneamente, nos modelos de escoamento. Os modelos unidimensionais de engenharia nuclear, por exemplo, incluem tanto o nível temporal quanto o nível espacial, para escoamento de uma única fase, incluindo ainda o nível de aproximação de homogeneidade para problemas multifásicos. Vale ressaltar que modelos simplificados perdem sua generalidade.

Para muitos dos escoamentos de interesse da engenharia é conveniente a descrição do domínio da mecânica do contínuo que pode ser considerada como modelo fundamental. Submodelos podem ser derivados através de médias e/ou suposições sobre a importância relativa das várias forças que governam o escoamento (MOREIRA, 1998). Outro aspecto importante é que quanto mais aproximações são feitas, mais os modelos tornam-se dependentes de dados empíricos.

Neste trabalho, em nível dinâmico, será feita a simplificação de desconsiderar os efeitos difusivos no que tange ao transporte das concentrações

dos radionuclídeos, dada a importância do fenômeno convectivo frente ao difusivo nesse tipo de problema.

A maior parte dos escoamentos em mecânica dos fluidos pode ser classificada em uma dessas duas categorias. Em geral, o escoamento de líquidos é aproximado como incompressível enquanto que o escoamento de gases é tomado como compressível. Entretanto, essa classificação não é absoluta, pois mesmo os líquidos apresentam alguma compressibilidade e o escoamento de gases a baixas velocidades pode ser aproximado como incompressível. Enfim, não há uma linha divisória clara que permita uma distinção absoluta entre escoamento compressível e escoamento incompressível.

A escolha entre considerar ou não efeitos de compressibilidade depende principalmente do tipo de problema que se tem em mãos. Por exemplo, o estudo de explosões subaquáticas requer o modelo compressível, enquanto que o cálculo do coeficiente de arraste de um automóvel pode ser obtido via modelo incompressível.

Na prática, escoamentos quase-incompressíveis são usualmente tratados como incompressíveis. Desta forma, os efeitos da compressibilidade são eliminados antes da utilização de qualquer método de discretização específico. Isto é conseguido através de uma mudança do modelo físico e matemático, onde a equação de conservação de massa original e a equação de estado do fluido são substituídas pela condição de incompressibilidade, estabelecendo que o campo de velocidade seja solenoidal ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$). Nesse contexto, a pressão deixa de ser uma propriedade termodinâmica relacionada com a densidade através da equação de estado, e a descrição termodinâmica do fluido é perdida. Do ponto de vista matemático, o comportamento hiperbólico da pressão, manifestado através da propagação de ondas de pressão, desaparece por completo (DE SAMPAIO, 1991). No modelo incompressível a pressão adquire o caráter elíptico, sendo determinada a partir de condições de contorno e da conservação da quantidade de movimento, de tal forma que a condição $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ seja satisfeita.

De fato, a importância da compressibilidade não se restringe apenas ao aspecto físico, mas repercute diretamente nas características matemáticas das

equações que representam o modelo (MOREIRA, 1998) e (DE SAMPAIO e MOREIRA, 2000). A compressibilidade do escoamento pode ser inferida a partir do número adimensional de Mach, que reflete a relação entre a velocidade de um objeto ou fluido e a velocidade do som, sendo definido por $M = v_0/v_s$, onde v_0 é a velocidade média do fluido e v_s é a velocidade média do som.

Para valores do número de Mach inferiores a 0,2 o escoamento pode, em geral, ser considerado como incompressível (HIRSCH, 1990). Assim, quando a finalidade é a análise de efeitos dinâmicos é adequado assumir a hipótese de escoamento incompressível como no caso apresentado nesta dissertação.

2.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA

A turbulência, intuitivamente, pode ser entendida como o movimento caótico dos fluidos e que pode apresentar uma grande variedade de escalas temporais e espaciais. Dessa forma, o escoamento turbulento é usualmente tratado com a superposição de um escoamento fundamental, médio, com flutuações dinâmicas e estocásticas.

Na turbulência a energia cinética é retirada do escoamento médio pelos maiores turbilhões – *eddies* ou *whorls* – sendo transferida por um processo em cascata até os menores turbilhões, onde é dissipada em forma de calor pela viscosidade.

Além disso, a turbulência é um fenômeno inerentemente tridimensional e variável no tempo (WILCOX, 2000). Devido a essas características físicas a criação de um modelo matemático de turbulência é uma tarefa difícil que exige o desenvolvimento de modelos específicos para cada situação.

O nível de complexidade dos modelos, contudo, está relacionado diretamente com o que se deseja analisar. Por exemplo, quando se deseja obter informações sobre a camada de atrito, em um escoamento aderente, um modelo simples, como o comprimento de mistura (*mixing length*), é suficiente. Por outro lado,

quando se almeja obter a história no tempo de cada aspecto de turbulência, somente a solução completa das equações de Navier-Stokes fornece resultados satisfatórios (WILCOX, 2000).

O início da turbulência depende da razão entre as forças de inércia e as forças viscosas, que definem um parâmetro adimensional, o número de Reynolds, $R_s = \rho u D / \mu$, onde u é velocidade média do fluido, D é um comprimento característico do fluxo, μ é a viscosidade dinâmica do fluido e ρ sua massa específica.

Para baixos valores desse parâmetro as forças de viscosidade são dominantes e o escoamento é bem comportado, classificado como escoamento laminar. Para elevados valores de Reynolds, ao contrário, as forças de inércia superam as de viscosidade e o escoamento torna-se turbulento, caracterizado por rápidas flutuações nas pressões e nas velocidades (TU; YEOH; LIU, 2008).

Há três caminhos principais para o estudo numérico de escoamentos turbulentos. O primeiro deles propõe a simulação numérica de todas as escalas espaciais e temporais e é conhecido pela sigla DNS – Simulação numérica direta. Neste método as malhas, para modelos discretos, devem ser extremamente refinadas. Seu maior inconveniente é, portanto a elevada demanda de esforço computacional. Devido a sua performance é amplamente utilizado para estudos onde se deseja obter um entendimento mais aprofundado dos mecanismos de turbulência, dessa forma se pode construir uma base de dados para melhorar outros métodos menos acurados, como o LES e o RANS, todavia de menor custo (HIRSCH, 1990).

Portanto, num outro extremo há modelos aproximados, em que são as propriedades estatísticas do escoamento, tais como distribuições de probabilidade de velocidade ou taxa de consumo de energia, que são importantes. Um dos métodos comumente usados é o RANS – equações de Navier-Stokes médias - no qual as variáveis das equações de Navier-Stokes são aproximadas por suas médias temporais, ou seja, esse modelo ignora as flutuações turbulentas e calcula apenas a turbulência média no fluxo (HIRSCH, 1990). Vale ressaltar que o modelo adotado

tem relação com o que se deseja analisar no escoamento, portanto, dentre os métodos mais estudados, numa posição intermediária entre o DNS e o RANS há o LES - Simulação das grandes escalas, que simula, ou seja, resolve numericamente as grandes escalas da turbulência no espaço e no tempo, mas apenas até determinada escala de comprimento, modelando as escalas menores, não resolvíveis. Com ele é possível fazer uma análise mais completa da turbulência no fluxo, se comparado ao RANS.

No modelo DNS as equações são de Navier-Stokes na forma original. No RANS o problema consiste em resolver as equações médias de Reynolds descritas pelas médias das variáveis e pelas equações dos modelos de fechamento adicionais elaboradas para os termos que incorporam os efeitos de turbulência e que aparecem explicitamente nesse procedimento, como será visto na subseção seguinte. No LES resolvem-se as equações de Navier-Stokes filtradas conjuntamente com modelos próprios para as escalas irresolvíveis, como será visto na subseção subsequente.

2.2.1 Método RANS

O método RANS utiliza médias temporais das equações de Navier-Stokes para obter as equações médias de Reynolds. A não linearidade do termo convectivo da conservação da quantidade de movimento produz, a partir da média temporal, um termo de tensão adicional na equação média de Reynolds. Esse tensor é conhecido como tensor de Reynolds e requer modelos de fechamento apropriados.

No entanto, para a simulação de escoamentos externos ao redor de estruturas, como é o caso de dispersões para o exterior em terrenos rodeados de construções, há dois aspectos relevantes a ser considerados: Um deles é a dificuldade conceitual inerente ao RANS quando aplicado a escoamentos em que o campo médio de velocidades evolui no tempo. Essa metodologia não estabelece de forma clara como separar adequadamente o transiente do campo médio de velocidades das flutuações de natureza turbulenta (ANDERSON; TANNEHILL; PLETCHER, 1984). O outro problema da metodologia RANS diz respeito às dificuldades de se estabelecer modelos universais de turbulência apropriados para

uma ampla faixa de escalas. Enquanto as menores escalas tendem a depender apenas da viscosidade, tendo de certo modo um comportamento mais universal, as grandes escalas são fortemente afetadas por condições de contorno específicas de cada problema. Dessa forma, segundo (PIOMELLI), não é adequado modelar o efeito das grandes escalas sempre da mesma forma, para escoamentos de características diferentes.

2.2.2 Método LES

Conforme mencionado, as menores escalas têm caráter mais universal, e portanto, são mais adequadas à modelagem. Portanto, na simulação LES o objetivo é simular explicitamente as grandes escalas do fluxo turbulento enquanto se modela as pequenas. Para isso, é feita a filtragem das equações de Navier-Stokes, por meio desse procedimento se obtém as equações das grandes escalas de movimento. Assim como no RANS, a não linearidade traz dificuldades, nesse caso, impossibilita a obtenção exata das equações das quantidades filtradas e um termo análogo ao da tensão de Reynolds do RANS é produzido precisando ser modelado.

3 METODOLOGIA

Segundo (HIRSCH, 1990), as componentes principais de um sistema de simulação de CFD estão bem representadas na Figura 1. Embora não sejam seguidas fidedignamente nessa ordem nesta dissertação, são bastante completas servindo de base para o desenvolvimento de uma metodologia. A referência enumera um passo-a-passo que será apresentado a seguir.

O primeiro estágio é escolhido o modelo matemático e são também definidos o nível de realidade a ser simulado. O segundo diz respeito à discretização, constituída de duas componentes principais, a geração da malha seguida pela discretização das equações, definindo um esquema numérico. No terceiro estágio o esquema numérico deve ser analisado e suas propriedades de estabilidade e acurácia devem ser estabelecidas. No estágio seguinte, a solução numérica deve ser obtida, por um método de integração no tempo e técnicas de aceleração de convergência. E no estágio final, o quinto, o pós-processamento numérico dos dados para entender e interpretar as propriedades físicas obtidas como resultado da simulação.

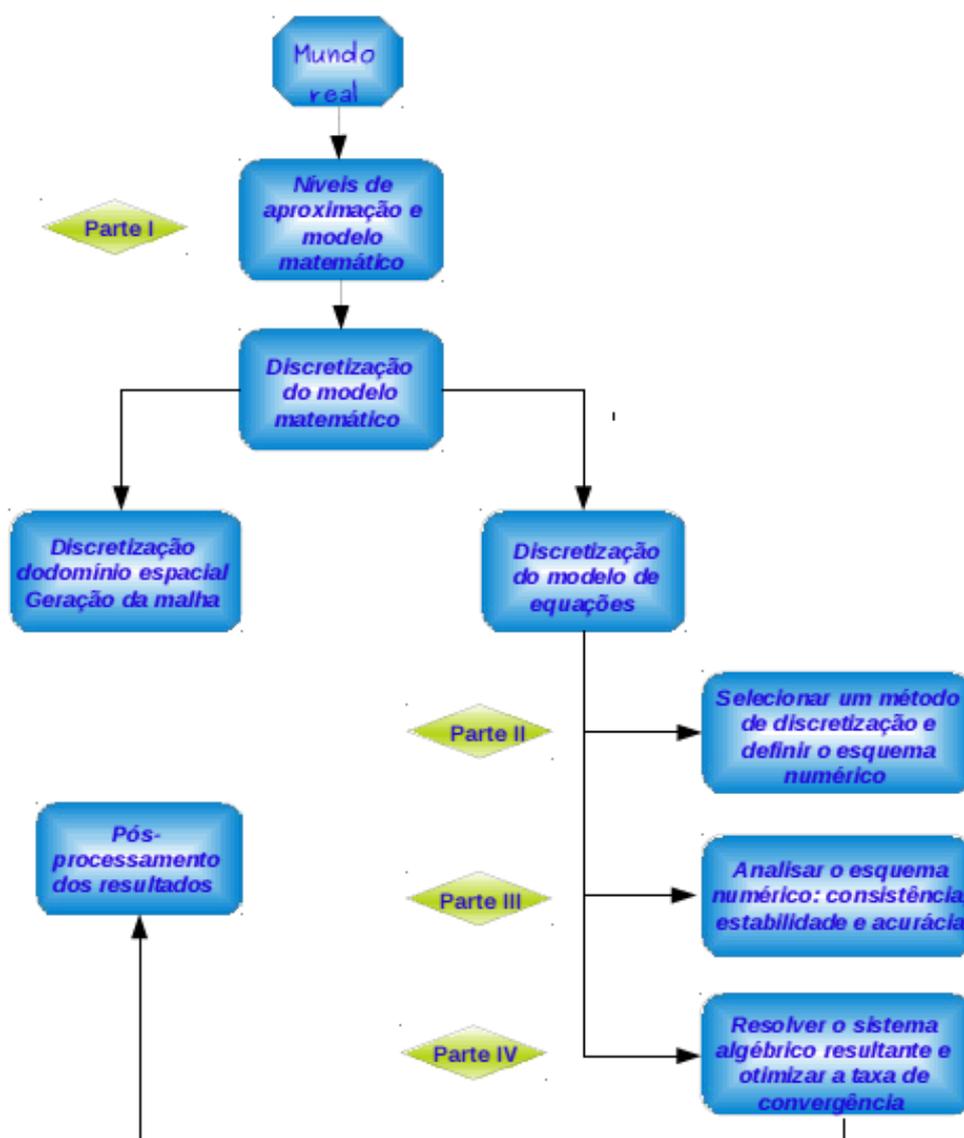


Figura 1: Estrutura do sistema de simulação CFD (HIRSCH, 1990).

As duas primeiras etapas foram realizadas com, por exemplo, a escolha do nível de realidade como sendo o meio contínuo. Já em nível dinâmico as simplificações feitas desconsideram a compressibilidade, adotando-se um modelo incompressível, e desconsidera-se também os efeitos difusivos no que tange ao transporte das concentrações dos radionuclídeos, dada a importância do fenômeno convectivo frente ao difusivo nesse tipo de problema. Portanto, restando apresentar as equações governantes do escoamento para as próximas etapas.

3.1 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO DE MOMENTO, ENERGIA E TRANSPORTE COM DECAIMENTO RADIOATIVO

O método a ser utilizado possui uma característica principal (DE SAMPAIO, 2005) que é a derivação de uma equação discretizada para pressão, onde os balanços de massa e de quantidade de movimento são tomados de forma implícita na discretização temporal. Dessa forma, a estrutura dos termos de estabilização aparece naturalmente a partir da minimização do resíduo do quadrado das equações de conservação. A escolha do *time-step* local de acordo com as escalas de tempo relevantes dos processos físicos, desempenha o papel dos parâmetros de estabilização.

Para escoamentos incompressíveis e com viscosidade constante, incluindo as forças de flutuação, o problema pode ser descrito pelas equações de Navier-Stokes apresentadas a seguir. Essas equações são apresentadas em uma descrição Euleriana, onde as propriedades características do meio são consideradas funções do espaço e do tempo. O problema é definido em um domínio Ω com contorno Γ contendo *nde* dimensões no espaço Euclidiano. Usando a convenção de somatório, notação de Einstein, com $a=1,\dots,nde$ e $b=1,\dots,nde$ essas equações assumem a forma:

Equação da conservação da quantidade de movimento

$$\rho \left(\frac{\partial u_a}{\partial t} + u_b \frac{\partial u_a}{\partial x_b} \right) - \frac{\partial \tau_{ab}}{\partial x_b} + \frac{\partial p}{\partial x_a} + \rho \beta g_a (T - T_0) = 0 \quad (1)$$

Equação da conservação de massa

$$\frac{\partial u_a}{\partial x_a} = 0 \quad (2)$$

Equação do transporte, convecção-difusão de energia

$$\rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_b \frac{\partial T}{\partial x_b} \right) + \frac{\partial q_b}{\partial x_b} = 0 \quad (3)$$

Matematicamente os fluxos difusivos aparecem por meio dos termos com derivada de segunda ordem no espaço como consequência da generalização da lei de Fick. Eles expressam a essência do fenômeno de difusão molecular como tendência de atenuar os gradientes. Os fluxos convectivos, por outro lado, aparecem nos termos de derivadas de primeira ordem no espaço e expressam as propriedades de transporte de um sistema de fluxo (HIRSCH, 1990).

O primeiro termo no lado esquerdo da equação (1) representa o transiente, a evolução temporal. O segundo termo representa a convecção e torna a equação de transporte de momento não-linear, envolvendo o produto da velocidade com seu gradiente. Já o terceiro e o quarto termos têm relação com as tensões viscosas e gradiente de pressão, respectivamente. O quinto termo representa as forças de flutuação e estão relacionadas à diferença de temperatura, coeficiente de expansão volumétrica e força gravitacional.

A equação (2) diz respeito à conservação de massa. Visto que os efeitos da compressibilidade são eliminados e o fluxo considerado como sendo incompressível, houve uma mudança do modelo físico e matemático, onde a equação de conservação de massa original do fluido foi substituída pela condição de incompressibilidade, estabelecendo que o campo de velocidade seja solenoidal ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$). Por meio desse modelo a pressão deixou de ser uma propriedade termodinâmica relacionada com a densidade através da equação de estado, e a descrição termodinâmica do fluido foi perdida. Do ponto de vista matemático, o comportamento hiperbólico da pressão, manifestado através da propagação de ondas de pressão, desaparece por completo. No modelo incompressível a pressão adquire o caráter elíptico, sendo determinada a partir de condições de contorno e da conservação da quantidade de movimento, de tal forma que a condição $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ seja satisfeita (MOREIRA, 1998). A equação (3) representa a conservação de energia, onde o primeiro termo é o transiente, o segundo, a convecção de energia e o terceiro, sua difusão.

Esta dissertação se propõe ao tratamento da dinâmica de fluidos com transporte e difusão de energia incluindo o decaimento radioativo. O código computacional apresentado neste trabalho permite a inserção de cadeias complexas

de decaimento com a produção de radionuclídeos-filho. No entanto, isso acarreta em aumento do custo computacional, tendo em vista que cada radionuclídeo a ser acrescentado gera pelo menos um grau de liberdade, a ser resolvido pelo algoritmo. Dada a objetividade do trabalho, sem perda de generalidade, serão assumidos apenas dois radionuclídeos, sendo que o decaimento do primeiro gera o segundo radionuclídeo. Este, estável ou de meia vida muito longa, de forma que seu decaimento em uma terceira espécie pode ser desconsiderado nesta análise.

Equações de transporte e decaimento dos radionuclídeos

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_b \frac{\partial \phi}{\partial x_b} + \frac{\partial \xi_b}{\partial x_b} + \lambda \phi = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_b \frac{\partial \varphi}{\partial x_b} + \frac{\partial \eta_b}{\partial x_b} - \lambda \phi = 0 \quad (5)$$

Além das concentrações ϕ e φ , as variáveis dependentes são os campos de velocidade, pressão e temperatura representados por u_b, p e T respectivamente. A tensão viscosa é dada por $\tau_{ab} = \mu((\partial u_a / \partial x_b) + (\partial u_b / \partial x_a))$, onde μ é a viscosidade do fluido. O fluxo de calor é dado por $q_b = -k(\partial T / \partial x_b)$, onde k é a condutividade térmica do fluido. Os fluxos difusivos ϕ e φ são dados pela Lei de Fick como $\xi_b = -\psi(\partial \phi / \partial x_b)$ e $\eta_b = -\zeta(\partial \varphi / \partial x_b)$, respectivamente, onde ψ e ζ são as correspondentes difusividades moleculares. O calor específico do fluido à pressão constante é representado por c . A densidade do fluido a uma temperatura de referência T_0 é denotada por ρ . O coeficiente de expansão volumétrica do fluido é representado por $\beta = -\rho^{-1}(\partial \rho / \partial T)$, onde ρ é a densidade do fluido. O parâmetro λ é caracterizado pela taxa de decaimento do primeiro radionuclídeo e conforme já mencionado, o segundo radionuclídeo é considerado estável ou de meia vida muito longa, de forma não é considerado o seu decaimento para o tempo de análise dessa dissertação.

O modelo se torna completo introduzindo-se as condições iniciais e de contorno dos campos de velocidade, temperatura e concentração. As condições de velocidade e tração são prescritas por dados fornecidos em partições do contorno não sobrepostas Γ_{ua} e Γ_{ta} de forma que $\Gamma_{ua} \cup \Gamma_{ta} = \Gamma$, de acordo com:

$$u_a = \bar{u}_a(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{ua} \quad (6)$$

$$(-p\delta_{ab} + \tau_{ab})n_b = t_a(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{ta} \quad (7)$$

Onde δ_{ab} é o delta de Kronecker e n_b é a componente cartesiana do vetor normal, que aponta para fora, no contorno.

As condições de contorno de temperatura e fluxo de calor são prescritas por dados fornecidos em partições do contorno não sobrepostas Γ_T e Γ_q de forma que $\Gamma_T \cup \Gamma_q = \Gamma$, de acordo com:

$$T = \bar{T}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_T \quad (8)$$

$$q_b \mathbf{n}_b = \bar{q}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q \quad (9)$$

As condições de contorno de pressão e velocidade normal são prescritas por dados fornecidos em partições do contorno não sobrepostas Γ_p e Γ_G de forma que $\Gamma_p \cup \Gamma_G = \Gamma$, de acordo com:

$$p = \bar{p}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_p \quad (10)$$

$$u_b \mathbf{n}_b = \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_G \quad (11)$$

Note que as equações (1), (2) e (3) envolvem os gradientes de pressão, mas não a pressão exclusivamente. Portanto, pelo menos um valor de referência deve ser fornecido para definir um único campo de pressão.

As condições de contorno para o primeiro radionuclídeo são especificadas: concentração e fluxo difusivo. Em partições do contorno não sobrepostas Γ_ϕ e Γ_ξ de forma que $\Gamma_\phi \cup \Gamma_\xi = \Gamma$, de acordo com:

$$\phi = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\phi} \quad (12)$$

$$\xi_b \mathbf{n}_b = \bar{\xi}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\xi} \quad (13)$$

Similarmente, as condições de contorno para o segundo radionuclídeo são especificadas como:

$$\varphi = \bar{\varphi}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\varphi} \quad (14)$$

$$\eta_b \mathbf{n}_b = \bar{\eta}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_{\eta} \quad (15)$$

Onde partições do contorno são não sobrepostas Γ_{φ} e Γ_{η} de forma que $\Gamma_{\varphi} \cup \Gamma_{\eta} = \Gamma$.

3.1.1 Equações governantes na forma adimensional

Muitas vezes é útil reformular as equações governantes em forma adimensional. Aqui as variáveis estão adimensionalizadas com relação a uma escala de referência convenientemente escolhida dos dados do problema. Os campos adimensionais de velocidade, pressão, temperatura e campos de concentração são representados por $u'_a = u_a/u_0$, $p'_a = p/\rho u_0^2$, $T' = (T - T_0)/(T_{max} - T_{min})$, $\phi' = \phi/\phi_0$ e $\varphi' = \varphi/\phi_0$, respectivamente.

Note que u_0 é a escala de velocidade de referência e T_{min} e T_{max} são as temperaturas mínima e máxima do problema. A escala de referência para os campos de concentração é a concentração inicial da primeira espécie, ϕ_0 . As coordenadas espaciais são adimensionalizadas com respeito ao comprimento de referência L , de forma que $x'_a = x_a/L$. Desse modo, o tempo adimensional fica sendo $t' = tu_0/L$. O campo de gravidade é dimensionalizado com relação ao módulo, ou seja, $g'_a = g_a/\|g\|$.

Em termos das variáveis adimensionais, as equações de governo são escritas como segue:

$$\frac{\partial u'_a}{\partial t'} + u'_b \frac{\partial u'_a}{\partial x'_b} - \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x'_b} \left(\frac{\partial u'_a}{\partial x'_b} + \frac{\partial u'_b}{\partial x'_a} \right) + \frac{\partial p'}{\partial x'_a} + Ri g'_a T' = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial u'_a}{\partial x'_a} = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} + u'_b \frac{\partial T'}{\partial x'_b} - \frac{1}{RePr} \frac{\partial}{\partial x'_b} \left(\frac{\partial T'}{\partial x'_b} \right) = 0 \quad (18)$$

$$\frac{\partial \phi'}{\partial t'} + u'_b \frac{\partial \phi'}{\partial x'_b} - \frac{1}{(Pe)_1} \frac{\partial}{\partial x'_b} \left(\frac{\partial \phi'}{\partial x'_b} \right) + Da\phi' = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t'} + u'_b \frac{\partial \varphi'}{\partial x'_b} - \frac{1}{(Pe)_2} \frac{\partial}{\partial x'_b} \left(\frac{\partial \varphi'}{\partial x'_b} \right) - Da\phi' = 0 \quad (20)$$

Onde $Re = \rho \|\mathbf{u}\|L/\mu$ é o número de Reynolds, já apresentado anteriormente, $Ri = \beta(T_{max} - T_{min})\|\mathbf{g}\|L/u_0^2$ é o número de Richardson, $Pr = c\mu/k$ é o número de Prandtl e $Da = \lambda L/u_0$ é o número de Damköhler. O número de Peclet para os radionuclídeos ϕ e φ são $(Pe)_1 = u_0L/\psi$ e $(Pe)_2 = u_0L/\zeta$ respectivamente.

3.2 FORMULAÇÃO ESTABILIZADA DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Nesta seção será mostrada a derivação da formulação estabilizada do método dos elementos finitos implementada no código computacional `ns_solver_MPI_3d_cd`. Essas idéias foram apresentadas à princípio em (DE SAMPAIO, 2005), (DE SAMPAIO, 2006) e (DE SAMPAIO, GONÇALVES JR e LAPA, 2008) e seguem basicamente a formulação que será apresentada a seguir.

As equações (1) a (5) são discretizadas no tempo, de forma implícita, utilizando o método de diferenças finitas, como segue:

$$\rho \left(\frac{\Delta u_a}{\Delta t} + \theta u_b^n \frac{\partial \Delta u_a}{\partial x_b} \right) + \frac{\partial \Delta p}{\partial x_a} = F_a \quad (21)$$

$$\frac{\partial \Delta u_a}{\partial x_a} = -\frac{\partial u_a^n}{\partial x_a} \quad (22)$$

$$\rho c \left(\frac{\Delta T}{\Delta t} + \theta u_b^n \frac{\partial \Delta T}{\partial x_b} \right) = Q \quad (23)$$

$$\frac{\Delta \phi}{\Delta t} + \theta u_b^n \frac{\partial \Delta \phi}{\partial x_b} = Q_1 \quad (24)$$

$$\frac{\Delta \varphi}{\Delta t} + \theta u_b^n \frac{\partial \Delta \varphi}{\partial x_b} = Q_2 \quad (25)$$

Onde

$$F_a = - \left(\rho u_b \frac{\partial u_a}{\partial x_b} - \frac{\partial \tau_{ab}}{\partial x_b} + \frac{\partial p}{\partial x_a} + \rho \beta g_a (T - T_0) \right)^n \quad (26)$$

$$Q = - \left(\rho c u_b \frac{\partial T}{\partial x_b} + \frac{\partial q_b}{\partial x_b} \right)^n \quad (27)$$

$$Q_1 = - \left(u_b \frac{\partial \phi}{\partial x_b} + \frac{\partial \xi_b}{\partial x_b} + \lambda \phi \right)^n \quad (28)$$

$$Q_2 = - \left(u_b \frac{\partial \varphi}{\partial x_b} + \frac{\partial \eta_b}{\partial x_b} - \lambda \phi \right)^n \quad (29)$$

Os subscritos n e $n + 1$ indicam o nível de tempo e Δt o passo de tempo ou *time-step*. As mudanças das variáveis durante o passo de tempo são dadas por $\Delta p = p^{n+1} - p^n$, $\Delta u_a = u_a^{n+1} - u_a^n$, $\Delta T = T^{n+1} - T^n$, $\Delta \phi = \phi^{n+1} - \phi^n$ e $\Delta \varphi = \varphi^{n+1} - \varphi^n$. Os campos de pressão, velocidade, temperatura e concentrações no tempo $n + \theta$ são representados por $p^{n+\theta} = \theta p^{n+1} + (1 - \theta)p^n$, $u_a^{n+\theta} = \theta u_a^{n+1} + (1 - \theta)u_a^n$, $T^{n+\theta} = \theta T^{n+1} + (1 - \theta)T^n$, $\phi^{n+\theta} = \theta \phi^{n+1} + (1 - \theta)\phi^n$ e $\varphi^{n+\theta} = \theta \varphi^{n+1} + (1 - \theta)\varphi^n$, respectivamente, onde $0 \leq \theta \leq 1$.

As equações acima são discretizadas no espaço usando elementos finitos convencionais de classe C_0 . A mesma ordem de interpolação é usada para aproximar velocidade, pressão, temperatura e concentrações. Tal escolha de

espaços de interpolação não é viável na formulação mista convencional, uma vez que viola a condição de Babuška Brezzi¹ (BREZZI & FORTIN, 1991). Entretanto, a formulação estabilizada apresentada nesta seção evita essas dificuldades através da inserção de termos adicionais que garantem a estabilização (DE SAMPAIO, 1993) e (DE SAMPAIO, 1991) A formulação também conduz a aproximações adequadas em problemas onde a convecção é dominante, gerando o efeito de *upwind* na direção da linha de corrente (Streamline Upwinding - SUPG).

Considerando-se a discretização espacial das variáveis do problema conforme segue: $\hat{p}^n = N_j p_j^n$, $\hat{u}_a^n = N_j u_{aj}^n$, $\hat{T}^n = N_j T_j^n$, $\hat{\phi}^n = N_j \phi_j^n$, $\hat{\varphi}^n = N_j \varphi_j^n$, $\Delta \hat{p} = N_j \Delta p_j$, $\Delta \hat{u}_a = N_j \Delta u_{aj}$, $\Delta \hat{T} = N_j \Delta T_j$, $\Delta \hat{\phi} = N_j \Delta \phi_j$ e $\Delta \hat{\varphi} = N_j \Delta \varphi_j$. De forma que N_j representa as funções de forma do elemento finito e as variáveis com o subscrito j são valores nodais.

Usando os campos das variáveis discretizadas, pode-se escrever as seguintes expressões para os resíduos quadrados gerados pela discretização:

$$\Pi_1 = \int_{\Omega} \gamma_1 \hat{R}_a \hat{R}_a d\Omega \quad (30)$$

$$\Pi_2 = \int_{\Omega} \gamma_2 \hat{E}^2 d\Omega \quad (31)$$

$$\Pi_3 = \int_{\Omega} \gamma_3 \hat{C}^2 d\Omega \quad (32)$$

$$\Pi_4 = \int_{\Omega} \gamma_4 \hat{S}^2 d\Omega \quad (33)$$

Onde γ são parâmetros de escala, a ser definidos posteriormente e \hat{R}_a , \hat{E} , \hat{C} e \hat{S} são resíduos da discretização, dados por:

$$\hat{R}_a = \rho \left(\frac{\Delta \hat{u}_a}{\Delta t} + \theta \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{u}_a}{\partial x_b} \right) + \frac{\partial \Delta \hat{p}}{\partial x_a} - \hat{F}_a \quad (34)$$

¹ Hoje essa condição é chamada Condição InfSup ou condição BNB (Banach-Necas-Babusca), no entanto, preferimos chamar de Condição de Babuška Brezzi neste trabalho porque ela se tornou conhecida assim.

$$\hat{E} = \rho c \left(\frac{\Delta \hat{T}}{\Delta t} + \theta \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{T}}{\partial x_b} \right) - \hat{Q} \quad (35)$$

$$\hat{C} = \frac{\Delta \hat{\phi}}{\Delta t} + \theta \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{\phi}}{\partial x_b} - \hat{Q}_1 \quad (36)$$

$$\hat{S} = \frac{\Delta \hat{\phi}}{\Delta t} + \theta \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{\phi}}{\partial x_b} - \hat{Q}_2 \quad (37)$$

Minimizando Π_1 , equação (30), em relação aos Δp_i livres e aos valores nodais Δu_{ai} livres, obtém-se:

$$\int_{\Omega} \gamma_1 \frac{\rho}{\Delta t} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{R}_a d\Omega = 0 \quad \forall \Delta u_{ai} \text{ livre} \quad (38)$$

$$\int_{\Omega} \gamma_1 \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{R}_a d\Omega = 0 \quad \forall \Delta p_i \text{ livre} \quad (39)$$

Minimizando também Π_2 , equação (31), em relação aos ΔT_i livres, obtém-se:

$$\int_{\Omega} \gamma_2 \frac{\rho c}{\Delta t} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{E} d\Omega = 0 \quad \forall \Delta T_i \text{ livre} \quad (40)$$

E Π_3 e Π_4 , equações (32) e (33), referentes às concentrações, são minimizados com relação aos $\Delta \phi_i$ e $\Delta \varphi_i$ livres, respectivamente, resultando em:

$$\int_{\Omega} \gamma_3 \frac{1}{\Delta t} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{C} d\Omega = 0 \quad \forall \Delta \phi_i \text{ livre} \quad (41)$$

$$\int_{\Omega} \gamma_4 \frac{1}{\Delta t} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{S} d\Omega = 0 \quad \forall \Delta \varphi_i \text{ livre} \quad (42)$$

Os parâmetros γ são escolhidos como $\gamma_1 = \Delta t/\rho$, $\gamma_2 = \Delta t/\rho c$ e $\gamma_3 = \gamma_4 = 1/\Delta t$ de modo a normalizar e adimensionalizar as funções de peso na equação (38) e nas equações (40) a (42). As funções de peso nessas equações têm a mesma estrutura da função peso do método SUPG de (BROOKS & HUGHES, 1982), ou seja, uma estabilidade equivalente.

Aplicando o teorema de Green à equação (38) e usando a condição de contorno da tensão dada pela equação (7) resulta no balanço discretizado da quantidade de movimento:

$$\int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{R}_a d\Omega + \int_{\Gamma_{ta}} N_i [(-\hat{p}^n \delta_{ab} + \hat{t}_{ab}^n) n_b - \bar{t}_a] d\Gamma = 0 \quad \forall \Delta u_{ai} \text{ livre} \quad (43)$$

O balanço discretizado de energia é obtido a partir de (40) e as condições de contorno de fluxo de calor, que são dadas por (9).

$$\int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{E} d\Omega + \int_{\Gamma_q} N_i (\bar{q} - \hat{q}_b^n n_b) d\Gamma = 0 \quad \forall \Delta T_i \text{ livre} \quad (44)$$

As equações discretizadas para o transporte de radionuclídeos ϕ e φ são obtidas das equações (41) e (42) e com o uso das condições de contorno dos respectivos fluxos fornecidos pelas equações (13) e (15).

$$\int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{C} d\Omega + \int_{\Gamma_{\xi}} N_i (\bar{\xi} - \hat{\xi}_b^n n_b) d\Gamma = 0 \quad \forall \Delta \phi_i \text{ livre} \quad (45)$$

$$\int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \right) \hat{S} d\Omega + \int_{\Gamma_{\eta}} N_i (\bar{\eta} - \hat{\eta}_b^n n_b) d\Gamma = 0 \quad \forall \Delta \varphi_i \text{ livre} \quad (46)$$

Uma equação para a atualização da pressão é obtida combinando a equação (39) e o balanço discretizado de massa, dado pela equação (22).

$$\int_{\Omega} \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{R}_a d\Omega + \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\partial \Delta u_a}{\partial x_a} + \frac{\partial u_a^n}{\partial x_a} \right) d\Omega = 0 \quad \forall \Delta p_i \text{ livre} \quad (47)$$

Como foi mostrado nas equações passadas, (DE SAMPAIO, 2005) e (DE SAMPAIO, 2006), introduzindo as condições de contorno adequadas e usando a identidade de Green, a equação acima produz:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \frac{\partial \Delta \hat{p}}{\partial x_a} d\Omega = \\
& \int_{\Omega} \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left[\rho \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} - \frac{\partial \hat{\tau}_{ab}^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{p}^n}{\partial x_a} + \rho \beta g_a (\hat{T} - T_0) \right] d\Omega \\
& + \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_a} d\Omega + \int_{\Gamma_G} N_i (\bar{G}^{n+1} - \bar{G}^n) d\Gamma
\end{aligned} \tag{48}$$

Na equação acima, o cálculo de $\hat{\tau}_{ab}^n$ no interior dos elementos foi realizado de acordo com $\hat{\tau}_{ab}^n = \mu(\partial \hat{u}_a^n / \partial x_b + \partial \hat{u}_b^n / \partial x_a)$.

É importante notar que a equação (48) combina a minimização dos resíduos quadrados da quantidade de movimento em relação à pressão, equação (39), com o balanço discretizado de massa, equação (22). Por isso ela é chamada equação da pressão-continuidade.

Das equações (43) e (44) são obtidas as equações governantes de variação de velocidade e temperatura durante o passo de tempo. Estas são dadas por:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\rho}{\Delta t} \left(\Delta \hat{u}_a + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{u}_a}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\
& - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \\
& \left(\rho \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \Delta \hat{p}}{\partial x_a} + \rho \beta g_a (\hat{T}^n - T_0) \right) d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \left(\frac{\partial \hat{\tau}_{ab}^n}{\partial x_b} - \frac{\partial \hat{p}^n}{\partial x_a} \right) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{\tau}_{ab}^n d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{p}^n d\Omega + \int_{\Gamma_{ta}} N_i \bar{\tau}_a^n d\Gamma
\end{aligned} \tag{49}$$

e

$$\int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\rho c}{\Delta t} \left(\Delta \hat{T} + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{T}}{\partial x_b} \right) d\Omega = \tag{50}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \rho c \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{T}^n}{\partial x_b} d\Omega - \int_{\Omega} \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{q}_b^n}{\partial x_b} d\Omega \\
& \quad + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{q}_b^n d\Omega + \int_{\Gamma_q} N_i \bar{q}^n d\Gamma
\end{aligned}$$

As equações que governam as concentrações ϕ e φ dos radionuclídeos são obtidas das equações (45) e (46), e são respectivamente:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{1}{\Delta t} \left(\Delta \hat{\phi} + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{\phi}}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\
& - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{\phi}^n}{\partial x_b} + \lambda \hat{\phi}^n \right) d\Omega \\
& \quad - \int_{\Omega} \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{\xi}_b^n}{\partial x_b} d\Omega \\
& \quad + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{\xi}_b^n d\Omega - \int_{\Gamma_{\xi}} N_i \bar{\xi}^n d\Gamma
\end{aligned} \tag{51}$$

e

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{1}{\Delta t} \left(\Delta \hat{\varphi} + \theta \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{\varphi}}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\
& - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{\varphi}^n}{\partial x_b} - \lambda \hat{\varphi}^n \right) d\Omega \\
& - \int_{\Omega} \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{\eta}_b^n}{\partial x_b} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{\eta}_b^n d\Omega + \int_{\Gamma_{\eta}} N_i \bar{\eta}^n d\Gamma
\end{aligned} \tag{52}$$

Os termos multiplicados por Δt nas equações (48) a (52) são responsáveis pelo controle das oscilações espaciais, *wiggles*, em escoamentos onde a convecção é dominante, e por estabilizar o cálculo, independente das restrições de Babuška Brezzi na escolha dos espaços de interpolação para velocidade e pressão. Em particular, a mesma ordem de interpolação para todas as variáveis adotadas aqui se torna possível através de uma escolha adequada de Δt . É importante observar que ao contrário de serem propostos *a priori*, os termos de estabilização no presente

método surgem naturalmente da minimização dos resíduos quadrados da discretização com respeito aos graus de liberdade (valores nodais livres).

3.2.1 Modelagem Submalha Implícita

As formulações estabilizadas de elementos finitos, como a que foi derivada acima, introduzem naturalmente uma modelagem para as escalas não resolvíveis. Hughes propôs o *Variational Multiscale Method*, elucidando a relação entre os modelos submalha e formulações estabilizadas de elementos finitos. Nesta parte da dissertação será comparada a formulação estabilizada aqui apresentada com a aproximação LES baseada na filtragem espacial das equações. Será mostrado que a metodologia aqui empregada equivale ao método de discretização de Galerkin das equações filtradas no espaço, onde um modelo submalha particular, proporcional ao resíduo de discretização, é aplicado. No LES as grandes escalas de turbulência são resolvidas pela discretização enquanto as pequenas escalas submalha são consideradas através dos chamados modelos submalha (MATHIEU & SCOTT, 2000). As equações governantes são obtidas pela aplicação formal de uma função-filtro ao sistema original de Navier-Stokes. A operação de filtragem é mostrada na equação (53), onde o filtro é aplicado ao campo de velocidade $u_a(x, t)$, resultando num campo de velocidades filtrado $\bar{u}_a(x, t)$, dado por:

$$\bar{u}_a(x, t) = \int G(x - x') u_a(x', t) dx' \quad (53)$$

A função filtro possui integral unitária no domínio de estudo e decai a zero fora da região $|r| < O(\Delta)$. O parâmetro Δ representa a largura do filtro (MATHIEU & SCOTT, 2000).

Considerando as equações de balanço de massa e quantidade de movimento na forma conservativa escritas abaixo

$$\rho \left(\frac{\partial u_a}{\partial t} + \frac{\partial (u_a u_b)}{\partial x_b} \right) - \frac{\partial \tau_{ab}}{\partial x_b} + \frac{\partial p}{\partial x_a} + \rho \beta g_a (T - T_0) = 0 \quad (54)$$

$$\frac{\partial u_a}{\partial x_a} = 0 \quad (55)$$

Aplicando o filtro, e considerando que a operação de filtragem comuta com a diferenciação, obtém-se o sistema de equações filtradas abaixo:

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_a \bar{u}_b)}{\partial x_b} \right) - \frac{\partial \bar{\tau}_{ab}}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_a} - \frac{\partial \tau_{ab}^F}{\partial x_b} \quad (56)$$

$$+ \rho \beta g_a (\bar{T} - T_0) = 0$$

$$\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial x_a} = 0 \quad (57)$$

Na equação (56) o penúltimo termo representa as quantidades irresolúveis e que são modeladas. Esse termo é dado por $\tau_{ab}^F = \rho(\bar{u}_a \bar{u}_b - \overline{u_a u_b})$. A equação filtrada de quantidade de movimento, (56), pode ser reescrita na forma convectiva usando o balanço de massa filtrado, (57), resultando em:

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_a \bar{u}_b)}{\partial x_b} \right) - \frac{\partial \bar{\tau}_{ab}}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_a} + \frac{\partial \tau_{ab}^f}{\partial x_b} + \rho \beta g_a (\bar{T} - T_0) = 0 \quad (58)$$

O termo τ_{ab}^f definido acima é o tensor de tensões de Reynolds que representa as interações entre as grandes escalas, possíveis de simular, e as escalas irresolúveis ou submalha. Esse termo é formalmente análogo à tensão de Reynolds que surge na derivação das equações médias de Reynolds (RANS). A partir daqui, na aproximação LES convencional, são utilizados modelos submalha para expressar τ_{ab}^f em termos das variáveis filtradas. Um dos mais conhecidos dentre esses modelos submalha é o *modelo de smagorinsky* (MATHIEU; SCOTT, 2000), (WILCOX, 2000) e (SAGAUT, 2001), em que o termo τ_{ab}^f é definido por:

$$\{\tau_{ab}^f\}_{smagorinsky} = \mu_S \left(\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{u}_b}{\partial x_a} \right) \quad (59)$$

$$\mu_S = \rho (C_S h_e)^2 \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{u}_b}{\partial x_a} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{u}_b}{\partial x_a} \right) \right]^{1/2} \quad (60)$$

Onde h_e é o tamanho característico do elemento e C_s é um parâmetro do modelo, ajustado de acordo com o tipo de escoamento, e tipicamente varia de 0,1 a 0,2. Visto que não é o objetivo desta dissertação, para maiores detalhes dos modelos de fechamento usados no LES, pode-se consultar (SAGAUT, 2001).

As equações filtradas de energia e concentrações são obtidas de forma análoga, resultando em:

$$\rho c \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{u}_b \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_b} \right) + \frac{\partial \bar{q}_b}{\partial x_b} + \frac{\partial q_b^F}{\partial x_b} = 0 \quad (61)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \bar{u}_b \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{\xi}_b}{\partial x_b} + \frac{\partial \xi_b^F}{\partial x_b} + \lambda \bar{\phi} = 0 \quad (62)$$

$$\frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial t} + \bar{u}_b \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x_b} + \frac{\partial \bar{\eta}_b}{\partial x_b} + \frac{\partial \eta_b^F}{\partial x_b} - \lambda \bar{\phi} = 0 \quad (63)$$

Onde $q_b^F = \rho c (\overline{u_b T} - \bar{u}_b \bar{T})$, $\xi_b^F = \overline{u_b \phi} - \bar{u}_b \bar{\phi}$ e $\eta_b^F = \overline{u_b \varphi} - \bar{u}_b \bar{\varphi}$ são fluxos que, como τ_{ab}^f , necessitam de modelagem submalha para expressá-los em termos de variáveis filtradas do problema.

A partir desta etapa, para simplificar a notação, serão omitidas as barras que denotam filtragem espacial. Discretiza-se o modelo LES através da aplicação do método de Galerkin à equação filtrada de quantidade de movimento, (58) e obtém-se a equação (64). Aproximando as variáveis filtradas usando a mesma discretização temporal e as mesmas funções de forma de elementos finitos utilizadas para obter o método estabilizado derivado nessa dissertação.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} N_i \rho \left(\frac{\Delta \hat{u}_a}{\Delta t} + \theta \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{u}_a}{\partial x_b} \right) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \Delta \hat{p}}{\partial x_a} d\Omega + \int_{\Omega} N_i \rho \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{u}_a}{\partial x_b} d\Omega + \int_{\Omega} N_i \rho \beta g_a (\bar{T} - T_0) d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} (\hat{p} \delta_{ab} - \hat{\tau}_{ab} - \hat{\tau}_{ab}^F) d\Omega - \int_{\Gamma_{ta}} N_i \bar{t}_a^n d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (64)$$

Onde a condição de contorno de tensão inclui as tensões viscosas submalha, a saber:

$$(\hat{p}\delta_{ab}\hat{t}_{ab} - \hat{t}_{ab}^F)^n n_b = \bar{t}_a^n(x, t) \quad x \in \Gamma_{ta} \quad (65)$$

Comparando então a equação (64), obtida via o uso do método de Galerkin aplicado à equação filtrada de quantidade de movimento, com a forma estabilizada dada pela equação (49), obtida da equação original de Navier-Stokes não-filtrada, pode se observar que ambas são exatamente iguais se a tensão submalha for modelada por $\tau_{ab}^F = \theta\Delta t \hat{u}_b^n \hat{R}_a$, onde \hat{R}_a é o resíduo da discretização dado pela equação (34). Isso quer dizer que a formulação estabilizada, derivada neste trabalho, introduz implicitamente uma modelagem submalha na equação discretizada de quantidade de movimento, equação (49).

Observando que \hat{R}_a , resíduo da discretização da equação de transporte de momento é pequeno em regiões onde o escoamento é bem resolvido, no entanto pode ser significativo quando a malha não é suficientemente refinada para representar gradientes acentuados na solução do problema, assim o efeito de τ_{ab}^F é seletivo, atuando fortemente na escala submalha, mas com efeito desprezível nas escalas resolvíveis. Ou seja, a modelagem apresentada, apesar de semelhante ao LES, naturalmente tende ao DNS conforme o resíduo se torna menor. Note que este não é o caso quando o modelo Smagorinsky é empregado, equações (59) e (60), o qual sempre está ativo na computação, introduzindo uma dissipação excessiva até nas escalas resolvíveis. Outro aspecto importante desse modelo submalha implícito é que ele desaparece nas paredes sólidas, onde a velocidade é nula. Dessa forma, as funções de amortecimento, *damping*, comumente utilizadas em esquemas LES tradicionais não são necessárias para que τ_{ab}^F desapareça nas paredes sólidas.

Um resultado semelhante é obtido ao aplicar o método de Galerkin às equações filtradas de energia e concentrações de radionuclídeos, equações (59) a (61). De maneira análoga, ao comparar também com as formas estabilizadas, equações (50) a (52), verifica-se que o método estabilizado apresentado nesta dissertação introduz implicitamente os modelos submalha a seguir: $q_b^F = \theta\Delta t \hat{u}_b^n \hat{E}$, $\xi_b^F = \theta\Delta t \hat{u}_b^n \hat{C}$ e $\eta_b^F = \theta\Delta t \hat{u}_b^n \hat{S}$. Sendo que \hat{E} , \hat{C} e \hat{S} são os resíduos da discretização dados pelas equações (35) a (37). Dando ênfase no fato de que esse modelo

submalha implícito atua principalmente na escala submalha, com efeito desprezível nas escalas resolvíveis.

3.2.2 *Passos Locais de Tempo e Sincronização, a Escolha do Δt*

O passo de tempo ou *time-step* influi na variação de um grau de liberdade de um tempo n para um tempo $n + \theta$, em que parâmetro θ pode assumir valores na faixa $0 \leq \theta \leq 1$. A metodologia apresentada prevê a possibilidade de escolha desse parâmetro de forma a resultar na melhor aproximação da solução do grau de liberdade no tempo.

Note que nas equações discretizadas, (48) a (52), a função peso é dada por:

$$w_i = N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \quad (66)$$

Assim observa-se que para $\theta > 0$, a função peso não é mais a função peso do método de Galerkin. De fato, a função peso adquire a estrutura da função peso SUPG. Observa-se que essa estrutura do tipo SUPG surge naturalmente. Tendo em vista que a discretização temporal com $\theta = 1/2$ possui menor erro de truncamento, essa foi a escolha feita para θ adotada aqui, resultando em:

$$w_i = N_i + \frac{\Delta t}{2} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \quad (67)$$

Inicia-se então um outro desafio sobre como selecionar um passo de tempo adequado, ou *time-step*. Comparando a equação (67) com a função peso SUPG (BROOKS & HUGHES, 1982) verifica-se que, para elementos lineares, uma quantidade apropriada de *upwind* é introduzida no balanço de quantidade de movimento, equação (49), se o passo de tempo for escolhido como na equação (68) a seguir:

$$\Delta t = \alpha \frac{h_e}{\|\mathbf{u}^n\|} \quad (68)$$

onde

$$\alpha = \left[\coth\left(\frac{R_{e_h}}{2}\right) - \frac{2}{R_{e_h}} \right] \quad (69)$$

Nas equações mostradas, $\|\mathbf{u}^n\| = \sqrt{u_a^n u_a^n}$ é o módulo da velocidade local e h_e é o tamanho característico do elemento (raiz cúbica do volume do elemento). O número de Reynolds do elemento é $R_{e_h} = \rho \|\mathbf{u}^n\| h_e / \mu$.

O α mostrado na equação (69) é chamado de parâmetro ótimo de *upwind* cuja escolha resulta em soluções nodalmente exatas para problemas estacionários unidimensionais envolvendo convecção e difusão.

É interessante notar que o passo de tempo definido em (68) e (69) é apropriado para seguir a evolução no tempo do processo de convecção-difusão resolvível na malha com tamanho local h_e (DE SAMPAIO, 1991) como discutido a seguir.

O passo de evolução temporal deve acompanhar com riqueza de detalhes todos os fenômenos físicos cuja variação temporal se deseja observar. No entanto, a evolução temporal de fenômenos físicos ocorre de forma distinta. Por esse motivo, o passo de tempo deve ser pequeno o suficiente para acompanhar a evolução do fenômeno mais rápido. O passo de tempo para acompanhar um processo convectivo forte ($R_e \gg 1$) é dado por $\Delta t \rightarrow h_e / \|\mathbf{u}^n\|$ enquanto que para acompanhar difusão pura ($R_e \rightarrow 0$), tem-se $\Delta t \rightarrow \rho h_e^2 / 6\mu$. Deste modo, uma forma alternativa para escolher Δt é escolher o menor passo de tempo entre a escala de tempo de convecção e de difusão. ao invés de utilizar as equações (68) e (69), o valor mínimo entre as escalas de tempo características de convecção e de difusão, a saber: $\Delta t = \min(t_c, t_d)$ com $t_c = \frac{h_e}{\|\mathbf{u}^n\|}$ que é a escala de tempo de convecção e $t_d = \frac{h_e^2}{6\mu}$ é a

escala de difusão. Isso equivale a aproximar o valor de α na equação (69) por α' dado pela função:

$$\alpha'(R_{e_h}) = \begin{cases} \frac{R_{e_h}}{6} & \text{se } R_{e_h} < 6 \\ 1 & \text{se } R_{e_h} > 6 \end{cases} \quad (70)$$

$$\alpha'(P_{e_h}) = \begin{cases} \frac{P_{e_h}}{6} & \text{se } P_{e_h} < 6 \\ 1 & \text{se } P_{e_h} > 6 \end{cases} \quad (71)$$

De acordo com essa proposta, calcula-se o Δt como sendo $\Delta t = \alpha' \frac{h_e}{\|\mathbf{u}^n\|}$. A aproximação dada por (70) e (71) é exatamente a aproximação assintótica para α , apresentada por Hughes e Brooks (BROOKS & HUGHES, 1982) com o objetivo de simplificar o cálculo da função peso do SUPG. A Figura 2 mostra uma comparação entre a aproximação assintótica de α e seu valor exato. De fato, é importante notar que a mesma aproximação assintótica para α foi obtida aqui a partir de uma argumentação baseada na intensidade dos processos físicos envolvidos, isto é, escolhendo o passo de tempo de acordo com a escala de tempo do processo físico dominante (o mais rápido).

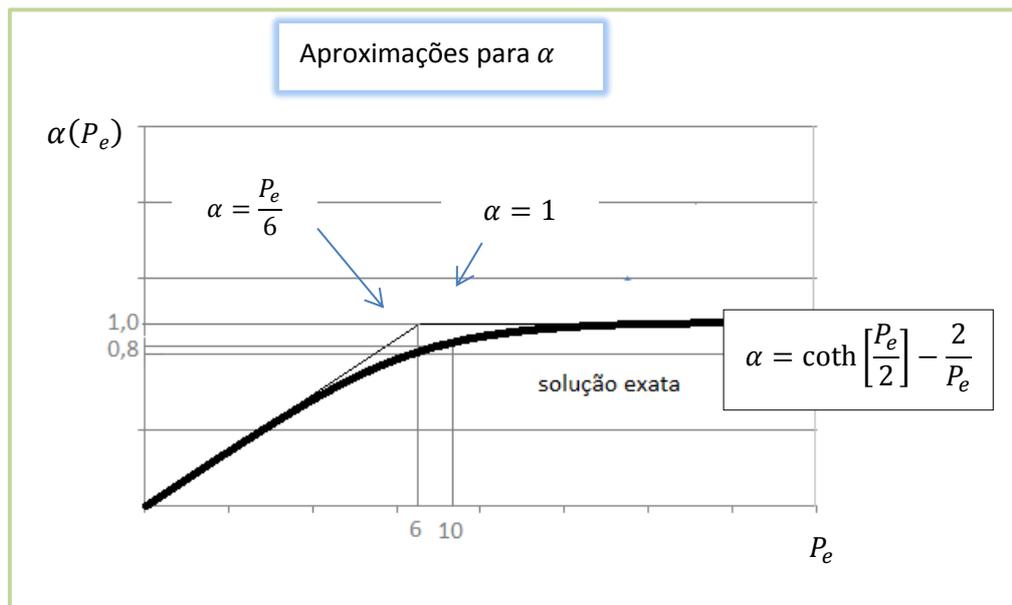


Figura 2: Aproximação para α , por Hughes e Brooks e obtida naturalmente por De Sampaio, sobreposta pela curva exata.

Visto que há uma relação entre os números adimensionais R_{e_h} e P_{e_h} , dada por $P_{e_h} = P_r R_{e_h}$, é fácil perceber que, a menos que o número de Prandtl seja $P_r = 1$, os passos de tempo para as equações de quantidade de movimento e energia serão diferentes. Essa diferença é mais evidente na camada limite, onde os efeitos de difusão são dominantes. Além disso, o passo de tempo dado por (68) varia espacialmente de acordo com a velocidade local, propriedades físicas e tamanho da malha local. Portanto, para aplicar *upwind* ótimo tanto para a quantidade de movimento, quanto para a energia e para os radionuclídeos é preciso usar três variações espaciais distintas. Para a quantidade de movimento é usado $\Delta t_M = \alpha'(R_{e_h}) \frac{h_e}{\|\mathbf{u}^n\|}$, enquanto que para $\Delta t_E = \alpha'(P_{e_h}) \frac{h_e}{\|\mathbf{u}^n\|}$. Que é equivalente a selecionar $\Delta t_M = \min(t_c, t_{d_M})$ e $\Delta t_E = \min(t_c, t_{d_E})$ com $t_{d_M} = \rho h_e^2 / 6\mu$ e $t_{d_E} = \rho c h_e^2 / 6k$ sendo as escalas de tempo de difusão de quantidade de movimento e energia, respectivamente. E para as concentrações de radionuclídeo, deve se considerar as escalas de tempo de convecção, difusão e de decaimento, pois esta última pode ser menor que a escala de tempo de outros processos. A escala de tempo selecionada para o decaimento radioativo é $t_{decay} = 0,2/\lambda$, o que corresponde a aproximadamente 1/3 da meia-vida do radionuclídeo instável, ϕ . Portanto, para atualizar ϕ foi escolhido o $\Delta t_\phi = \min(t_c, t_{d_\phi}, t_{decay})$, enquanto que para atualizar φ foi selecionado $\Delta t_\varphi = \min(t_c, t_{d_\varphi}, t_{decay})$, com $t_{d_\phi} = h_e^2 / 6\psi$ e $t_{d_\varphi} = h_e^2 / 6\zeta$ como sendo as escalas de difusão para ϕ e φ , respectivamente.

Utilizar os passos de tempo ótimos, variando com a posição e de acordo com a quantidade transportada (quantidade de movimento, energia ou concentração de radionuclídeos), deve-se recorrer a um esquema peculiar de sincronização do avanço no tempo durante o cálculo. Nesta dissertação será utilizado o procedimento presente em (DE SAMPIO, 2006) e (DE SAMPAIO, 2005). Trata-se da seleção de um passo de tempo de sincronização Δt^* , que deverá ser o mesmo para todas as variáveis e pontos do domínio. O passo de tempo de sincronização é escolhido para ser muito próximo do passo de tempo mínimo do problema, sendo obtido como $\Delta t^* = 0,9999 \min(\Delta t_M, \Delta t_E, \Delta t_\phi, \Delta t_\varphi)$.

Sendo $\Delta\hat{u}_a$, $\Delta\hat{p}$, $\Delta\hat{T}$, $\Delta\hat{\phi}$ e $\Delta\hat{\psi}$ as mudanças das variáveis obtidas quando são usados os passos de tempo locais apropriados para resolver as equações (48) a (52) e representando as mudanças das variáveis do tempo t^n ao tempo $t^n + \Delta t^*$ (o tempo de sincronização) como $\Delta\hat{u}_a^*$, $\Delta\hat{p}^*$, $\Delta\hat{T}^*$, $\Delta\hat{\phi}^*$ e $\Delta\hat{\psi}^*$. Se mantida a mesma taxa de variação, obtém-se as seguintes relações:

$$\frac{\Delta\hat{u}_a^*}{\Delta t^*} = \frac{\Delta\hat{u}_a}{\Delta t} \quad (72)$$

$$\frac{\Delta\hat{p}^*}{\Delta t^*} = \frac{\Delta\hat{p}}{\Delta t} \quad (73)$$

$$\frac{\Delta\hat{T}^*}{\Delta t^*} = \frac{\Delta\hat{T}}{\Delta t} \quad (74)$$

$$\frac{\Delta\hat{\phi}^*}{\Delta t^*} = \frac{\Delta\hat{\phi}}{\Delta t} \quad (75)$$

$$\frac{\Delta\hat{\psi}^*}{\Delta t^*} = \frac{\Delta\hat{\psi}}{\Delta t} \quad (76)$$

As equações (72) a (76) representam a etapa de sincronização e podem ser diretamente inseridas nas equações (48) a (52) de forma que a solução sincronizada seja obtida de uma só vez, sem a necessidade de executar a interpolação separadamente. Isso corresponde a obter a solução sincronizada em $t^n + \Delta t^*$ diretamente resolvendo as seguintes equações:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\Delta t_M^2}{\rho \Delta t^*} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \frac{\partial \Delta\hat{p}^*}{\partial x_a} d\Omega = \\ & - \int_{\Omega} \frac{\Delta t_M}{\rho} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left[\rho \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} - \frac{\partial \hat{t}_{ab}^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{p}^n}{\partial x_a} + \rho \beta g_a (\hat{T}^n - T_0) \right] d\Omega \quad (77) \\ & - \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_a} d\Omega + \int_{\Gamma_G} N_i (\bar{G}^{n+1} - \bar{G}^n) d\Gamma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_M \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\rho}{\Delta t^*} \left(\Delta \hat{u}_a^* + \theta \Delta t_M \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{u}_a^*}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\
& - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_M \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left(\rho \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\Delta t_M}{\Delta t^*} \frac{\partial \Delta \hat{p}^*}{\partial x_a} \right. \\
& \quad \left. + \rho \beta g_a (\hat{T}^n - T_0) \right) d\Omega \\
& \quad + \int_{\Omega} \theta \Delta t_M \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \left(\frac{\partial \hat{\tau}_{ab}^n}{\partial x_b} - \frac{\partial \hat{p}^n}{\partial x_a} \right) d\Omega
\end{aligned} \tag{78}$$

$$- \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{\tau}_{ab}^n d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{p}^n d\Omega + \int_{\Gamma_{ta}} N_i \bar{t}_a^n d\Gamma$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\rho c}{\Delta t^*} \left(\Delta \hat{T}^* + \theta \Delta t_E \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{T}^*}{\partial x_b} \right) d\Omega \\
& = - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_E \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \rho c \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{T}^n}{\partial x_b} d\Omega \\
& - \int_{\Omega} \theta \Delta t_E \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{q}_b^n}{\partial x_b} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{q}_b^n d\Omega \\
& \quad + \int_{\Gamma_q} N_i \bar{q}^n d\Gamma
\end{aligned} \tag{79}$$

$$\int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{1}{\Delta t^*} \left(\Delta \hat{\phi}^* + \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{\phi}^*}{\partial x_b} \right) d\Omega = \tag{80}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{\phi}^n}{\partial x_b} + \lambda \hat{\phi}^n \right) d\Omega \\
& \quad - \int_{\Omega} \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{\xi}_b^n}{\partial x_b} d\Omega \\
& \quad + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{\xi}_b^n d\Omega - \int_{\Gamma_{\xi}} N_i \bar{\xi}^n d\Gamma
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{1}{\Delta t^*} \left(\Delta \hat{\phi}^* + \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_b^n \frac{\partial \Delta \hat{\phi}^*}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\
& \quad - \int_{\Omega} \left(N_i + \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{\phi}^n}{\partial x_b} - \lambda \hat{\phi}^n \right) d\Omega \\
& \quad - \int_{\Omega} \theta \Delta t_{\phi} \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{\eta}_b^n}{\partial x_b} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{\eta}_b^n d\Omega - \int_{\Gamma_{\eta}} N_i \bar{\eta}^n d\Gamma,
\end{aligned} \tag{81}$$

onde $\Delta \hat{u}_a^* = N_j \Delta \hat{u}_{aj}^*$, $\Delta \hat{p}^* = N_j \Delta \hat{p}_j^*$, $\Delta \hat{T}^* = N_j \Delta \hat{T}_j^*$, $\Delta \hat{\phi}^* = N_j \Delta \hat{\phi}_j^*$ e $\Delta \hat{\phi}^* = N_j \Delta \hat{\phi}_j^*$, sendo que $\Delta \hat{u}_{aj}^*$, $\Delta \hat{p}_j^*$, $\Delta \hat{T}_j^*$, $\Delta \hat{\phi}_j^*$ são os valores nodais das mudanças das variáveis do problema no tempo t^n ao tempo $t^* = t^n + \Delta t^*$. A solução sincronizada é dada por: $\hat{u}_a^* = \hat{u}_a^n + \Delta \hat{u}_a^*$, $\hat{p}^* = \hat{p}^n + \Delta \hat{p}^*$, $\hat{T}^* = \hat{T}^n + \Delta \hat{T}^*$, $\hat{\phi}^* = \hat{\phi}^n + \Delta \hat{\phi}^*$ e $\hat{\phi}^* = \hat{\phi}^n + \Delta \hat{\phi}^*$.

O procedimento de solução do problema é segregado, de forma que, a cada passo de tempo o campo de pressão é calculado primeiro, depois é calculado o campo de velocidade, seguido pelo cálculo da nova temperatura e concentrações de radionuclídeos. Esses sistemas de equações resultam em matrizes simétricas positivas definidas. Eles são resolvidos usando o método de gradientes conjugados com pré-condicionador de Jacobi, elemento por elemento (Element-by-Element - EBE).

Essa foi a quarta etapa de (HIRSCH, 1990), onde é obtida a solução numérica do problema. O estágio final, o pós-processamento numérico dos dados é o próximo passo para entender e interpretar as propriedades físicas obtidas como resultado da simulação, produto do próximo capítulo desta dissertação.

4 CÓDIGO COMPUTACIONAL

Para a geração de geometrias e malhas foi utilizado o software GiD – The personal pre and post processor. *Gid* é um software comercial usado para pré e pós processamento gráfico de simulações numéricas em ciência e engenharia. Sua interface gráfica permite criar geometrias, aplicar condições de contorno e iniciais, gerar malhas e outros parâmetros relacionados a uma simulação numérica no pré-processamento. É possível personalizar os tipos de problemas, como por exemplo, problemas de eletromagnetismo, de transferência de calor e de fluidodinâmica. Esta personalização é feita por uma programação intrínseca ao GiD, criando arquivos com extensões ‘<file>.cnd’ (configuração das condições), ‘<file>.mat’ (configuração dos materiais), ‘<file>.prb’ (configuração do problema) e ‘<file>.bas’ (configuração de saída). Já no pós-processamento, é possível visualizar perfis de pressão, velocidade, temperatura e concentrações, além de visualizar campos vetoriais e produzir animações.

Para a realização deste estudo foi programada uma interface entre o GiD e o código em Fortran, de forma que os arquivos de saída ou *output* do GiD são os de entrada ou *input* para o código, e de forma análoga, os arquivos de *output* do Fortran sejam os de *input* do GiD para pós-processamento.

O código “ns_solver_MPI_3d_cd” (P. A. B. de Sampaio e E. B. S da Silva, 2012), utilizado na etapa de processamento deste trabalho, foi produzido a partir da modificação e fusão de dois códigos computacionais pré-existentes. A saber: “ns_solver_MPI_2d_cd_a” que resolve as equações bidimensionais de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis e com dispersão de radionuclídeos, utilizando o message passing interface (MPI) e técnicas de remalhagem adaptativa; e o “ns_solver_MPI_3d” que resolve as equações tridimensionais de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis, utilizando o MPI. Ambos os códigos serviram de base para a construção do código apresentado neste trabalho, e foram devidamente validados em diversos problemas clássicos da mecânica de fluidos, transferência de calor e transporte e decaimento radioativo (este último no caso 2D apenas). Em (DE SAMPAIO, 2006) E (DE SAMPAIO, 2005) foi feita a validação a partir da aplicação

em uma cavidade bidimensional quadrada e com a sua aplicação no escoamento cruzando um cilindro, em que foi analisado o desprendimento de vórtices. Nos exemplos em que foram aplicados foram obtidos bons resultados na comparação com dados experimentais e com outras simulações computacionais disponíveis na literatura.

Os elementos finitos usados no código são tetraédricos e as funções de interpolação são lineares e baseadas em (ZIENKIEWICZ; MORGAN, 1983), usadas para aproximar todas as variáveis: pressão, componentes de velocidade, temperatura e concentrações de radionuclídeos. Desse modo, o código computacional gerado manteve as principais características dos códigos originais mencionados. Sistema de computação paralela da classe *Beowulf* através de técnicas de domínio e comunicação entre processadores utilizando as rotinas da biblioteca *Message Passing Interface* (MPI). Técnicas essas apresentadas na próxima seção.

Algumas rotinas desses dois códigos apresentados foram utilizadas para a composição do novo código, no entanto, foram necessárias adaptações em muitas delas e a programação de novas rotinas. Dentre as modificações necessárias estão:

- A inserção de mais um grau de liberdade espacial em todas as rotinas em que era necessário (aquelas aproveitadas do código 2D). Deve se ter em mente que nem sempre se deve usar uma rotina do código 3D só por estar “mais completa” em termos de número de graus de liberdade, visto que em alguns casos o código 2D está melhor programado, otimizando o cálculo;
- A programação de rotinas para a terceira componente de velocidade, $a = 3$ que corresponde à velocidade w , na direção z . Sendo conhecido que u_a com $a = 1 \rightarrow u, a = 2 \rightarrow v$ e $a = 3 \rightarrow w$. As rotinas são: `wvelmat3d.f90` para o lado direito da equação (77) e `wvelrhs3d.f90` para o lado direito. Também foram feitas as modificações adequadas nas rotinas dos outros graus de liberdade como a pressão p , as velocidades u e v e temperatura T ,

correspondentes aos lados direito e esquerdo das equações (77), (78) e (79) (para a variando de 1 a 3). As rotinas resultantes foram chamadas: `presmat3d.f90`, `uvelmat3d.f90`, `vverlmat3d.f90`, `tempmat3d.f90` para o lado esquerdo das equações e `presrhs3d.f90`, `uvelrhs3d.f90`, `vvelrhs3d.f90`, `wvelrhs3d.f90` e `temprhs3d.f90` para o lado direito das equações citadas;

- A programação das rotinas de concentrações e decaimento radioativo para os lados direito e esquerdo das equações (80) e (81), a saber: `con1mat3d.f90`, `con2mat3d.f90` para o lado esquerdo das equações e `con1rhs3d.f90` e `con2rhs3d.f90` para o lado direito;
- Para acomodar essas novas mudanças as rotinas `matrix.f90` e `fecrhs.f90` foram adaptadas para chamar também os novos graus de liberdade, transformando-se em `matrix3d.f90` e `fecrhs3d.f90`;
- A rotina de gradiente conjugado também foi adaptada;
- Também foi programada a rotina `heatflux.f90`, que calcula a área dos elementos que tem face externa na geometria e calcula o fluxo de calor em cada um desses elementos;
- A programação de uma rotina de monitoramento de fluxo médio, correspondente ao número de Nusselt, chamada `window_flux.f90`, para validação do código. Uma característica interessante de notar nessa rotina é que pode-se escolher o número de janelas em que se quer calcular o fluxo de calor e também suas dimensões, apenas dando como entrada suas coordenadas extremas. Além disso, essa rotina faz o cálculo da área em que se está obtendo o fluxo de calor, somando sobre todos os elementos da malha, evitando que haja erros;
- Foi modificada a rotina de cálculo e interpolação do passo de tempo do programa 2D, `timesteppar.f90` passou a ser `timesteppar3d.f90`.

Nessa nova rotina, a seleção do menor passo de tempo, que acompanha o fenômeno mais rápido e de acordo com o tamanho dos elementos na malha, é feita em conjunto com a interpolação para a obtenção do passo de tempo ótimo ou *time-step* ótimo;

- Foi modificada a rotina `shape3.f90` para a confecção da `shape4.f90`, que calcula parâmetros de coordenadas associados às funções N_i e o volume dos elementos da malha;
- Para que houvesse adaptação dos novos graus de liberdade e novos dados de entrada, bem como os de saída, foram feitas adaptações em rotinas de abertura de arquivos e de leitura como `openfiles.f90` e `dinput.f90`.

Conforme dito antes, o programa construído para esta dissertação trata as equações de Navier-Stokes com transporte de momento, energia e material radioativo com conseqüente decaimento. Nele pode ser incluída uma cadeia extensa e complexa de radionuclídeos, naturalmente pagando-se “o preço” por isso com o aumento do custo computacional. O código é versátil, podendo ser usado em situações mais gerais, com dados adimensionais seguindo a ideia das equações presentes em (16) à (20) com a devida interpolação no tempo ou pode ser usado em uma aplicação comercial, com dados dimensionais, como está exposto nas equações (77) à (81).

4.1 SISTEMA DE COMPUTAÇÃO PARALELA

A implementação do sistema Beowulf é baseada no conceito de decomposição de domínio. A biblioteca METIS (Karipys; Kumar, 1998) é usada para dividir os elementos finitos (e nós) entre os processadores disponíveis, equilibrando a carga computacional e minimizando as comunicações. A biblioteca *Message Passing Interface* (MPI) é

utilizada para transferir os dados entre os processadores, visando a administração e minimização do tempo de processamento, do problema.

A rotina "PartMeshDual METIS" divide os elementos finitos e nós entre os processadores. A saída do "PartMeshDual METIS" é processada para criar listas de elementos pertencentes a cada partição, listas de nós estritamente dentro de cada partição (nós interiores), e uma lista de interface (nós compartilhados) que são compartilhados por elementos que residem em diferentes partições. A organização desta estrutura de dados é executada de maneira sequencial, mas uma vez preparada, é possível explorar o paralelismo no cálculo dos loops sobre elementos e nós, como segue:

- i) Cada *loop* sobre os elementos pode ser reformulado em *loops* paralelos sobre partições de domínio e *loops* sobre os elementos pertencentes a cada partição correspondente.
- ii) A cada *loop* sobre nós é dividido em *loop* sobre os nós interiores e *loop* sobre os nós compartilhados. Os *loops* sobre os nós interiores podem ser processados em paralelo ao longo das partições de domínio. Por outro lado, os *loops* sobre nós compartilhados têm de ser processados de maneira sequencial. Além disso, rotinas MPI "*reduce type*" são usados para combinar, em nós compartilhados, as contribuições decorrentes de partições de domínio diferentes. Note-se que a relação "número de nós compartilhados/número de nós interiores" tende a diminuir à medida que uma dada discretização é refinada, o que significa que se pode esperar um melhor desempenho paralelo à medida em que o número de graus de liberdade é aumentado.

Desse modo, a implementação do cálculo em paralelo no código computacional, vinda dos códigos 2D e 3D utilizados para gerar o `ns_solver_MPI_3d_cd`, tem a propriedade desejada de melhorar o desempenho em paralelo dos cálculos feitos. A Figura 3 ilustra a decomposição de domínios para dois casos: À esquerda, uma geometria bidimensional e à direita uma tridimensional.

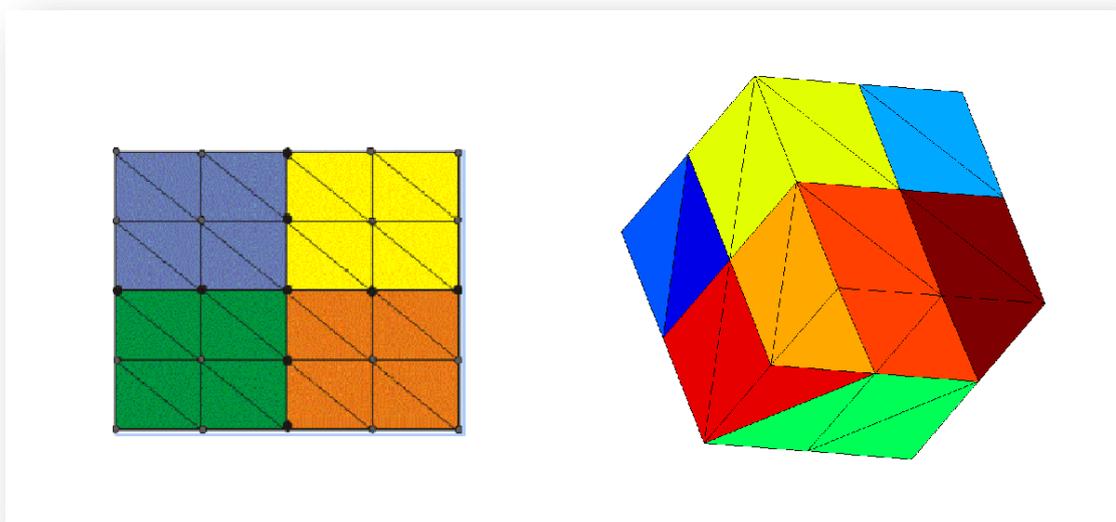


Figura 3: Esquema de decomposição do domínio feita pelo METIS. À esquerda, uma geometria bidimensional quadrada com elementos triangulares e à direita, uma geometria tridimensional cúbica com elementos tetraédricos.

Essa figura evidencia a eficiência na obtenção de velocidade no processamento em paralelo. Como é mais fácil visualizar a decomposição do domínio em geometrias bidimensionais, imagine um problema em que a geometria é bidimensional e com elementos triangulares como a imagem à esquerda na Figura 3. Nesse caso, dispo de quatro processadores – com cada cor representando um processador - ao invés de um (processamento sequencial convencional), é possível notar que o aumento do número de elementos na malha melhora a eficiência do processamento em paralelo. Os pontos pequenos representam os nós interiores a uma partição e os pontos maiores ilustram os nós compartilhados. Como explicado acima, a eficiência na paralelização do código está presente na relação número de nós compartilhados/número de nós interiores, que tende a diminuir quando a discretização é aumentada.

Para se aproximar mais da realidade apresentada neste trabalho, observe agora a geometria do lado direito na Figura 3, tridimensional e com elementos tetraédricos. A utilização do método descrito é ainda mais eficiente em geometrias tridimensionais do que nas bidimensionais, visto que nestas o número de nós compartilhados cresce com o quadrado enquanto que naquelas o número de nós

interiores cresce ao cubo. Como pode ser observado na Figura 3, a geometria à direita possui elementos divididos entre doze processadores.

Com isso são finalizadas as cinco etapas de CFD apresentadas por (HIRSCH, 1990). A próxima etapa é a de validação do código computacional.

5 VALIDAÇÃO

O código `ns_MPI_3d_cd`, gerado por este trabalho, contempla a fluidodinâmica com transferência de calor e decaimento radioativo com produção de outra espécie. Por isso, foi utilizado na simulação computacional de alguns casos conhecidos presentes na literatura, contemplando ambas as situações em separado na busca de sua validação.

Quando aplicado a casos em que há fluidodinâmica sem decaimento radioativo, o código computacional continua calculando todos os graus de liberdade, mas deve dar como resultado a ausência do decaimento em outra espécie. Se isso for conseguido, mostra-se coerente com a realidade e com a programação nele contida. Além disso, quando há convecção natural, o número de Nusselt representa o quanto foi aumentado o fluxo de calor devido a esse fenômeno. Portanto, deve dar resultados de Nusselt médio correspondentes aos presentes na literatura. A seguir será feita a apresentação dos *benchmarks* e em seguida, a aplicação do código a um caso em que há apenas transporte de momento e energia, sem decaimento radioativo. Os resultados obtidos serão comparados com os *benchmarks* selecionados na literatura na seção 5.1.

Em casos em que há decaimento radioativo de um fluido que se encontra em repouso, ou seja, sem o efeito de transporte de momento, o código computacional continua trabalhando com todos os graus de liberdade. Todavia, deve se observar soluções em que as velocidades continuem nulas. Já a concentração do primeiro radionuclídeo presente na amostra, ϕ , é esperado que decresça segundo a lei de decaimento exponencial. Ao mesmo tempo o decaimento do primeiro radionuclídeo produz o segundo, de forma que enquanto uma concentração diminui, outra surge e aumenta. Essa aplicação é apresentada na seção 5.2.

5.1 CAVIDADE CUBICA 3D – VALIDANDO A FLUIDODINÂMICA

Para validar a fluidodinâmica do código computacional `ns_solver_MPI_3d_cd` foi considerado um exemplo bastante conhecido e presente na literatura, uma cavidade cúbica de aresta L . Dois benchmarks foram selecionados na literatura, a saber (WAKASHIMA; SAITOH, 2004) e (TRIC, et al., 2000) para efeito de comparação.

A cavidade cúbica apresentada é um problema composto por uma caixa tridimensional em que duas de suas paredes verticais são diferentemente aquecidas e isotérmicas. Suas outras quatro paredes são adiabáticas. A diferença de temperatura entre as paredes isotérmicas do problema é unitária e todos os dados são apresentados de forma adimensional.

O esquema de geometria e condições de contorno são mostrados na Figura 4.

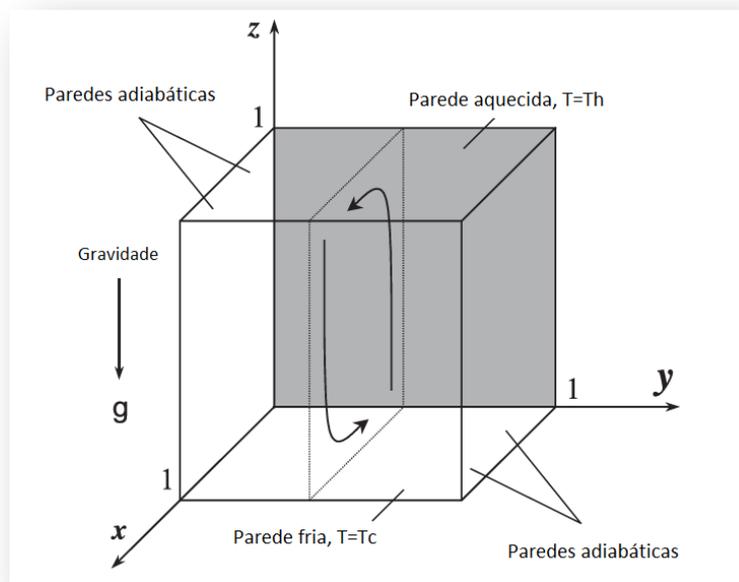


Figura 4: Modelo esquemático da convecção natural em uma cavidade cúbica (WAKASHIMA & SAITOH, 2004).

As condições de contorno para a temperatura garantem uma diferença de temperatura unitária adimensional entre as paredes $\Delta T = 1$, além de $\partial T / \partial n = 0$ nas outras paredes (n é o vetor normal à superfície da parede).

Problemas envolvendo a refrigeração de ambientes internos são bastante estudados pela engenharia, portanto, os *benchmarks* costumam usar parâmetros relacionados ao ar como o número adimensional de Prandtl, cujo valor é muito próximo de 0,71.

Visto que deve se estabelecer um mecanismo de circulação natural devido às características do problema, há de se observar alguns números adimensionais como o número de Rayleigh, representação direta da circulação natural no escoamento. Esse número se relaciona com Grashof e Prandtl da seguinte forma: $R_a = G_r P_r$. O número de Prandtl, presente nessa relação, representa a difusividade de momento por difusividade térmica de um fluido. Além disso, está diretamente associado às propriedades físicas do meio. O número de Grashof, G_r , indica a relação entre as forças de empuxo, inércia e forças viscosas. Ele é proporcional à diferença de temperatura, coeficiente de expansão volumétrica, ao cubo de um comprimento característico do problema e é representado por $G_r = g\beta(T_s - T_\infty)L^3/\nu^2$.

O número de Nusselt estabelece a relação entre a transferência de calor por convecção e a transferência de calor por difusão. Nesse trabalho, o número adimensional de Nusselt, $N_u = hL/k$ (Onde h é o coeficiente de transferência térmica e L é um comprimento característico do problema), está diretamente relacionado ao fluxo médio de calor na cavidade. De fato, ele representa o quanto se ganha em fluxo de calor devido à convecção natural. Portanto será usado como parâmetro a ser comparado com os resultados gerados pelo código `ns_solver_MPI_3d_cd`.

Os números adimensionais de Rayleigh usados no *benchmark 1*, (WAKASHIMA; SAITOH, 2004), bem como os resultados para Nusselt correspondentes encontram-se na Tabela 1.

Na Tabela 1:

h_e – tamanho fixo do elemento da malha

$Nu_{average}$ - número de Nusselt médio na superfície isotérmica

Tabela 1: *Benchmark 1* - cavidade cubica (WAKASHIMA & SAITOH, 2004).

R_a	h_e	$Nu_{average}$
10^4	0,00833	2,0634
10^5	0,00833	4,3713
10^6	0,00833	8,7732

Essa referência foi testada para algumas variações de comprimentos de malha, h_e , todas uniformes. Serão utilizados os resultados obtidos com a malha mais refinada para efeito de comparação.

O trabalho de (TRIC, et al., 2000), aqui referenciado como *benchmark 2*, usou alguns valores para o número de Rayleigh, variando-o de 10^3 a 10^7 . Entretanto, só nos interessam os valores na faixa de 10^4 , 10^5 e 10^6 para efeito de comparação. Portanto, os resultados de Nusselt obtidos no *benchmark*, relacionados aos respectivos Rayleigh na faixa de interesse, são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: *Benchmark 2* - da cavidade cubica (TRIC, LABROSSE, & BETROUNI, 2000).

R_a	$h_{e_{min}}$	$Nu_{average}$
10^4	81^3	2,0542
10^5	81^3	4,3370
10^6	81^3	8,6407

Assim como no *Benchmark 1* essa referência foi testada para algumas variações de comprimentos de malha, h_e , todas uniformes. Pelo mesmo motivo serão escolhidos os resultados obtidos com a malha mais refinada.

5.1.1 Resultados para as validações de fluidodinâmica

O trabalho aqui desenvolvido pretende mostrar a sua validade frente aos fenômenos físicos representados em trabalhos presentes na literatura. Sendo mostrada sua validade, pretende-se mostrar também o poder do código e a eficácia do método utilizado e, portanto em sua realização houve a preocupação de se produzir refinamentos estratégicos na malha, de forma a valorizar regiões em que há forte transferência de calor (maiores gradientes dos fenômenos físicos) e manter uma malha de base uniforme mais grosseira, sem de fato prejudicar os resultados.

Apresentamos uma cavidade cúbica de aresta L com mesmas características dos benchmarks, como duas paredes verticais isotermicamente aquecidas e $\Delta T = 1$ entre elas. Foram utilizados cinco valores distintos de R_a , cujos parâmetros associados são mostrados na Tabela 3. O número de Rayleigh utilizado se relaciona com Grashof e Prandtl da seguinte forma: $R_a = G_r \cdot P_r$. De fato, G_r cresce à medida que R_a também cresce já que P_r foi escolhido como constante igual a 0,71. Além disso, o número de Richardson, dado pela relação $R_i = \frac{G_r}{R_a^2}$ foi escolhido como sendo unitário, e dessa forma foram calculadas as outras propriedades, como $\rho=1,0$; $c=1,0$; $\beta=1,0$ e $\lambda=0,999999$ e μ e k , apresentados na tabela 3.

Tabela 3: Dados para a geração dos resultados de validação da fluidodinâmica.

R_a	1×10^4	5×10^4	1×10^5	5×10^5	1×10^6
μ	$8,42615 \times 10^3$	$3,76829 \times 10^{-3}$	$2,66458 \times 10^{-3}$	$1,19164 \times 10^{-3}$	$8,4262 \times 10^{-4}$
k	$1,186782 \times 10^2$	$5,30745 \times 10^{-3}$	$3,75293 \times 10^{-3}$	$1,67836 \times 10^{-3}$	$1,18678 \times 10^{-3}$

Embora os *benchmarks* tenham usado malhas com elementos de tamanho h_e uniforme em toda a geometria, as malhas apresentadas neste trabalho fogem um pouco a esse estilo. Algumas malhas foram testadas nas simulações, de forma a viabilizar o baixo custo computacional e valores bastante próximos dos

apresentados nos trabalhos tomados como referência. Dentre as malhas usadas, serão apresentadas duas, M1 e M2, bem como as configurações correspondentes e resultados obtidos via o código `ns_solver_MPI_3d_cd`, são apresentados na Tabela 4. Nela, M1 é a malha mais grosseira, com 0,07 no interior e 0,02 nas seis paredes da cavidade. M2 é uma malha com um refinamento melhorado, 0,05 no interior e 0,015 nas outras paredes da cavidade, e produzindo melhores resultados quando comparados aos da malha M1.

Tabela 4: Características das malhas utilizadas.

	h_{min}	$h_{interior}$
M1	0,02	0,07
M2	0,015	0,05

Os números de Nusselt dependentes do Rayleigh, resultado das simulações com ambas as malhas mostradas acima estão dispostos na Tabela 5.

Tabela 5: Números de Nusselt para os R_a variando de 10^4 a 10^6 , obtidos pelo código `ns_solver_MPI_3d_cd` para M1 e M2.

R_a	M1	M2
1×10^4	2,0331	2,0400
5×10^4	3,4422	3,4518
1×10^5	4,2793	4,2914
5×10^5	6,9129	6,9535
1×10^6	8,3633	8,4515

Observando-se a tabela acima, nota-se que o refinamento da malha traz variações na segunda casa decimal na maioria dos casos. Portanto, para o nosso objetivo, validar o código escrito para a dissertação, será considerada a malha M2, nossa melhor malha apresentada, como satisfatória.

A Figura 5 mostra quatro imagens de perfis de temperatura obtido nas simulações para variados valores de Rayleigh. O objetivo ao mostra-la é de fazer

uma ilustração qualitativa do problema, por isso, não há legenda de intensidade de temperatura, embora o vermelho represente a temperatura maior e o azul escuro, a temperatura menor.

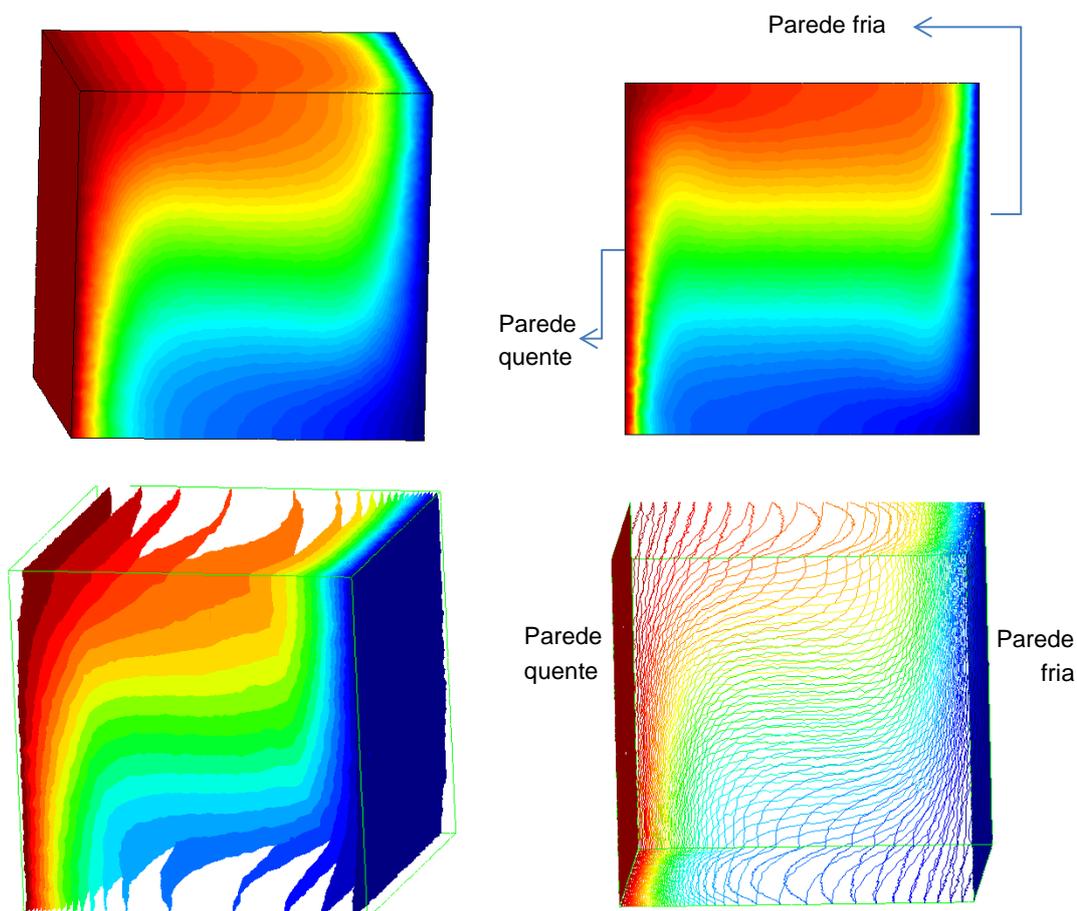


Figura 5: Ilustração qualitativa da temperatura, com perfis, isossuperfícies e isolinhas de temperatura. A parede vertical à esquerda está isotermicamente aquecida à temperatura $T = 1/2$ (parede quente) e a parede à direita a $T = -1/2$ (parede fria).

Nas imagens da figura, é possível notar que, há duas paredes verticais isotermicamente aquecidas. Uma das paredes, à esquerda, cuja temperatura é de $T = 1/2$, chamada parede quente e a outra à direita, cuja temperatura é de $T = -1/2$, chamada parede fria. As outras quatro faces do cubo são adiabáticas. Essa referência espacial será tomada até o final dessa fase de validação da fluidodinâmica, em que a parede à esquerda é a parede quente, por estar a uma temperatura mais alta e a parede à direita, a parede fria, por estar a uma temperatura mais baixa com relação à outra.

Na termodinâmica há três formas distintas pelas quais o calor flui: condução, convecção e irradiação. No caso apresentado acima, no momento imediatamente inicial há apenas condução, pois a velocidade é nula, no entanto, após receber energia, o fluido próximo à parede quente sofre dilatação, variando sua densidade e tende a subir, gerando a convecção de forma natural. Por isso, embora todas as velocidades no instante inicial fossem nulas, o fluido ganha um movimento dado pela diferença de temperatura, densidade e gravidade. Isso produz um perfil em que o fluido aquecido sobe e o fluido à temperatura mais baixa tende a descer, formando um movimento que tende a contornar o interior da geometria confinado na caixa cúbica. Finalmente, tende a ocorrer uma estratificação térmica.

As isossuperfícies de temperatura obtidas para $R_a = 10^4$ e $P_r = 0,71$ são mostrados na Figura 6.

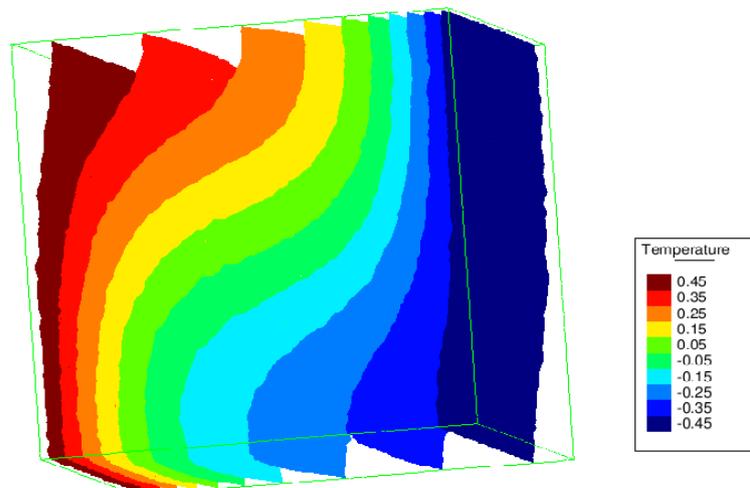


Figura 6: Isossuperfícies de temperatura para $R_a = 10^4$ e $P_r = 0,71$.

Na figura Figura 7, é possível observar as isossuperfícies de temperatura para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$. Na seguinte, Figura 8, as isossuperfícies de temperatura para $R_a = 10^6$ e $P_r = 0,71$.

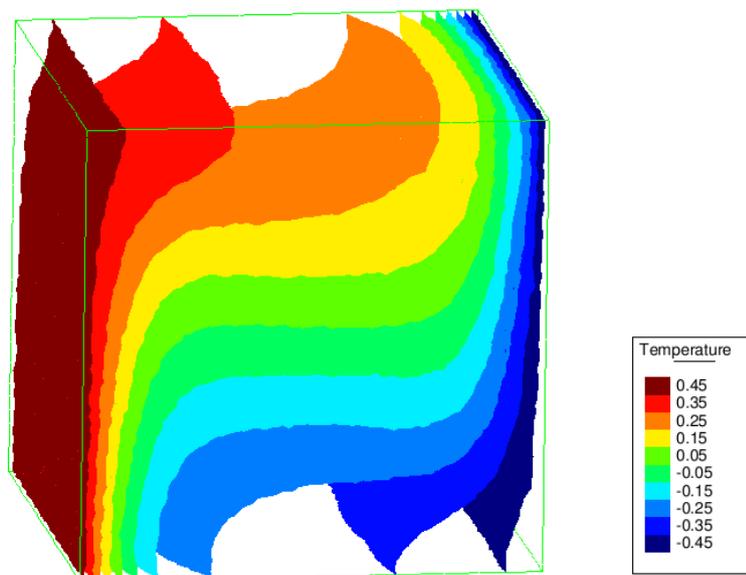


Figura 7: Isossuperfícies de temperatura para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$

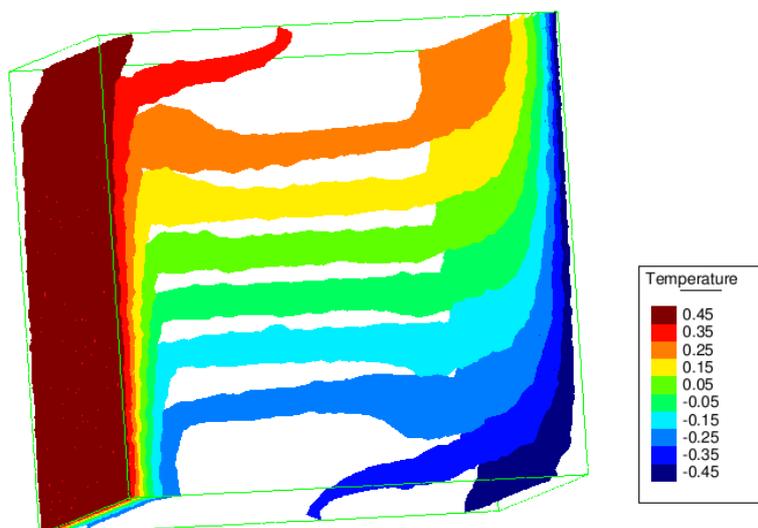


Figura 8: Perfil de temperatura para $R_a = 10^6$ e $P_r = 0,71$.

Comparando as três últimas figuras, é possível notar nos perfis de temperatura uma tendência maior à estratificação térmica conforme aumenta o número de Rayleigh.

A Figura 9 ilustra de forma qualitativa o comportamento do fluxo de calor para as simulações realizadas nesta seção.

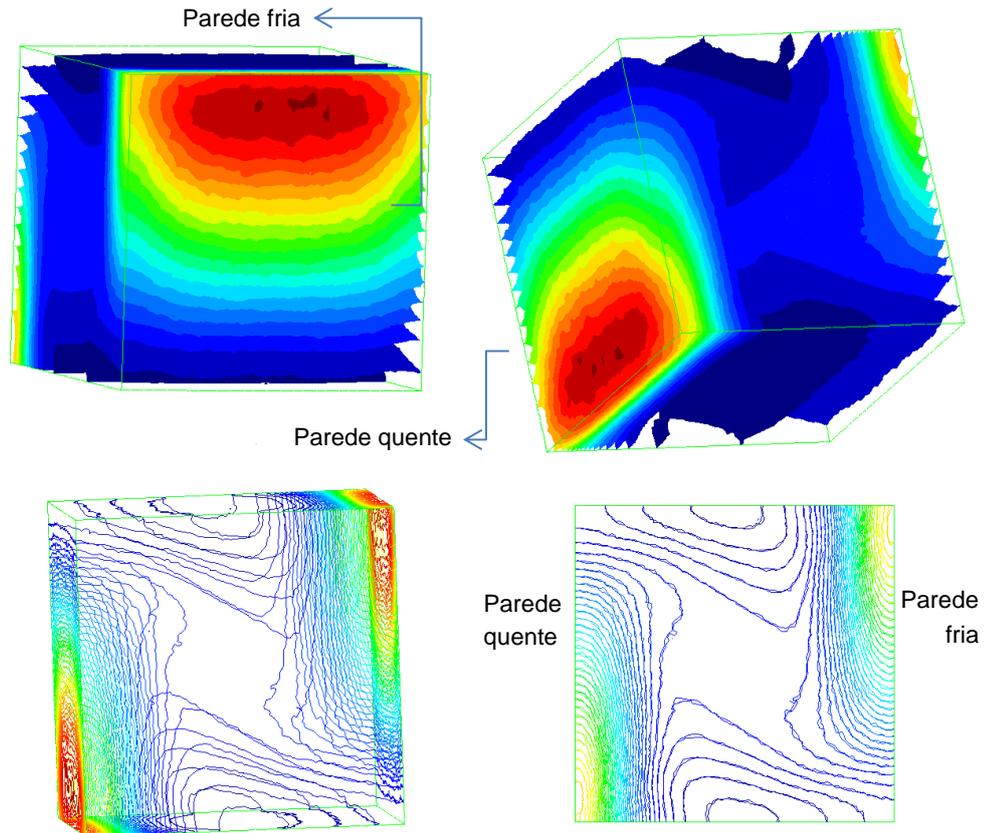


Figura 9: Ilustração qualitativa de fluxo de calor. Isossuperfícies e isolinhas de fluxo de calor.

Nela pode-se notar duas regiões em que o fluxo de calor é maior: região inferior da parede quente e região superior da parede fria. Isso pode ser explicado pelo fato de, como dito antes, o fluido inicialmente à temperatura nula, $T = 0$, recebe calor da parede quente, à esquerda. Dessa forma, sofre dilatação adquirindo a tendência de deslocar-se para cima, movido pelas forças de flutuação, função do coeficiente de expansão volumétrico, da diferença de temperatura e da gravidade. Ao subir recebendo calor da parede ele desloca o fluido mais frio localizado na região superior do cubo, fazendo com que este desça. Ao ser impulsionado para baixo e também ao trocar calor com a parede fria, sua temperatura diminui, e ele desce ainda mais rápido.

O fluxo de calor é maior nas regiões citadas porque esses são os pontos em que chegam com maior diferença de temperatura entre si e a parede, e baseado na relação de Fourier para o fluxo de calor, o fluxo de calor é mais intenso nessa situação.

A Figura 10 mostra o perfil de fluxo de calor obtido para $R_a = 10^4$ e $P_r = 0,71$. Observando a legenda, nota-se o valor máximo de fluxo de calor, $q'' = 3,632$ em duas regiões distintas, como previsto.

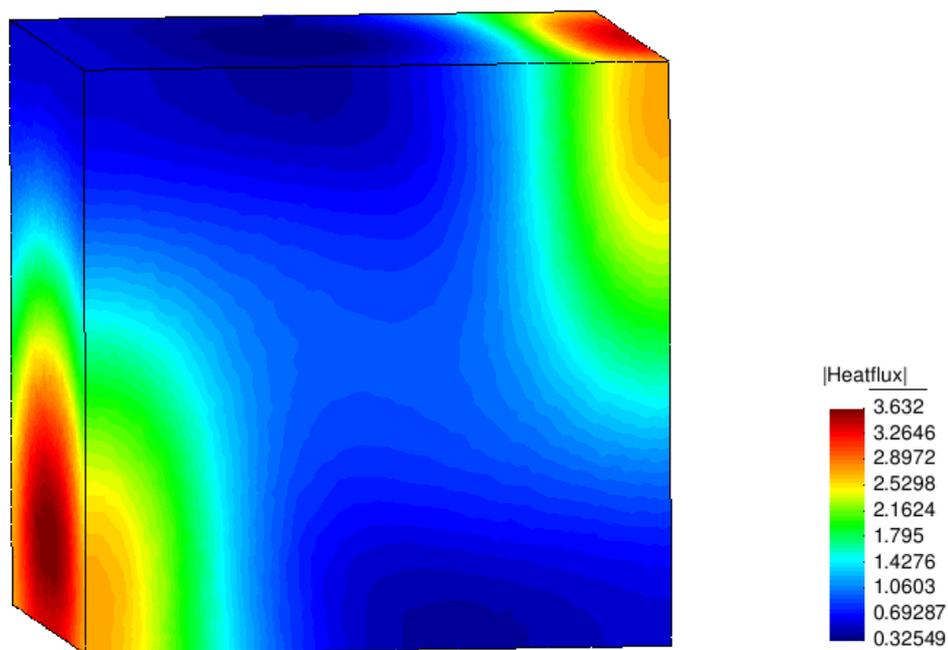


Figura 10: Resultado da simulação computacional mostrando o fluxo de calor para $R_a = 10^4$ e $P_r = 0,71$.

A Figura 11 mostra o perfil de fluxo de calor obtido para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$. Observando a legenda, nota-se o valor máximo de fluxo de calor, $q'' = 8,4592$ em duas regiões distintas.

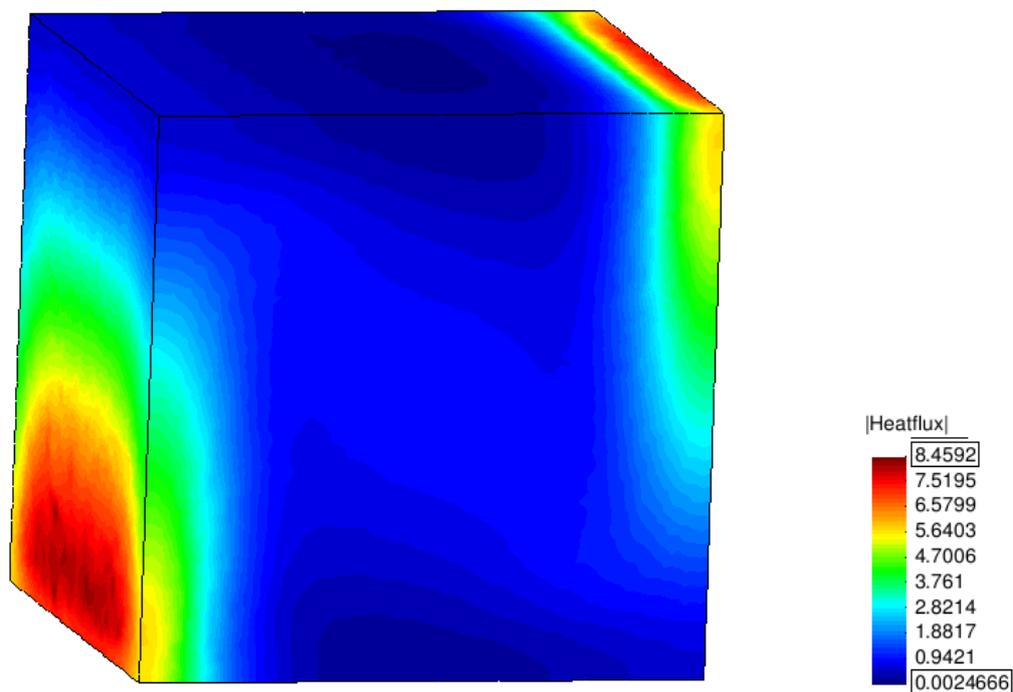


Figura 11: Resultado da simulação computacional mostrando o fluxo de calor para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$.

A Figura 12 mostra o perfil de fluxo de calor obtido para $R_a = 10^6$ e $P_r = 0,71$. Observando a legenda, nota-se o valor máximo de fluxo de calor, $q'' = 20,969$ nas duas regiões de maior fluxo.

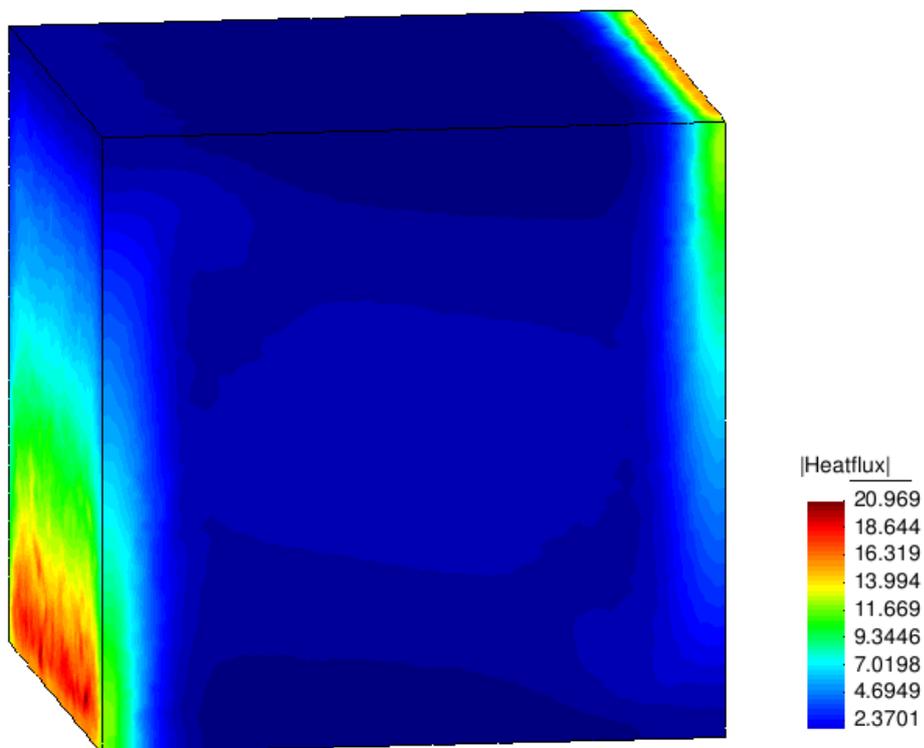


Figura 12: Resultado da simulação computacional mostrando o fluxo de calor para $R_a = 10^6$ e $P_r = 0,71$.

Os perfis de fluxo de calor expressam um aumento razoável do fluxo de calor máximo de acordo com o aumento do número de Rayleigh. Além disso, fluxo de calor mais intenso bastante concentrado nas duas regiões descritas.

A Figura 13 ilustra de forma qualitativa o comportamento da pressão para a simulação.

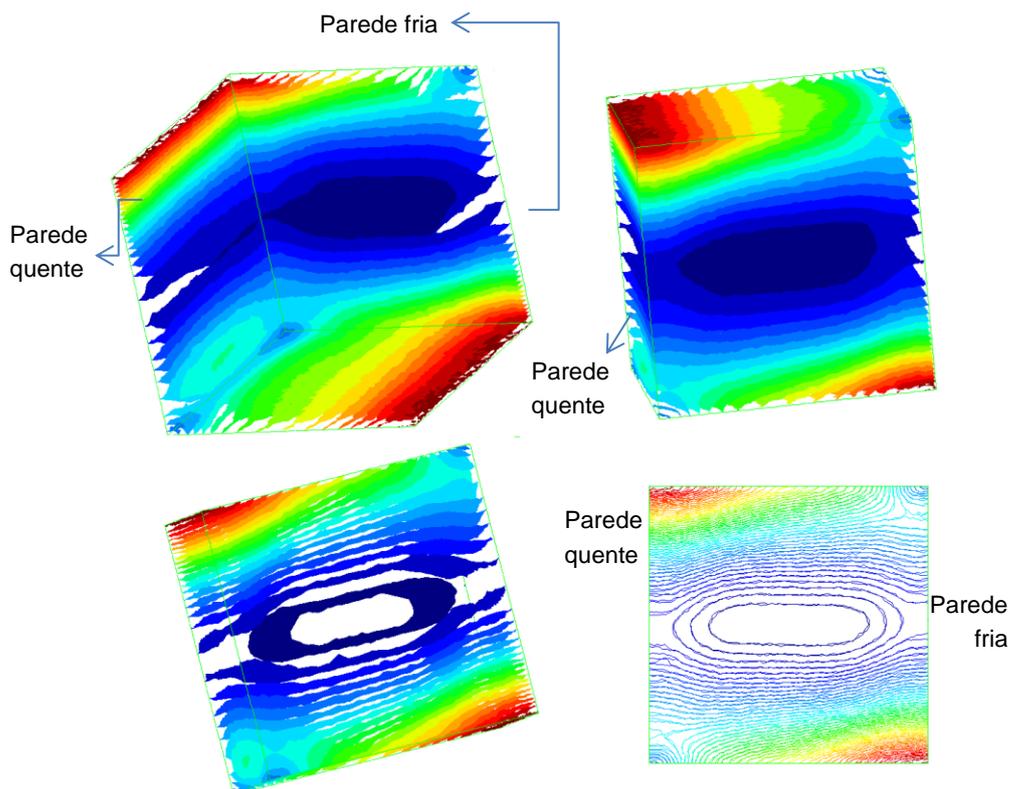


Figura 13: Ilustração qualitativa do perfil de pressão. Isossuperfícies e isolinhas de pressão.

Nela pode-se observar uma tendência à estratificação e duas regiões em que a pressão é maior: canto esquerdo da tampa superior e canto direito da face inferior. Isso pode ser explicado pelo fato de que ao se deslocar-se para cima, movido pelas forças de flutuação, o fluido adquire aceleração à medida que sobe, aumentando a sua velocidade, no entanto, depara-se com a tampa do cubo e o choque produz uma pressão maior nessa região. Do mesmo modo, o fluido mais frio tende a descer e se depara com a face inferior se chocando e produzindo pressão maior também nessa região.

As figuras a seguir mostram os resultados obtidos para as isossuperfícies de pressão para os Rayleigh 10^4 , 10^5 e 10^6 . A Figura 14 mostra as isossuperfícies de pressão para $R_a = 10^4$, a Figura 15, para $R_a = 10^5$ e a Figura 16, para $R_a = 10^6$.

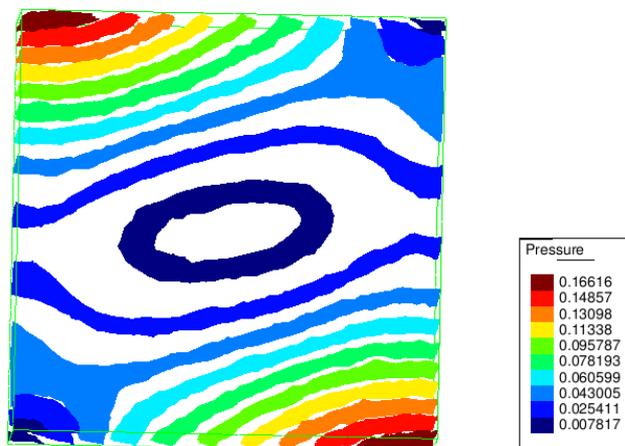


Figura 14: Isossuperfícies de pressão para $R_a = 10^4$ e $P_r = 0,71$.

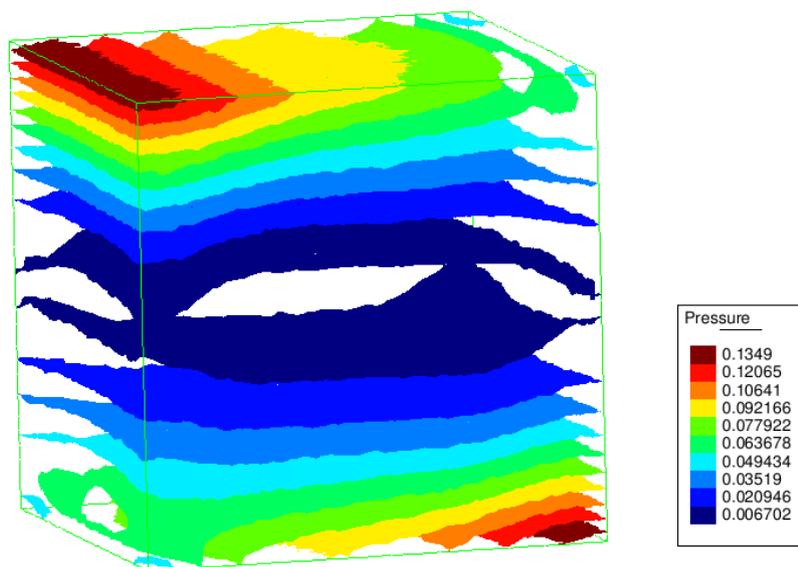


Figura 15: Isossuperfícies de pressão para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$.

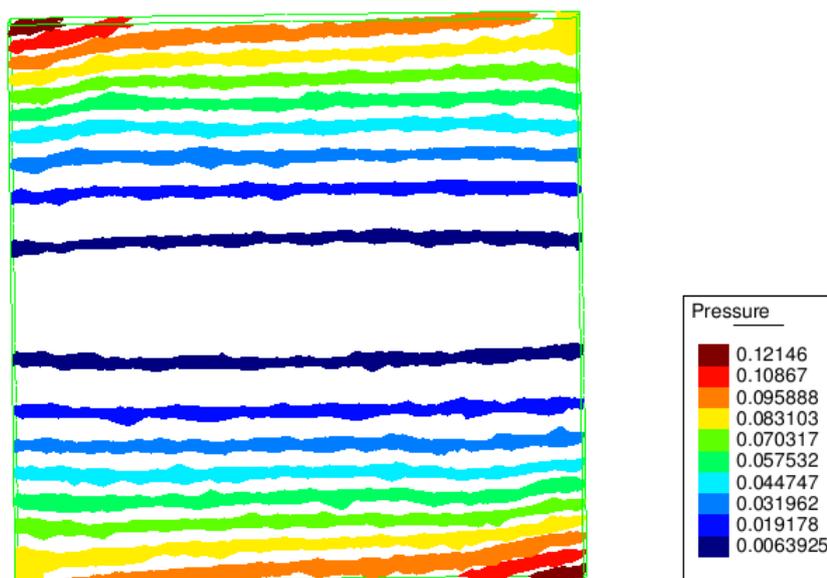


Figura 16: Isossuperfícies de pressão para $R_a = 10^6$ e $P_r = 0,71$.

A partir da observação dos perfis de pressão nas figuras mostradas para os diversos Rayleigh pode-se observar que, quanto maior esse parâmetro adimensional, maior é a estratificação da pressão.

Os perfis de velocidade no interior da cavidade podem ser melhor observados com o uso do recurso de vetores de velocidade, conforme apresentado na Figura 17.

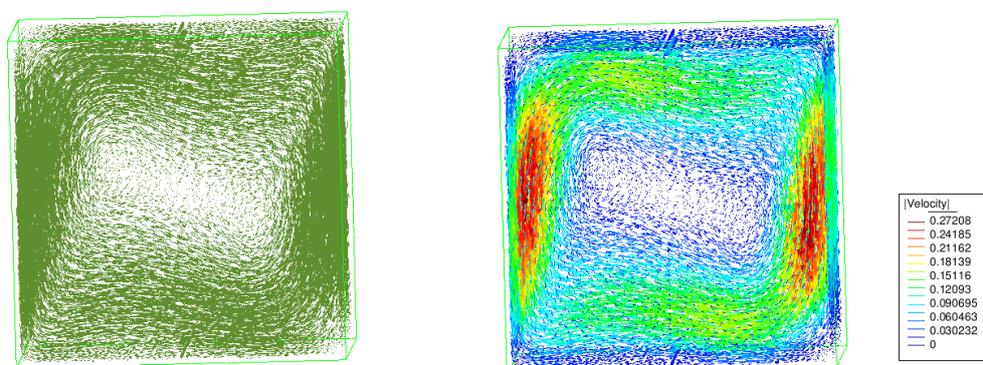


Figura 17: Vetores velocidade para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$.

Do lado esquerdo dessa figura é possível observar o perfil de movimento do fluido, que inicialmente tende a circular dentro da cavidade, mas logo toma uma forma com dois centros circulares menores e posicionados diagonalmente com relação à face frontal da cavidade. Um no canto esquerdo superior e outro no canto direito inferior. Isso pode ser explicado pelo fato de a convecção natural estabelecida é maior nessas regiões devido às condições de temperatura iniciais nas paredes do fluido.

Já no lado direito da Figura 17 é possível notar as diferentes intensidades de velocidade, dadas pelas cores presentes. Assim como nas outras figuras, a cor vermelha representa o valor mais intenso da propriedade mostrada, nesse caso da velocidade. A cor azul escuro representa o menor valor da velocidade. Nessa figura e também nas figuras 18 e 19, fica mais evidente que há maior intensidade de convecção nas regiões descritas anteriormente.

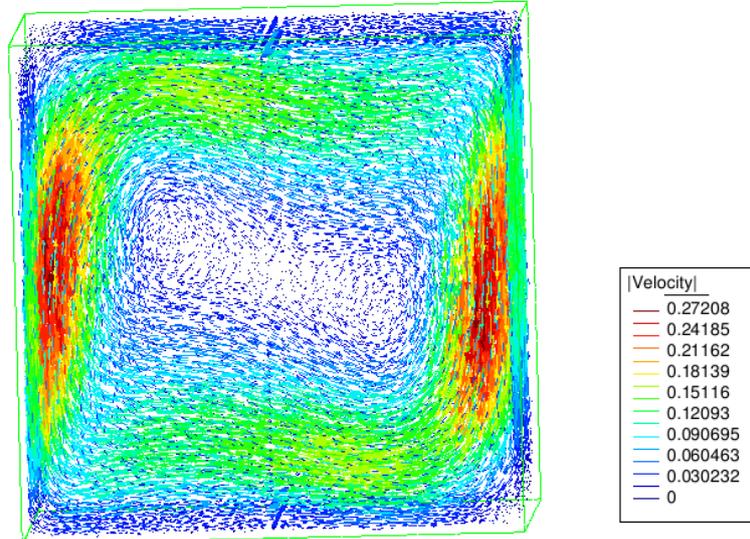


Figura 18: Vetores do módulo da velocidade para $R_a = 10^5$ e $P_r = 0,71$. Próximo às paredes isotérmicas a velocidade é maior.

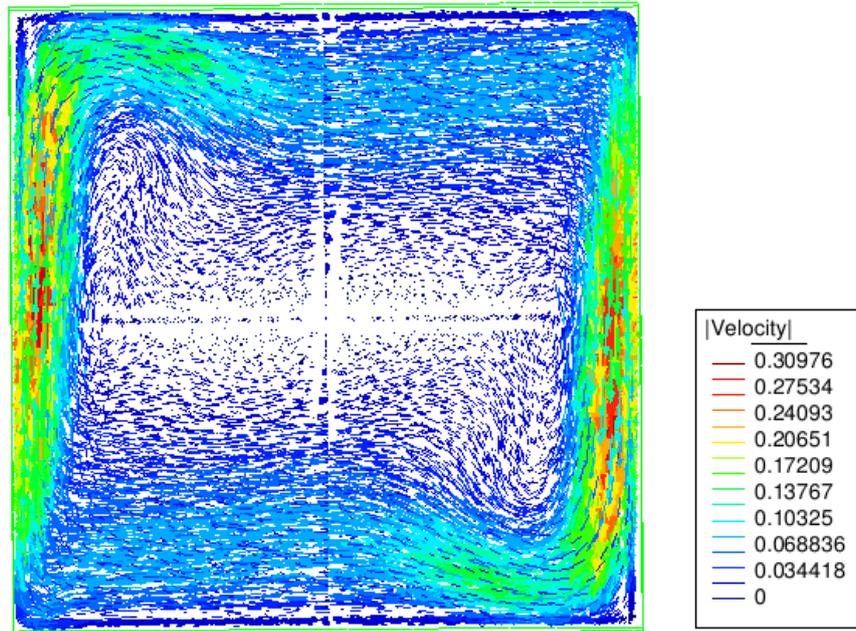


Figura 19: Vetores do módulo da velocidade para $R_a = 10^6$ e $P_r = 0,71$. Próximo às paredes isotérmicas a velocidade é maior.

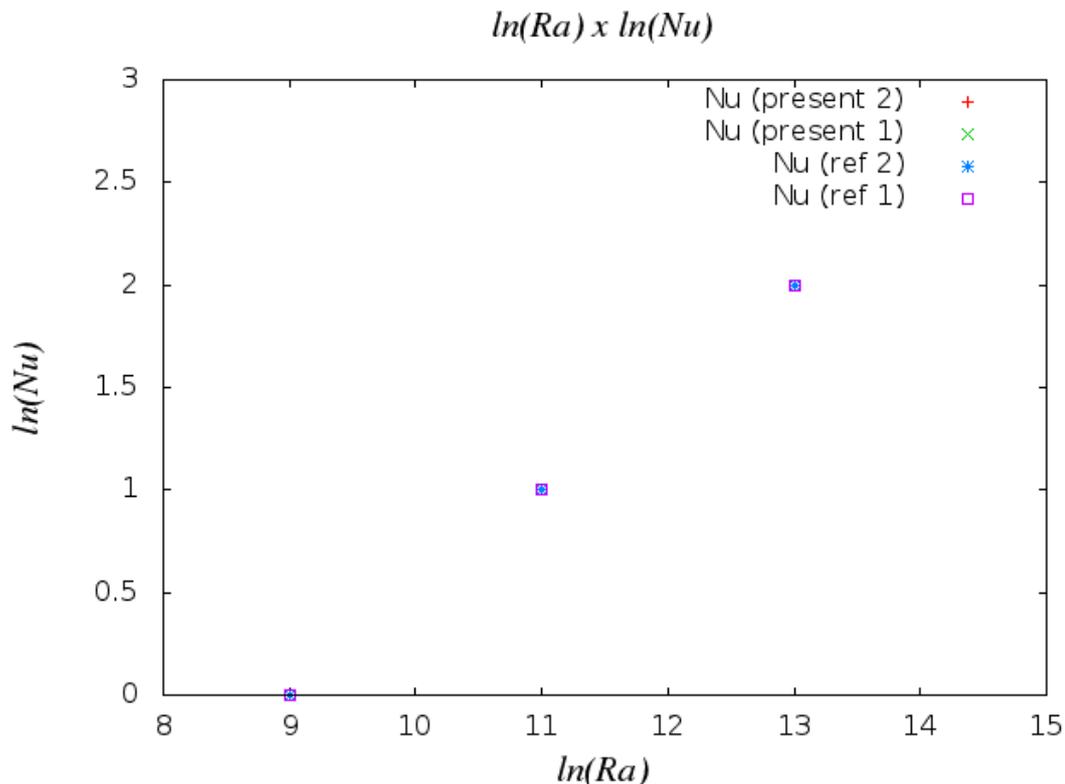
Quando os resultados obtidos para a malha M2 são comparados aos dos *benchmarks*, observa-se que a diferença entre eles está na terceira casa decimal. O resultado obtido via `ns_solver_MPI_3d_cd` e com a malha M2 servirá para estabelecer as comparações que seguem.

A Tabela 6 mostra as diferenças percentuais obtidas tomando os *benchmarks* como valores de referência, usando-se $\sigma_i = |Nu_{present} - Nu_{ref_i}| / Nu_{ref_i}$, com i variando de 1 a 2. De forma que σ_1 expressa a diferença percentual relativa entre o valor obtido com a melhor malha pelo código gerado nesta dissertação e a referência do *benchmark* 1. Analogamente, σ_2 expressa a diferença percentual relativa entre o valor obtido pelo código gerado nesta dissertação e a referência do benchmark 2.

Tabela 6: Resultados obtidos comparados aos *benchmarks*.

R_a	N_u present	N_u ref_1	σ_1	N_u ref_2	σ_2
1×10^4	2,0400	2,0634	1,1	2,0542	0,7
1×10^5	4,2914	4,3713	1,8	4,3370	1,1
1×10^6	8,4515	8,7732	3,7	8,6407	2,2

A Figura 20, compara de forma qualitativa os resultados obtidos por meio do uso do código apresentado, como sendo Nu [present_1] e Nu [present_2] e as referências dadas pelos *benchmarks* 1 e 2 (Nu [ref_1] e Nu [ref_2]). Nela, Nu [ref_1] refere-se ao número de Nusselt resultado do *benchmark* 1, Nu [ref_2] refere ao *benchmark* 2, Nu [present_1] refere-se aos resultados obtidos nesta dissertação utilizando a malha M1 e Nu [present_2] usando a malha M2

Figura 20: Gráfico $\ln(N_u) \times \ln(R_a)$, estabelece a relação entre N_u e R_a .

Um gráfico com barra de erro associada a comparação entre os quatro valores do número de Nusselt mostrados na Figura 20 é mostrado na Figura 21.

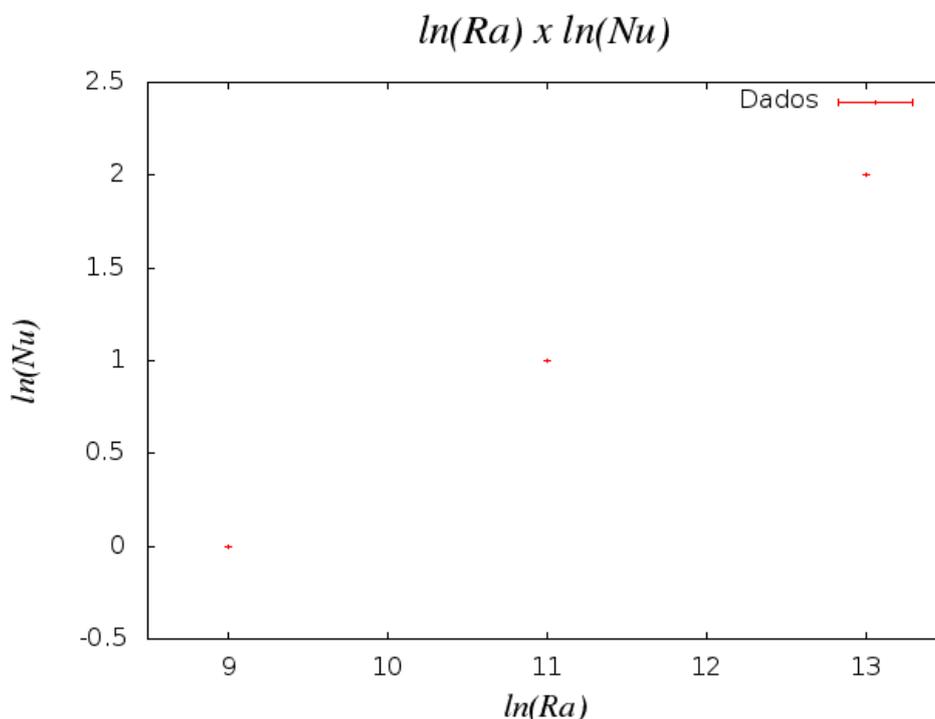


Figura 21: Gráfico de $\ln(Ra)$ x $\ln(Nu)$ com barra de erro entre $N_u[ref_1]$, $N_u[ref_2]$, $N_u[present_1]$ e $N_u[present_2]$.

Alguns *streamline velocity* foram traçados com o objetivo de observar melhor as peculiaridades presentes no movimento tridimensional de uma partícula de fluido no interior do cubo devido à convecção natural. As imagens obtidas são mostradas abaixo, Figura 22. *Streamline velocity* é um recurso presente no GID e representa a curva produzida pelas tangentes da velocidade nas linhas de corrente em cada ponto. Essa perspectiva não produz o efeito de profundidade quando tomada em análises bidimensionais, dadas as limitações do modelo.

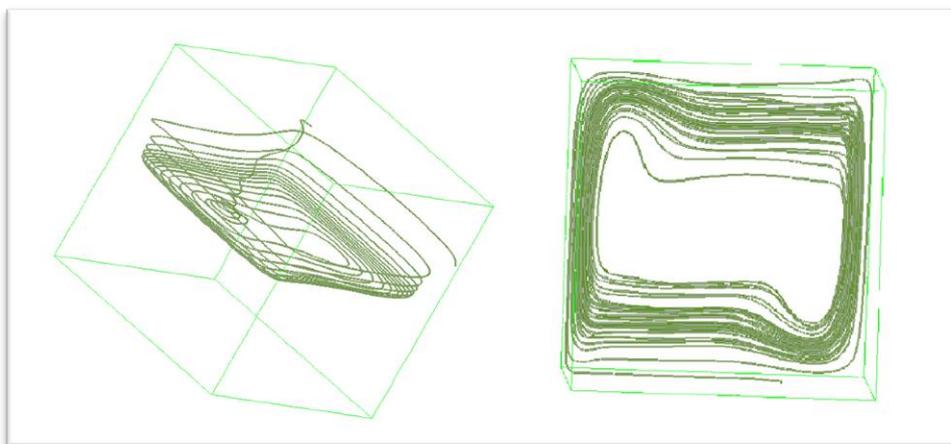


Figura 22: Streamline velocity ($R_a = 5 \times 10^5$). À esquerda, *streamline* produzido no ponto de coordenadas $(-4,0.5,0.5)$ e à direita $(-4,0.5,0.1)$.

Visto que os resultados obtidos para os valores de Nusselt médio estão de acordo com a literatura, apresentando erros percentuais bastante pequenos, o objetivo desta etapa, validar a fluidodinâmica implementada no código apresentado, foi cumprido. O próximo passo é validar o decaimento radioativo, que será apresentado na próxima seção.

5.2 CAVIDADE CUBICA 3D – VALIDANDO O DECAIMENTO RADIOATIVO

Nesta etapa será considerada a mesma cavidade cúbica apresentada anteriormente, fechada e com duas paredes diferentemente aquecidas e isotérmicas. No entanto, o fluido interno à cavidade é inicialmente composto apenas pelo elemento ϕ , radioativo e de meia vida curta quando relacionada ao tempo de simulação. O decaimento desse radionuclídeo produz o elemento φ , de meia vida muito longa, e que, para o objetivo da análise, pode ser considerado como estável.

Com o objetivo de validar a implementação da transmutação ou decaimento radioativo no código construído, o `ns_solver_MPI_3d_cd`, será dada a condição de coeficiente de expansão volumétrica nulo, de forma que o fluido, ao aquecer-se, não varie de sua densidade produzindo a circulação natural. Ao invés dessa escolha,

Devido ao grande número de dados obtidos, os resultados obtidos são melhor apresentados graficamente. A Figura 23 mostra a curva de decaimento teórica, descrita matematicamente pela função $n(t) = n_0 e^{-\lambda t}$, onde $n(t)$ é a concentração de radionuclídeos na amostra no tempo t , n_0 é a concentração inicial de radionuclídeos e λ é a constante de decaimento radioativo, característica do radionuclídeo. Nessa mesma figura, a curva teórica está sobreposta da curva de decaimento obtida pelo código computacional ns_solver_MPI_3d_cd.

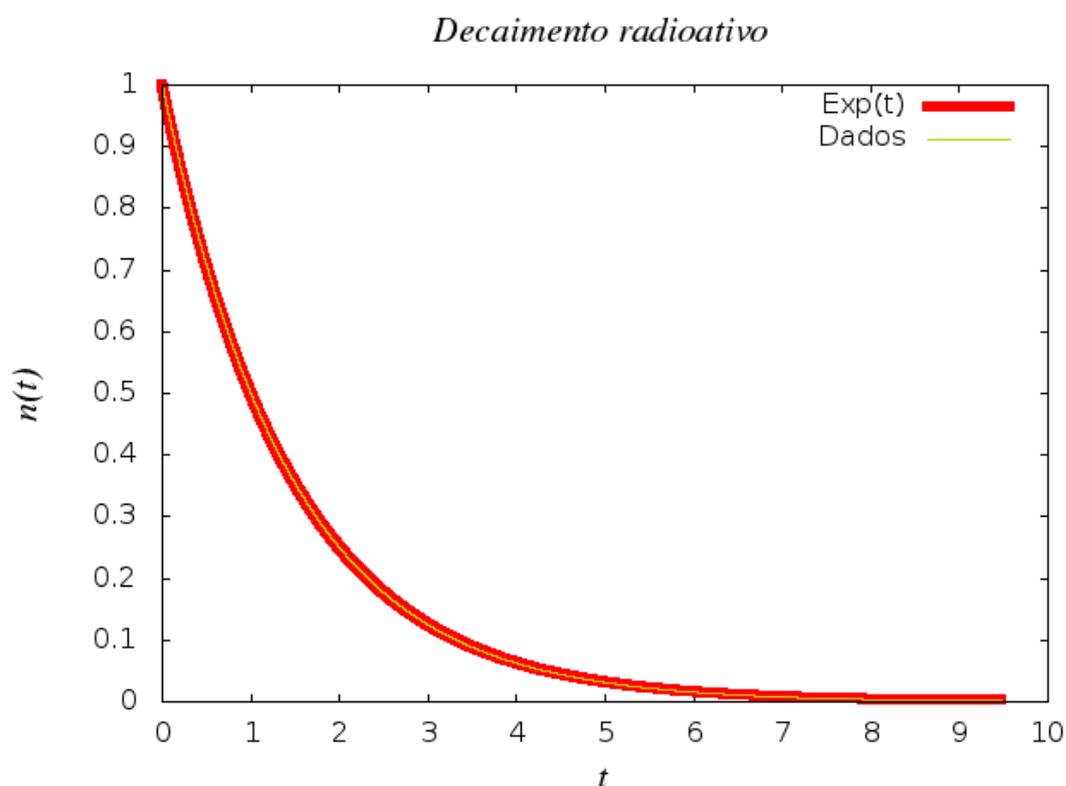


Figura 23: Gráfico de decaimento radioativo.

Observando a figura 23, pode-se notar que os resultados se mostram muito coerentes com curva teórica, sobrepondo-se a ela para qualquer tempo da análise.

Os resultados observados para o perfil de temperatura podem ser visualizados na Figura 24.

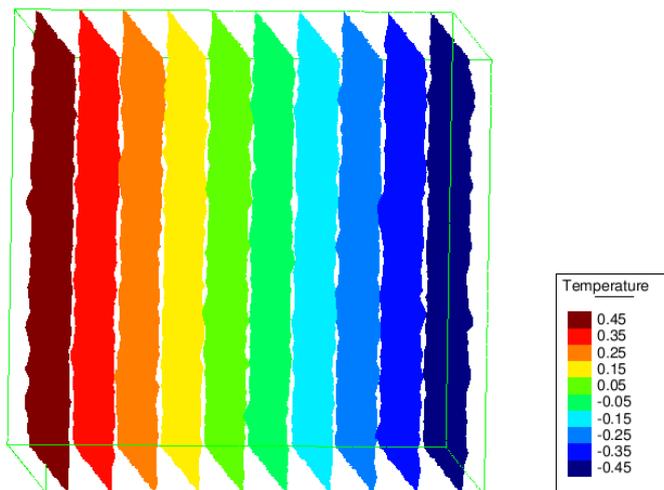


Figura 24: Isossuperfícies de temperatura.

Nela, pode-se notar que não há convecção do fluido como no caso da validação da fluidodinâmica. A temperatura varia de forma linear de uma parede isotérmica para a outra.

A Figura 25 mostra o perfil de pressão obtido nesta simulação.

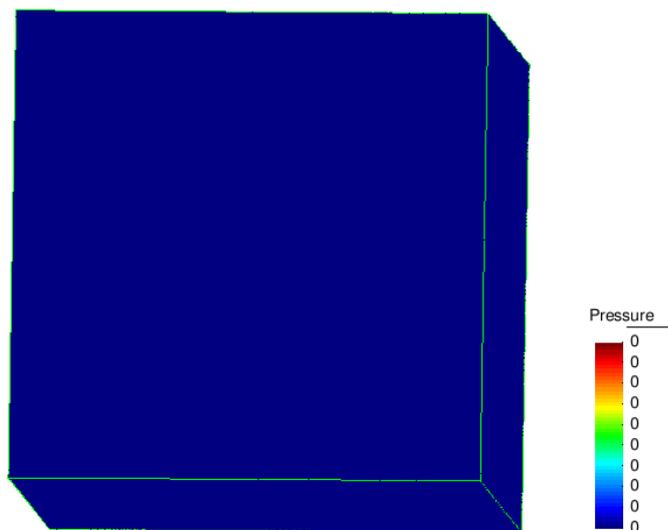


Figura 25: Perfil de pressão.

Conforme esperado, não há variações de pressão já que não há movimento e choque do fluido entre a tampa e a base da cavidade conforme na simulação de fluidodinâmica, apresentada anteriormente.

A Figura 26 mostra o perfil do fluxo de calor.

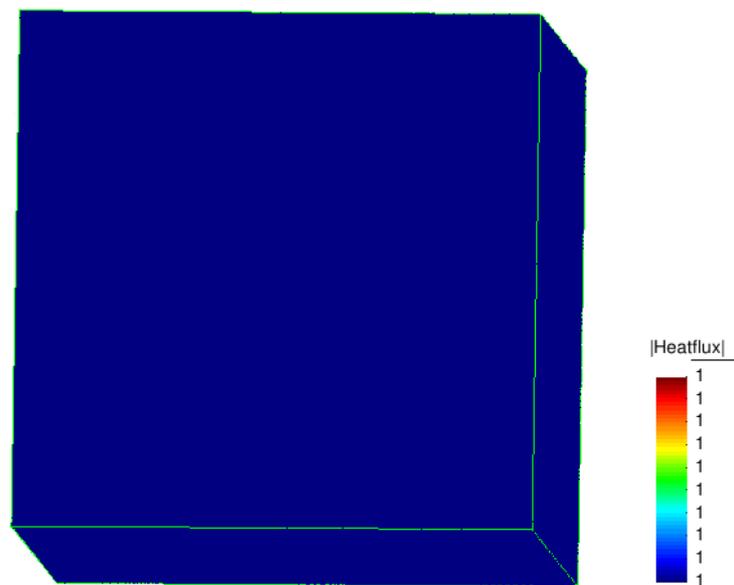


Figura 26: Perfil de fluxo de calor.

O fluxo de calor se manteve constante em $q'' = 1$. Resultado adequado considerando o fato de que não há convecção ocorrendo e portanto, o fluxo de calor não é aumentado.

6 APLICAÇÃO

Neste capítulo serão mostradas simulações numéricas realizadas em domínios tridimensionais, considerando uma situação hipotética. Trata-se de um acidente ocorrido com um veículo de transporte de material radioativo no interior de um túnel rodoviário ocasionando um incêndio.

6.1 ESTUDO DE CASOS

Foram selecionados três casos a ser simulados. Os casos A, B, turbulentos e o caso C, laminar. A geometria foi construída a partir de um semicilindro de raio $R=6\text{cm}$, cujas extremidades representam a entrada e saída do túnel. O túnel tem comprimento de 100 m e o acidente se dá a uma distância de 18 m a partir de sua entrada.

O fluxo de veículos através do túnel produz a entrada de vento e sua consequente saída pelo outro lado. Isso motiva uma das condições de contorno do problema, a entrada de ar por uma das aberturas do túnel. O ar entra a uma velocidade de $v_0 = 5\text{ m/s}$, o equivalente a 18 km/h .

Considera-se que, inicialmente, há um fluxo contínuo de ar a uma temperatura de 300 K no interior do túnel, equivalente à temperatura ambiente. A densidade do ar a essa temperatura é $\rho = 1,2\text{ kg/m}^3$, sua viscosidade é $\mu = 1,8 \times 10^{-5}\text{ kg/m.s}$, a condutividade térmica é $k=2,5 \times 10^{-2}\text{ w/m.K}$ e o coeficiente de expansão volumétrica é $\beta = 3,33 \times 10^{-3}\text{ K}^{-1}$.

A simulação é iniciada no momento do acidente. Portanto, o material radioativo sai da fonte quente a uma velocidade de $v_f = 1\text{ m/s}$ na vertical. Nesse acidente, embora improvável devido à rigidez das normas vigentes para o transporte de materiais dessa natureza, pode haver dispersão de radionuclídeos para o

ambiente. Além disso, em caso de incêndio do veículo, o material dispersado será aquecido, influenciando na dinâmica da pluma radioativa.

Foi escolhido um tempo de meia-vida curto para primeira espécie de radionuclídeo, $\tau_{1/2} = 8,4 s$, não representando de fato um radionuclídeo especial, mas apenas para que fosse possível observar a sua transmutação na segunda espécie durante a simulação. A tabela 8 indica as características principais das malhas utilizadas.

Tabela 8: Características das malhas testadas.

	h_{min}	$h_{interior}$	$n_{elementos}$	$n_{nós}$
M1	0,03	0,20	690719	171927
M2*	0,02	0,16	781306	195371

Visto que a malha M2 forneceu melhores resultados, foi usada como parâmetro para as simulações.

A tabela 9 mostra as características da fonte para os três casos apresentados.

Tabela 9: Características da fonte nos três casos de simulação apresentados.

	Caso A	Caso B	Caso C
$T_f(K)$	425	800	800

A geometria foi construída a partir de um semicilindro de raio $R = 6m$, cujas tampas representam a entrada e saída de carros. O túnel tem comprimento de 100 m. O acidente se dá a uma distância de 18 m contada a partir da entrada do túnel.

O fluxo de veículos através de um túnel produz a entrada de vento e sua consequente saída pelo outro lado, isso motiva uma das condições de contorno do problema, entrada de ar por uma das aberturas do túnel. A velocidade do ar no interior do túnel era de 5 m/s na horizontal, o que equivale a 18 km/h.

Considerando que, inicialmente há um fluxo contínuo de ar no interior do túnel e que no momento do acidente inicia-se a simulação. Nesse acidente, embora improvável devido à rigidez das normas vigentes para o transporte de materiais dessa natureza para esse tipo de transporte, pode haver dispersão de radionuclídeos para o ambiente. Além disso, em caso de incêndio do veículo, o material dispersado será aquecido, influenciando na dinâmica da pluma radioativa.

Visto que o objetivo nesta etapa do trabalho é mostrar o potencial do código desenvolvido, não foi feito um estudo mais profundo com relação a malha a ser utilizada. Os comprimentos de h_{min} , na parte mais refinada e de h , na parte mais grosseira da malha, são respectivamente 0,03 nas paredes sólidas e 0,20 no interior do domínio. Assim, é importante observar que este exemplo apresenta apenas resultados qualitativos.

As características no interior do túnel no momento do acidente podem ser vistas na tabela 10. Essas características foram obtidas ou calculadas a partir de informações presentes no site da engineeringtoolbox.

Tabela 10: Características no interior do túnel no momento do acidente.

T (K)	ρ (kg/m ³)	μ (kg/m.s)	κ (w/m.k)	β (K ⁻¹)	c (KJ/Kg.K)
300,0	1,2	$1,8 \times 10^{-5}$	$2,5 \times 10^{-2}$	$3,33 \times 10^{-3}$	1,005

A tabela 11 mostra os números adimensionais para os casos A, B, turbulentos e C, laminar.

Tabela 11: Números adimensionais para os casos A, B e C.

	Caso A	Caso B	Caso C
R_i	1	4	4
R_e	2×10^6	2×10^6	2×10^2
P_r	0,71	0,71	0,71
G_r	$4,0 \times 10^{12}$	$1,6 \times 10^{13}$	$1,6 \times 10^{13}$
D_a	$9,89 \times 10^{-2}$	$9,89 \times 10^{-2}$	$9,89 \times 10^{-2}$

A tabela 12 mostra alguns parâmetros da simulação, dentre eles o passo de tempo médio durante a simulação para cada caso e o número de iterações. As escalas de tempo dominantes em todos os três casos estudados foi a de energia.

Tabela 12: Resultados de parâmetros das simulações (malha M2).

	Δt_{medio}	$n_{iterações}$
Caso A	$1,7857 \times 10^{-2}$	2800
Caso B	$1,2422 \times 10^{-2}$	1610
Caso C	$1,2434 \times 10^{-2}$	3780

6.1.1 Caso A

O caso A trata de um escoamento turbulento, em que o número de Richardson é 1. Foram feitos alguns gráficos com isossuperfícies de temperatura e

concentração de radionuclídeos da primeira espécie, aquele que foi inicialmente transportado no acidente. Isossuperfícies de concentração da segunda espécie, produto do decaimento da primeira, também são mostradas.

A figura 27 mostra as isossuperfícies de temperatura. Nela é possível observar o fluido quente subindo, devido à presença de forças de empuxo, e ao mesmo tempo sendo transportado pelo ar que atravessa o túnel.

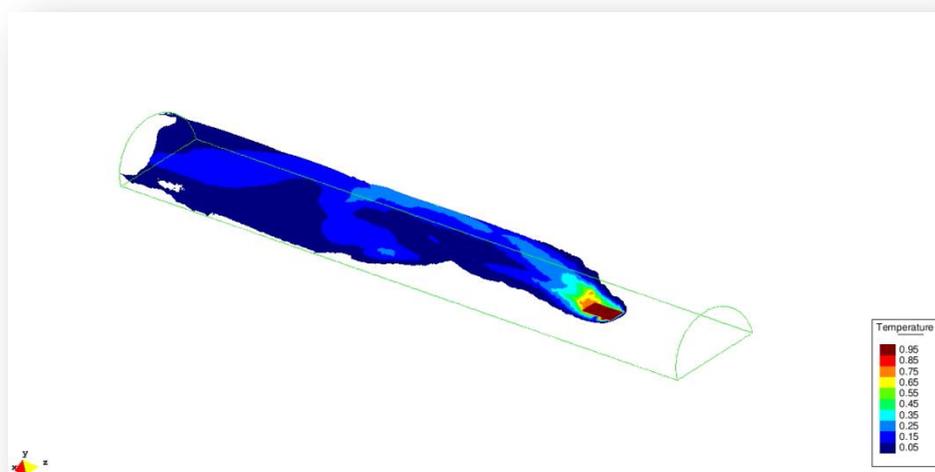


Figura 27: Isossuperfícies de temperatura para o caso A.

A figura 28 mostra as isossuperfícies de concentração da primeira espécie de radionuclídeos. Nela é possível observar o material radioativo subindo por estar a uma temperatura mais elevada do que o ar dentro do túnel. A primeira espécie é transportada pelo vento e, ao longo do caminho, sofre transmutação, decaindo numa segunda espécie.

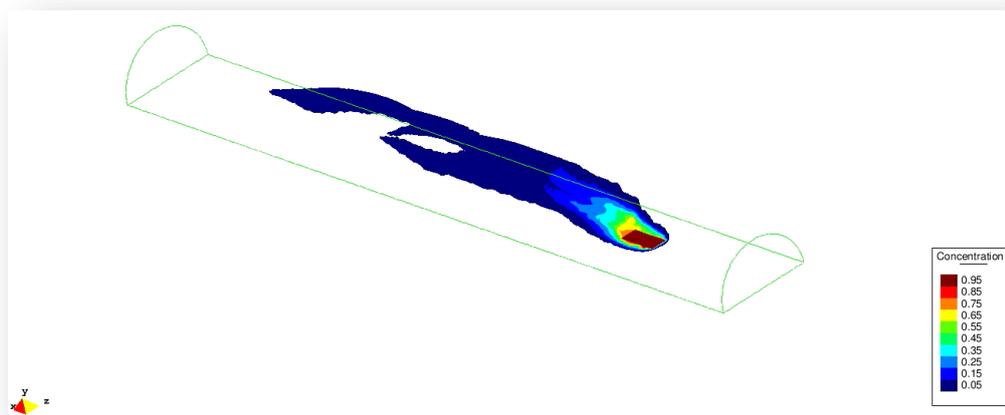


Figura 28: Isossuperfícies de concentração da primeira espécie para o caso A.

A figura 29 mostra as isossuperfícies de concentração da segunda espécie, que começa a aparecer algum tempo após o acidente. Esse tempo corresponde ao tempo que a primeira espécie leva para decair na segunda.

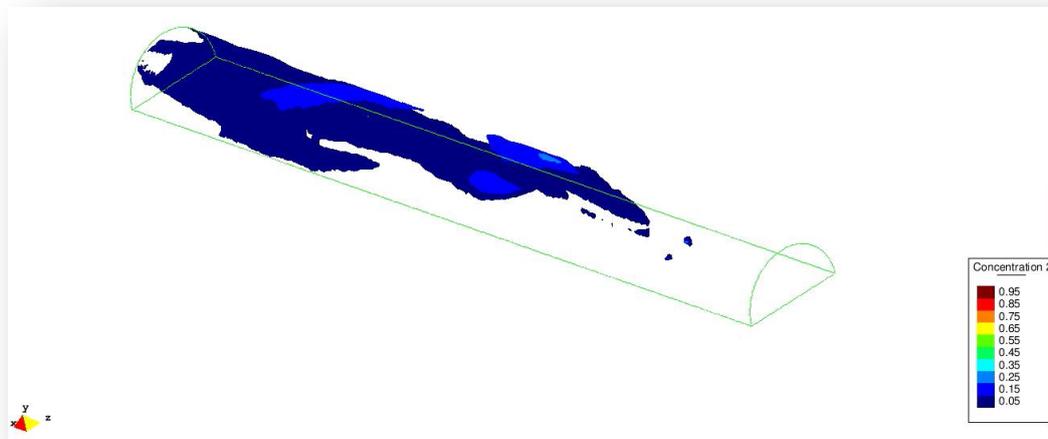


Figura 29: Isossuperfícies de concentração para a segunda espécie do caso A.

Os resultados qualitativos para o caso A mostram-se coerentes com o fenômeno físico a que a aplicação se propõe a reproduzir.

6.1.2 Caso B

O caso B trata de um escoamento turbulento, em que o número de Richardson é 4. Gráficos com isossuperfícies de temperatura e concentração de radionuclídeos da primeira espécie e da segunda espécie são mostrados abaixo.

A figura 30 mostra as isossuperfícies de temperatura. Assim como na figura 27 observa-se o fluido quente subindo e ao mesmo tempo sendo transportado pelo ar que atravessa o túnel.

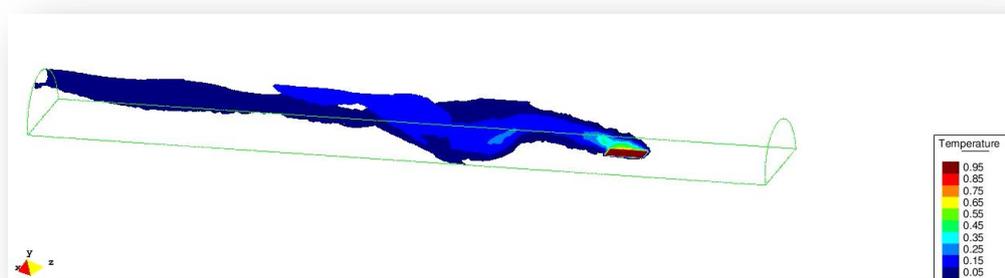


Figura 30: Isossuperfícies de temperatura para o caso B.

A figura 31 mostra as isossuperfícies de concentração da primeira espécie de radionuclídeos sendo transportada pelo ar.

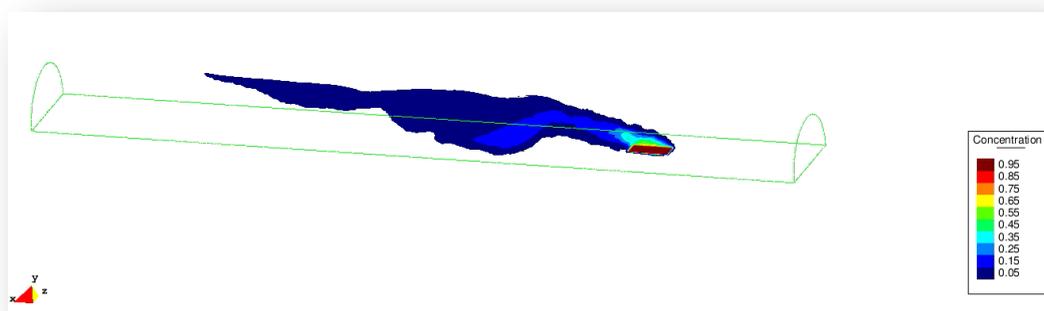


Figura 31: Isossuperfícies de concentração da primeira espécie para o caso B.

A figura 32 mostra as isossuperfícies de concentração da segunda espécie, produzida pelo decaimento da primeira.

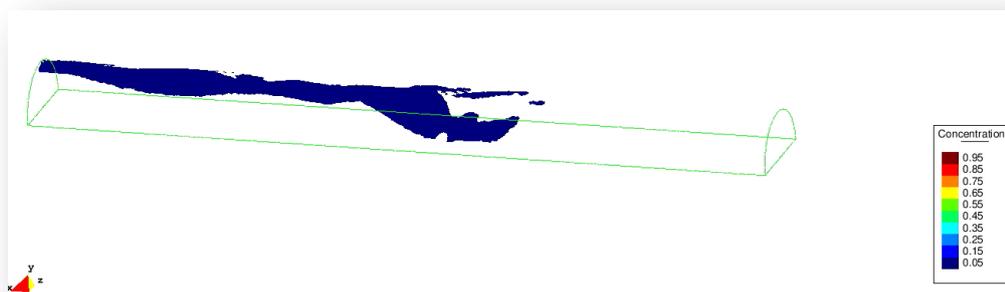


Figura 32: Isossuperfícies de concentração da segunda espécie para o caso B.

Da mesma forma nas figuras 30, 31 e 32, a pluma não parece estar muito bem comportada devido ao fato de o escoamento ser turbulento.

6.1.3 Caso C

O caso C trata de um caso laminar, com Richardson 4 cujos resultados qualitativos podem ser vistos abaixo.

A figura 33 mostra as isossuperfícies de temperatura.

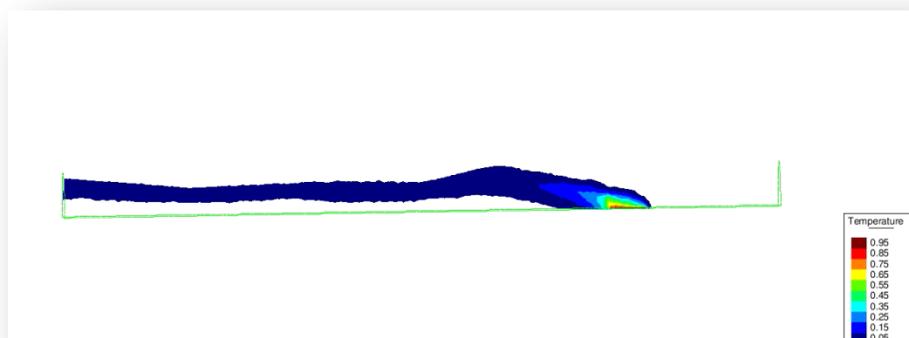


Figura 33: Isossuperfícies de temperatura para o caso C.

Nela é possível observar a pluma com um comportamento mais suave quando comparada aos casos A e B mostrados acima.

A figura 34 mostra as isossuperfícies de concentração da primeira espécie de radionuclídeos sendo transportada pelo ar.

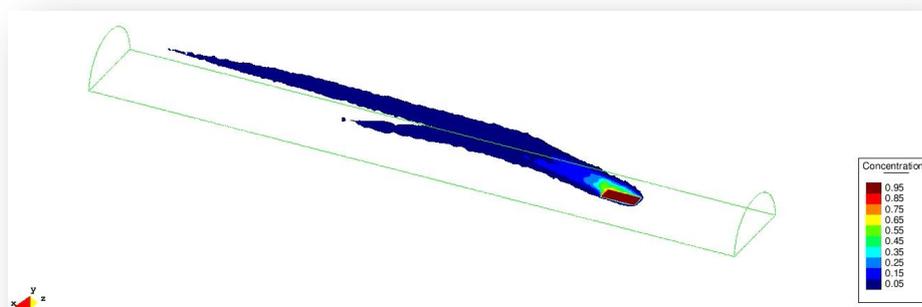


Figura 34: Isossuperfícies de concentração da primeira espécie para o caso C.

Nela, a pluma parece bastante comportada, o que pode ser atribuído ao número de Reynolds ser pequeno, caso laminar.

A figura 35 mostra as isossuperfícies de concentração da segunda espécie.

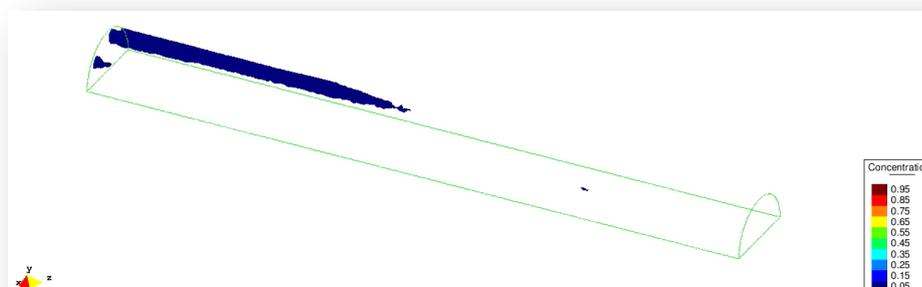


Figura 35: Isossuperfícies de concentração da segunda espécie para o caso C.

Todas as simulações foram realizadas com 12 cpus trabalhando em paralelo. Na próxima seção é mostrado o desempenho do processamento em paralelo.

6.2 DESEMPENHO DO PROCESSAMENTO EM PARALELO

Durante o processamento das simulações apresentadas o desempenho do trabalho em paralelo foi monitorado. A figura 36 mostra a imagem da tela com o percentual de trabalho de cada uma das 12 cpus utilizadas no sistema de computação paralela.

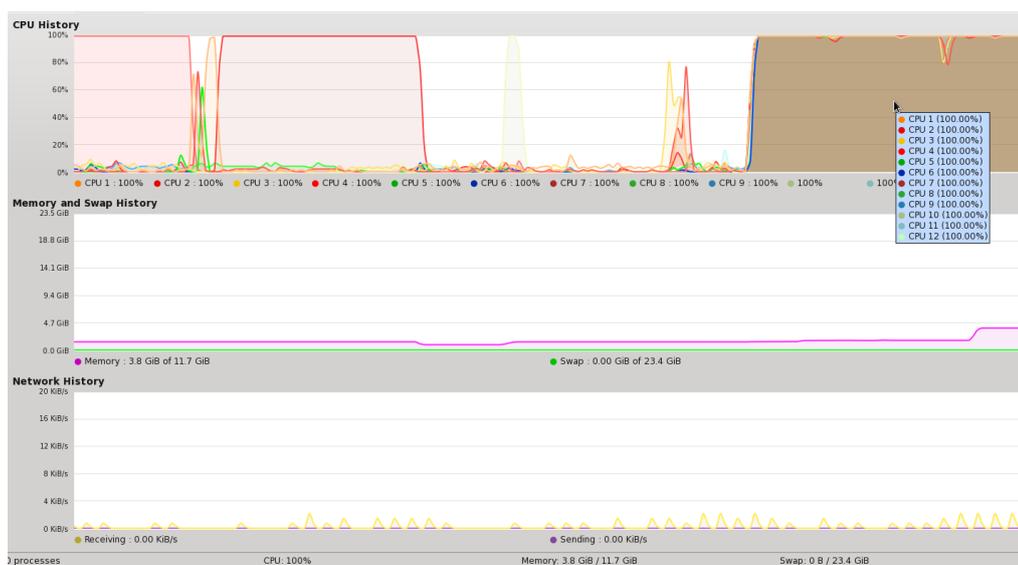


Figura 36: Desempenho do processamento em paralelo com 12 cpus ao iniciar o processo.

Na região mais à esquerda da figura se pode notar que há poucos processadores ativos, visto que a simulação ainda não havia começado. Ao iniciar a simulação em paralelo, região à direita na figura, todos os processadores trabalham a 100% ou muito próximo disso ao longo de toda a simulação computacional. A imagem mostrada atesta a eficiência do trabalho em paralelo empregado no código computacional, visto que os cálculos são feitos em grande parte do tempo utilizando mais de 98% do esforço de cada processador e na maioria das vezes mais de 99%.

7 CONCLUSÕES

Esta seção apresenta as conclusões do trabalho, ressaltando a importância da proposta, suas limitações e recomendações para trabalhos futuros.

7.1 RESULTADOS

Nesta dissertação foi proposta a produção e aplicação de um código computacional capaz de simular de forma bastante realística a fluidodinâmica da dispersão e o decaimento radioativo dos elementos constituintes da pluma, bem como a sua transmutação em radionuclídeos subsequentes.

Tendo em vista os resultados obtidos para os casos de validação, os fenômenos físicos a que o código se propõe a reproduzir, se mostraram coerentes. Portanto, o código computacional `ns_solver_MPI_3d_cd` mostrou boa performance frente às referências presentes na literatura.

Além disso, seu poder de realidade, mostrado pela simulação de transientes faz dele uma excelente ferramenta para a reprodução e análise de fenômenos de dispersão inclusive em casos de acidente, visto que cada acidente se desenvolve de forma peculiar. Esse tipo de análise não é possível em simulações estacionárias.

Além da predição do movimento do fluido, as simulações mostram claramente o comportamento da pluma que resulta do movimento turbulento do fluido e as suas interações com a estrutura, como sua conformação no interior do túnel, pois nos casos apresentados, o movimento da pluma radioativa ficou limitado pelo túnel.

Um outro aspecto importante é o efeito da temperatura sobre a pluma. Quando existe diferença de temperatura entre o material liberado e o meio, o material é levado para cima com maior rapidez devido à presença das forças de flutuação. Além disso, quanto maior essa diferença de temperatura, mais rápido o

material sobe, pois as forças responsáveis por esse fenômeno dependem, dentre outras coisas, dessa diferença de temperatura.

7.2 RECOMENDAÇÕES

Apesar do potencial da metodologia proposta neste trabalho, ela não foi melhor explorada devido às limitações relacionadas ao tempo de duração do curso de mestrado. Entretanto, ela permite um bom desempenho frente aos problemas de dispersão de radionuclídeos e uma extensa lista de possíveis aplicações.

Um exemplo disso é que a metodologia permite a escolha de radionuclídeos com cadeias de decaimento mais complexas ou até mesmo, a simulação de um número maior de radionuclídeos liberados simultaneamente. Essas condições podem ser abordadas em pesquisas futuras, no sentido de consolidar o método.

Geometrias mais complexas empregando diversas topografias e suas particularidades podem ser feitas em trabalhos futuros, visando análises mais profundas de interações entre o fluido e estruturas e seus efeitos de turbulência. Esse é um meio de explorar melhor os recursos oferecidos pelo código desenvolvido.

A metodologia prevê o seu uso para diversas situações e instalações que envolvam material radioativo. O dimensionamento de dutos de ventilação em locais como minas subterrâneas de urânio, onde o radônio se acumula é uma das possíveis aplicações.

A metodologia proposta, pode prover a concentração de radionuclídeos em pontos estratégicos contribuindo para estudos de dimensionamento de sítio antes de sua construção e provendo dados para análise de segurança e cálculo de dose em caso de acidente severo.

Identificar os locais de mais alta concentração e o radionuclídeo presente em determinadas regiões é importante. Esse é um tipo de análise de grande

relevância caso de um acidente, pois dessa forma se pode calcular a possível dose radioativa nessa região. Quando se trata de dispersão atmosférica, as regiões onde provavelmente haverá alta concentração estão localizadas mais próximas à fonte, nas regiões mais baixas, nos casos em que há menor diferença de temperatura. Já nos casos em que há alta diferença de temperatura entre o material dispersado e o ambiente no entorno, estando o dispersado com maior temperatura, as altas concentrações tenderão a se localizar em regiões mais altas devido às forças de empuxo.

Estudos desse tipo impactam diretamente na análise de segurança de centrais nucleares, onde a pluma proveniente da dispersão de radionuclídeos, além de possivelmente conter altas concentrações de diversos radionuclídeos, é liberada a altas temperaturas quando em caso de acidente. Esta metodologia é adequada para situações desse tipo, visto que nesse caso a turbulência também será produto da interação entre a pluma e os obstáculos nas redondezas da central nuclear, requerendo uma descrição mais detalhada de sua evolução. Nesse caso, estudos mais acurados requerem dados de topografia local, espécie e concentrações de radionuclídeos dispersados.

Visto que o objetivo principal deste trabalho é demonstrar o potencial da metodologia, para a mecânica de fluidos não há importância quanto às propriedades dos radionuclídeos dispersados. Entretanto, quando se trata de segurança nuclear e impacto ambiental, as taxas de concentração dos diversos radionuclídeos contemplados pela análise devem ser investigadas mais a fundo. Deve-se levar em consideração não só o tipo de radionuclídeo e sua meia vida física, mas também a sua meia-vida biológica e afinidades com os seres vivos e suas estruturas biológicas.

O potencial da metodologia proposta permite sua aplicação à análise de dispersão interna ou externa, e em ambas as situações por via atmosférica ou aquática. Isso gera uma grande possibilidade de aplicações, como no caso dos reatores de potência e de pesquisa, instalações de produção de radiofármacos, depósitos de rejeitos radioativos, fábrica de combustível nuclear, plantas de reprocessamento do combustível nuclear, etc. Com o mecanismo do decaimento

radioativo desativado, o código promove também uma importante contribuição para a análise de dispersão de plumas tóxicas provenientes de liberações de gases em outros setores industriais.

O uso malhas mais refinadas para aplicações com números de Reynolds alto deve ser considerado, de modo a otimizar o uso do código. Além disso, a implementação de malha adaptativa para a otimização das soluções também pode ser considerada.

É importante ressaltar que não existe a pretensão de tornar a presente metodologia em uma verdade absoluta. Muitos estudos e aplicações do método com diversas condições precisam ainda ser feitos. Também é relevante enfatizar que este trabalho não propõe a metodologia como substituta absoluta dos métodos já existentes, mas pretende sim ser considerada como uma alternativa para o tratamento de dispersão de radionuclídeos, em cuja perspectiva visa ao tratamento detalhado da turbulência.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, D. A., TANNEHILL, J. C., & PLETCHER, R. H. (1984). Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer.

BERTULANI, C. (s.d.). <http://omnis.if.ufrj.br/~bertu/fis2/hidrodinamica//turbulencia.html>. Acesso em 2013

BOSCH, G., & RODI, W. (1998). Simulation of Vortex Shedding Past a Square Cylinder with Different Turbulence Models. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 28, 601-606.

BREZZI, F., & FORTIN, M. (1991). Mixed and Hybrid Finite Element Methods.

BROOKS, A., & HUGHES, T. (1982). Streamline Upwind Petrov–Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows With Particular Emphasis on the Incompressible Navier–Stokes Equations. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, 199-259.

CARDOSO, E. D. (s.d.). Aplicações da Energia Nuclear. *Coordenação-Geral de Relações Institucionais*. Rio de Janeiro.

DE SAMPAIO, P. A. (1991). A Petrov–Galerkin Formulation for the Incompressible Navier–Stokes Equations Using Equal Order Interpolation for Velocity and Pressure. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 31, 1135-1149.

DE SAMPAIO, P. A. (setembro de 1991). Petrov-Galerkin Finite Element Formulations for Incompressible Viscous Flows. *Tese de D. Sc.*

DE SAMPAIO, P. A. (1993). Transient Solutions of the Incompressible Navier–Stokes Equations in Primitive Variables Employing Optimal Local Time Stepping., (pp. 1493–1504).

DE SAMPAIO, P. A. (2005). A Finite Element Formulation for Transient Incompressible Viscous Flows Stabilized by Local Time-Steps. *Computer Methods In Applied Mechanic And Engineering*, 194, 2095–2108.

DE SAMPAIO, P. A. (2005). *ns_solver_MPI_2d_cd_a.f90*. Rio de Janeiro: CNEN/IEN.

DE SAMPAIO, P. A. (2006). A Stabilized Finite Element Method for Incompressible Flow and Heat Transfer: A Natural Derivation Based on the Use of Local Time-Steps. *Computerm Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195, 6177-6190.

DE SAMPAIO, P. A. (2007). *ns_solver_MPI_3d.f90*. Rio de Janeiro, RJ: CNEN/IEN.

DE SAMPAIO, P. A., & COUTINHO, A. L. (1999). Simulation of Free and Forced Convection Incompressible Flows Using an Adaptive Parallel/Vector Finite Element Procedure. *International Journal for Numerical Methods in fluids*, 29, 289-309.

DE SAMPAIO, P. A., & MOREIRA, M. L. (2000). A New Finite Element Formulation for Both Compressible and Incompressible Fluid Mechanics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32, 51-78.

DE SAMPAIO, P. A., GONÇALVES JR, M. A., & LAPA, C. M. (2008). A CFD Approach to the Atmospheric Dispersion of radionuclides in the vicinity of NPPs. *Nuclear Engineering and Design*, 238, 250-273.

DE SAMPAIO, P. A., HALLAK, P. H., COUTINHO, A. L., & PFEILI, M. S. (2004). A Stabilized Finite Element Procedure for Turbulent Fluid-Structure Interaction Using Adaptative Time-Space Refinement. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 44, 673-693.

DUDERSTADT, J. J., & HAMILTON, L. J. (1976). *Nuclear Reactor Analysis*. New York, NY: John Wiley & Sons, Inc.

FORTUNA, A. O. (2000). Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações. *Livro*.

GONÇALVES JR, M. A. (2006). Aplicação da Fluidodinâmica Computacional à Dispersão Atmosférica de Radionuclídeos na Vizinhança de uma Central Nuclear. (IEN/CNEN, Ed.) *Dissertação - M.Sc.*

GRAVEMEIER, V. (2006). Scale Separating Operators for Variational Multiscale Large Eddy Simulation of Turbulent Flows. *Journal Of Computational Physics*.

GRINSTEIN, F. F., FUREBY, C., & DEVORE, C. R. (2005). On MILLES Based on Flux-limiting Algorithms. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1043-1051.

HIRSCH, C. (1990). *Numerical Computation of Internal and External Flows* (Vol. 1). (Wiley, Ed.) Bruxelas, Bélgica.

HUGHES, T. J. (1995). Multiscale Phenomena - Greens-Functions, The Dirichlet-To-Newmann Formulation, Subgrid Scale Models, Bubbles and The origins of Stabilized Methods. *Computer Methods In Applied Mechanic And Engineering*, 387-401.

HUGHES, T. J., FEIJO, G. R., MAZZEI, L., & QUINCY, J. B. (1998). The Variational Multiscale Method - A Paradigm for Computational Mechanics. *Computer Methods In Applied Mechanic And Engineering*, 3-24.

HUGHES, T. J., MAZZEI, L., & OBERAI, A. A. (2001). The Multiscale Formulation of Large Eddy Simulation: Decay of Homogeneous Isotropic Turbulence. *Physics of Fluid*, 13, 505-512.

HUGHES, T. J., OBERAI, A. A., & MAZZEI, L. (2001). Large Eddy Simulation of Turbulent Channel flows by The Variational Multscale Methods. *Physics of Fluids*, 1784-1799.

MARGOLIN, L. G., & RIDER, W. J. (2002). A Rationale for Implicit Turbulence Modeling. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 821-841.

MATHIEU, J., & SCOTT, J. (2000). An Introduction to Turbulent Flow.

MOREIRA, M. L. (Setembro de 1998). Simulação Computacional de Escoamentos Viscosos Copressíveis/Quase Incompressíveis. *Tese de D. Sc.*

MORTON, K. W. (1982). Generalised Galerkin Methods for Steady and Unsteady problems. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, 1-32.

PERAIRE, J. Z. (1986). Shallow Water Problems: A General Explicit Formulation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 22, 547-574.

PEYRET, R. a. (1983). *Computational Methods for Fluid Flow*. EUA: Springer-Verlag.

PIOMELLI, U. (s.d.). *Large-eddy and Direct Simulation of Turbulent Flows*. Acesso em 2013, disponível em <http://me.queensu.ca/People/Piomelli/>.

SAGAUT, P. (2001). Large Eddy Simulation for Incompressible Flows.

SCHLICHTING, H. (1971). *Boundary Layer Theory*.

SPENCER, A. J. (1980). *Continuum Mechanics Longman*.

TODREAS, N. E., & KAZIMI, M. S. (1990). *Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals*. New York, NY: Taylor & Francis Group.

TRIC, E., LABROSSE, G., & BETROUNI, M. (2000). A First Incursion Into the 3D Structure of Natural Convection of Air in a Differentially Heated Cubic Cavity, From Accurate Numerical Solutions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43, 4043-4056.

TU, J., YEOH, G. H., & LIU, C. (2008). *Computational Fluid Dynamics - A Practical Approach* (primeira ed., Vol. único). Elsevier.

VENKATESAN, R., MATHIYARASU, R., & M., S. K. (2002). A Study of Atmospheric Dispersion of Radionuclides at a Coastal Site Using a Modified Gaussian Model and a Mesoscale Sea Breeze Model. *Atmospheric Environment*, 36, 2933–2942.

VIVODA, V. (2012). Japan's energy security predicament post-Fukushima. *Energy Policy*, 46, 135-143.

WAKASHIMA, S., & SAITOH, T. S. (2004). Benchmark Solutions for Natural Convection in a Cubic Cavity Using the High-Order Time–Space Method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47, 853-864.

WILCOX, D. C. (2000). Turbulence Modeling for CFD.

YUE ZHAO, Y. C. (2012). The Fukushima Nuclear Power Station Incident and Marine Pollution. *Marine Pollution Bulletin*, 64, 897-901.

ZIENKIEWICZ, O. C., & MORGAN, K. (1983). *Finite Elements & Approximation*. Mineola, NY: Dover Publications, Inc.

ZIENKIEWICZ, O. C., & MORGAN, K. (1983). Finite Elements and Approximation.

ZIENKIEWICZ, O. C., & TAYLOR, R. L. (1999). *The Finite Element Method* (4^a ed., Vol. 1). Woburn, MA: Butterworth-Heinemann.

ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L., & NITHIARASU, P. (2005). *The Finite Element Method For Fluid Dynamics* (6th ed.). Barcelona, Spain: Elsevier.