

ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE
MATERIAIS
MESTRADO EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

RICARDO ANDRÉ SCHUH FRANTZ

**SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DE CORRENTES GRAVITACIONAIS COM
ELEVADO NÚMERO DE REYNOLDS**

Porto Alegre
2018

PÓS-GRADUAÇÃO - *STRICTO SENSU*



Pontifícia Universidade Católica
do Rio Grande do Sul

SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DE CORRENTES GRAVITACIONAIS COM ELEVADO NÚMERO DE REYNOLDS

RICARDO ANDRÉ SCHUH FRANTZ
ENGENHEIRO MECÂNICO

ORIENTADOR: PROF. DR. JORGE HUGO SILVESTRINI

Dissertação de mestrado realizada no Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais (PGETEMA) da Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia e Tecnologia de Materiais.

Porto Alegre
Março, 2018

Ficha Catalográfica

S385s Schuh Frantz, Ricardo André

Simulações Numéricas de Correntes Gravitacionais com Elevado Número de Reynolds / Ricardo André Schuh Frantz . – 2018.
89.

Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais, PUCRS.

Orientador: Prof. Dr. Jorge Hugo Silvestrini.

1. Simulação de grandes escalas. 2. Modelagem de escala de submalha. 3. Dissipação numérica. 4. Viscosidade turbulenta espectral. 5. Correntes de gravidade. I. Silvestrini, Jorge Hugo. II. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da PUCRS
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Bibliotecária responsável: Saete Maria Sartori CRB-10/1363



Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul

ESCOLA POLITÉCNICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

Simulações Numéricas de Correntes Gravitacionais com Elevado Número de Reynolds

CANDIDATO: RICARDO ANDRÉ SCHUH FRANTZ

Esta Dissertação de Mestrado foi julgada para obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais da Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul.



DR. JORGE HUGO SILVESTRINI - ORIENTADOR

BANCA EXAMINADORA



DR. GERVASIO ANNES DEGRAZIA - CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS - UFSM



DR. RUBEM MÁRIO FIGUEIRÓ VARGAS - DO PGETEMA/FENG - PUCRS

PUCRS

Campus Central

Av. Ipiranga, 6681 - Prédio 32 - Sala 505 - CEP: 90619-900

Telefone: (51) 3353.4059 - Fax: (51) 3320.3625

E-mail: engenharia.pg.materiais@puhrs.br

www.puhrs.br/politecnica

O sucesso é ir de fracasso em fracasso sem
perder entusiasmo. (Winston Churchill)

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a um futuro auspicioso e desafiador, rico em ciência e simulações.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos amigos e colegas Bruno Farenzena, Felipe Schuch e Karina Ruschel, fundamentais no desenvolvimento e amadurecimento deste trabalho, e aos estagiários Victor Neжелischi e Julio Rippol.

Ao Professor Rubem Vargas, por sua valiosa participação em bancas e avaliações. Ao Professor Filipi Vianna, pela assistência técnica computacional. A Professora Edith Beatriz, pelos seus ensinamentos e excelentes comentários. Ao Professor Sylvain Laizet pelas construtivas discussões. Ao Professor Jorge Silvestrini, pela oportunidade, disponibilidade e confiança.

Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Simulação de Escoamentos Turbulentos (LaSET/PUCRS), durante o projeto de pesquisa DNS-DAM, com suporte financeiro e intelectual da Petrobras e da CAPES. Todas as simulações apresentadas foram executadas no Supercomputador Santos Dumont. Portanto deixo aqui o agradecimento pelas horas de cálculo recebidas e pelo excelente suporte técnico disponibilizado pela equipe do LNCC. O autor reconhece o Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC / MCTI, Brasil) por fornecer os recursos HPC do supercomputador SDumont, que contribuíram para os resultados da pesquisa relatados nesta dissertação. URL: <http://sdumont.lncc.br>.

Agradeço a minha maravilhosa família: aos meus pais Sônia e Jânio, pelo suporte emocional e financeiro, e a minha irmã Ana (parceira de viagens e colega de apartamento) por incontáveis e maravilhosas jantãs.

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA	4
AGRADECIMENTOS	5
SUMÁRIO	6
LISTA DE FIGURAS	8
LISTA DE TABELAS	11
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	12
LISTA DE SÍMBOLOS	13
RESUMO	15
ABSTRACT	16
1. INTRODUÇÃO	17
2. OBJETIVOS	21
2.1. Objetivos Específicos	21
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
3.1. Correntes de densidade	22
3.1.1. Classificação quanto ao excesso de densidade	22
3.2. Fluxos de turbidez	24
3.2.1. Classificação quanto ao mecanismo de iniciação	25
3.2.2. Hidrodinâmica da corrente	26
3.3. Turbulência	30
3.3.1. Descrição estatística	31
3.3.2. Dinâmica de escalas	32
3.4. Simulação numérica	33
3.5. Aproximação de Boussinesq	37
3.6. Sedimentação de partículas	39
4. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	41
4.1. Equações governantes	41
4.2. Domínios fechados	43
4.3. Domínios abertos	44
5. METODOLOGIA NUMÉRICA	48
5.1. Código computacional	48

5.2. Discretização espacial	49
5.2.1. Núcleo para DNS.	50
5.2.2. Núcleo para ILES.	52
5.3. Formalismo LES e modelos submalha	53
5.3.1. Modelo Smagorinsky estático	54
5.3.2. Modelo Smagorinsky dinâmico.	55
5.3.3. Modelo local de adaptação local de paredes	56
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES	58
6.1. Comparação com DNS	58
6.2. Comparação com experimentos.	66
7. CONCLUSÕES	71
8. PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS	73
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74

APÊNDICES	81
APÊNDICE A. Balaço de energia para DNS	82
APÊNDICE B. Equação do número de onda modificado	83
B.1. Derivada de primeira ordem	83
B.2. Derivada de segunda ordem.	84

LISTA DE FIGURAS

1.1. Evolução de uma corrente de densidade em laboratório. Fluido mais denso à esquerda. Fonte: Shin et al. (2004).	20
3.1. Classificação de fluxos quanto A relação de sua densidade com à do fluido ambiente. Fonte: Manica (2009), adaptado de Mulder e Alexander (2001).	23
3.2. Formas de início de uma corrente de gravidade: (a) remobilização instantânea ou liberação de volume finito (exemplo de um desmoronamento) e (b) fluxo contínuo (exemplo de descarga de um rio no mar). Fonte: Manica (2009).	26
3.3. Fotografias de uma corrente de densidade salina demonstrando a evolução da salinidade por meio de contornos coloridos por tratamento de imagem. Canal em dimensões adimensionais e escala em gramas de sal por litro de fluido. Fonte: Sher e Woods (2015).	27
3.4. Esquema de corrente de turbidez demonstrando em duas seções: corpo (<i>body</i>) e cabeça (<i>head</i>). Fonte: Meiburg e Kneller (2010)..	28
3.5. Perfis de velocidade e concentração normalizados para correntes de densidade. Fonte: Kneller e Buckee (2000).	28
3.6. Estruturas presentes na região frontal de uma corrente de gravidade: (a) vórtices de Kelvin-Helmholtz e (b) estruturas de lobos-e-fendas. Fonte: Simpson (1999).	29
3.7. Vista de fundo de uma corrente de densidade se propagando sobre um canal horizontal com fundo rígido: visualização instantânea da corrente (superior) e o mapeamento da evolução das fendas (inferior). Fonte: McElwaine et al. (2004).	29
3.8. Solução de uma DNS de THI em espaço de espectral em função do número de onda. Os modos com significado físico estão dentro do cubo de aresta $2k_{max}$ delimitado pela linha tracejada. Três esferas são identificadas: a de raio k_{max} (máximo número de onda resolvido nas três direções), a de raio k_{DI} correspondendo as escalas de energia da região inercial do espectro e k_E , raio correspondendo ao pico de energia associado a escala integral. Fonte: Pope (2000, p. 351).	35
3.9. Isolinhas de concentração para tempos diferentes obtidas por DNS em configuração <i>lock-exchange</i> . Fonte: Härtel et al. (2000b).	36
3.10. Ilustração do espectro de energia resultantes de DNS e LES. Energia das escalas em função do número de onda k . k_c representa o número de onda de corte introduzido pela malha de cálculo em LES. Fonte: Pope (2000, p. 609).	36

3.11. Contornos de concentração para simulações com diferentes valores de γ com $Re = 4000$ em $t = 10$, mostrando a mudanças nas velocidade da frente e altura das correntes das correntes. Fonte: Birman e Meiburg (2006)	39
3.12. Relação de densidades γ para correntes com partículas em suspensão (não-conservativas) em função da diferença relativa de massa específica R e da fração volumétrica de partículas C_r	40
4.1. Esquema de um escoamento tipo liberação de volume finito em domínio fechado. Fonte: Espath et al. (2014)..	44
4.2. Esquema de domínio aberto em transição canal/bacia.	45
4.3. Ilustração dos perfis de velocidade, de concentração de sedimentos e da função de controle de vazão.	45
5.1. Gráfico do número de onda modificado k' (Eq. (5.2)) vs número de onda k para aproximações da derivada de primeira ordem f' centradas: (a) derivada exata, (b) esquema de segunda-ordem explícito, (c) esquema de quarta-ordem explícito ($\alpha = 1/4$), (d) esquema de quarta-ordem compacto ou Padé ($\alpha = 1/4$), (e) esquema de sexta-ordem compacto ou Padé ($\alpha = 1/3$).	50
5.2. Comparação entre núcleos para dissipação numérica artificial em esquemas de derivada segunda. Linha sólida para esquema de um ponto (O6DNS). Linha pontilhada representa esquema o de dois pontos (O6LES)..	53
6.1. Iso-superfícies de critério-Q (com $Q = 0.5$, parte superior) e de concentração (com $c=0.05$, parte inferior) do A1 em $t=9$	60
6.2. Resultado dos cálculos apresentados na Seção 6.1: (a) Evolução da posição da frente da corrente $x_f(t)$. (b) Evolução da velocidade de avanço da frente da corrente $u_f(t)$. (c) Evolução do balanço de energia de DNS. (d) Evolução da parcelas de energia cinética $E_k(t)$ e potencial $E_p(t)$. (d) Evolução da massa $m_p(t)$ normalizada pela massa inicial $m_p(t = 0)$	62
6.3. Campo de concentração médio em x_3 , com perfis de velocidade longitudinal em linha preta solida, em $t = 12$: (a) DNS, (b) ISVV, (c) SMAG, (d) DSMAG, (e) WALE.. . . .	63
6.4. Evolução de isolinhas de concentração junto ao fundo do canal: (a) DNS, (b) ISVV, (c) SMAG, (d) DSMAG, (e) WALE.	64
6.5. Mapa de velocidade de fricção junto ao fundo em $t = 24$: (a) DNS, (b) ISVV, (c) SMAG, (d) DSMAG, (e) WALE.	65
6.6. Resultados do caso B1: (a) Posição da frente $x_f(t)$. (b) Isolinhas de concentração junto ao fundo.	67
6.7. Resultados do Caso d14: (a) Posição da frente $x_f(t)$. (b) Perfis de depósito comparando diferentes tempos de simulação com tempos $t = 7.3, 11, 60$ do experimento.	68

6.8. Resultados de posição da frente $x_f(t)$ do cálculo B3. Comparação entre o resultado obtido e a curva experimental.	68
6.9. Resultados do Caso B4: Evolução de isolinhas de 1.5% de concentração no fundo para $t = 20$. (a) LES em domínio aberto. (b) DNS em domínio fechado. Fonte: Reproduzido de Francisco et al. (2018). (c) Sobreposição de isolinhas para DNS (em vermelho) e LES (em preto) em domínio aberto.	69
6.10. Evolução do campo de concentração salina para os casos (a) DNS a $Re = 10^4$ e (b) LES com ISVV a $Re = 10^6$. Ambos efetuados com a mesma malha de cálculo A1. LES possibilita um incremento de duas vezes na ordem de grandeza do número de Reynolds da simulação.	70

LISTA DE TABELAS

6.1. Condições de contorno.	58
6.2. Parâmetros numéricos de simulação.	59
6.3. Parâmetros numéricos de simulação.	66

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
O6DNS	Núcleo para DNS
O6LES	Núcleo para LES
DNS	Simulação numérica direta
DSMAG	Modelo Smagorinsky dinâmico
IBM	Método de fronteira imersa
ILES	Simulação de grandes escalas implícita
ISVV	Modelo de viscosidade turbulenta espectral implícita
KH	Kelvin-Helmholtz
LES	Simulação de grandes escalas
NS	Navier-Stokes
Re	Número de Reynolds
Ri	Número de Richardson
Sc	Número de Schmidt
TGV	Vórtices de Taylor-Green
THI	Turbulência homogênea e isotrópica
TKE	Energia cinética da turbulência
SGS	Tensor de escala de submalha ou subfiltro
SMAG	Modelo Smagorinsky
WALE	Modelo de viscosidade turbulenta de adaptação local de paredes

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras latinas

c_ℓ	Concentração da fracção ℓ
c_t	Concentração total
C_D	Campo dinâmico de coeficientes
C_K	Constante de Kolmogorov
C_r	Fracção volumétrica de partículas
C_S	Coefficiente Smagorinsky
C_W	Coefficiente WALE
\tilde{D}	Coefficiente de difusividade mássica do material [m^2/s]
\tilde{d}	Diâmetro da partícula [m]
e^g	Vetor unitário apontando no sentido da gravidade
\tilde{g}'	Aceleração da gravidade reduzida [m/s^2]
\tilde{g}	Aceleração da gravidade [m/s^2]
\tilde{H}	Escala de comprimento [m]
k	Número de onda
k_c	Número de onda de corte
k'	Número de onda modificado
k''	Número de onda modificado quadrado
L_i	Dimensão do domínio computacional na direção de x_i
$L_{i,b}$	Dimensão do sub-domínio computacional na direção de x_i
m_p	Quantidade de massa em suspensão no domínio
\dot{m}_s	Taxa de sedimentação de partículas
n_i	Número de pontos da malha na direção x_i

N	Número de fracções de sedimentos
p	Pressão
R	Relação dos coeficientes de massa específica
S_{ij}	Tensor taxa de deformação
t	Tempo
\tilde{U}	Velocidade característica [m/s]
$U^{b,i}$	Velocidade de convecção normal com relação à i
u_i	Vetor de velocidade
\tilde{u}_s	Velocidade de sedimentação de partículas [m/s]
u^*	Velocidade de fricção
x_i	Sistema de coordenada espacial na direção i

Letras gregas

γ	Relação de densidades
η_K	Escala de comprimento de Kolmogorov
η_B	Escala de comprimento de Batchelor
η_{OC}	Escala de comprimento de Obukhov–Corrsin
δ_{ij}	Delta de Kronecker
ϵ	Taxa de dissipação de energia turbulenta
κ_t	Coeficiente de difusividade turbulenta
$\tilde{\nu}$	Coeficiente de viscosidade cinemática [m^2/s]
ν_t	Coeficiente de viscosidade turbulenta
ρ_a	Massa específica do fluido ambiente
ρ_c	Massa específica da mistura
ρ_p	Massa específica do sedimento
τ_w	Tensão de cisalhamento junto à parede
ω	Vorticidade

RESUMO

SCHUH FRANTZ, Ricardo André. **SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DE CORRENTES GRAVITACIONAIS COM ELEVADO NÚMERO DE REYNOLDS**. Porto Alegre. 2018. Dissertação de mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais, PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO RIO GRANDE DO SUL.

Este trabalho investiga o método de simulação de grandes escalas (LES) no contexto de correntes gravitacionais. O mesmo se faz necessário, visto que possibilita um aumento substancial da ordem de grandeza do número de Reynolds característico utilizado em simulações numéricas, aproximando os mesmos de escalas naturais, além de reduzir significativamente o custo computacional dos cálculos. A avaliação dos modelos é realizada utilizando uma base de dados de simulação numérica direta (DNS). A metodologia de simulação de grandes escalas implícita (ILES), baseada no modelo de viscosidade turbulenta espectral, é colocado a prova de maneira inédita no contexto de correntes de gravidade com métodos explícitos disponíveis na literatura. Resultados demonstram que o mesmo, baseado puramente em dissipação numérica introduzida por meio do comportamento dos esquemas de derivada de segunda ordem, gera melhores correlações com as estatísticas baseadas em campos médios da simulação direta. Por fim, casos experimentais da literatura, em diferentes configurações de escoamento, são reproduzidos numericamente.

Palavras-chave: Simulação de grandes escalas, Modelagem de escala de submalha, Dissipação numérica, Viscosidade turbulenta espectral, Correntes de gravidade.

ABSTRACT

SCHUH FRANTZ, Ricardo André. **NUMERICAL SIMULATIONS OF GRAVITY CURRENTS WITH HIGH-REYNOLDS NUMBER**. Porto Alegre. 2018. Master Thesis. Graduation Program in Materials Engineering and Technology, PONTIFICAL CATHOLIC UNIVERSITY OF RIO GRANDE DO SUL.

This work investigates the method of large-eddy simulation (LES) in the context of gravity currents, which is found necessary since it allows a substantial increase in the order of magnitude of the characteristic Reynolds number used in numerical simulations, approaching them with natural scales, in addition to significantly reducing the computational cost. The implicit large eddy simulation (ILES) methodology, based on the spectral vanishing viscosity model, is unprecedentedly employed in the context of gravity currents, is compared against with explicit methods such as the static and dynamic Smagorinsky. The evaluation of the models is performed based on statistics from a direct numerical simulation (DNS). Results demonstrate that the first model based purely on numerical dissipation, introduced by means of the second order derivative, generates better correlations with the direct simulation. Finally, experimental cases of the literature, in different flow configurations, are reproduced numerically showing good agreement in terms of the front position evolution.

Keywords: Large eddy simulation, Subgrid-scale modelling, Numerical dissipation, Spectral vanishing viscosity, Gravity currents.

1. INTRODUÇÃO

Correntes de gravidade – densidade, ou empuxo – são uma nomenclatura para fluxos estratificados. Tais processos gravitacionais são governados pelas forças de empuxo resultantes da diferença de massa específica entre dois fluidos, os quais preferencialmente apresentam uma propagação horizontal. Simpson (1999) introduz exemplos de ocorrências naturais (como a formação de tempestades de areia, brisas do mar, avalanches, correntes oceânicas) e ocorrências antrópicas (como o vazamentos de óleo nos oceanos e de gás na atmosfera). Em um contexto oceanográfico, correntes podem originar-se devido ao excesso de massa específica do fluido, provocado por diferenças de temperatura, salinidade ou sedimentos em suspensão, sendo que o último caso, em particular, recebe também o nome de corrente de turbidez. Meiburg e Kneller (2010) comentam que os depósitos sedimentares em lagos e ambientes marinhos de águas profundas são compostos, em grande parte, por material transportado por correntes de turbidez.

Um caso canônico no estudo deste fenômeno consiste na liberação de fluidos com diferentes densidades em um tanque (reservatório de água), separados inicialmente por uma placa. Nesta configuração clássica, ao se retirar a placa, há o escoamento do fluido mais denso junto ao fundo e a conversão de energia potencial inicial em energia cinética (ver Figura 1.1. para exemplo). O escoamento resultante (em pequena escala) é similar às correntes que se formam em lagos, reservatórios e no oceano onde as escalas são muito maiores. De acordo com Constantinescu (2014), em tais casos o número de Reynolds (Re), coeficiente adimensional que relaciona forças inerciais com viscosas, geralmente é muito maior do que 10^5 . Correntes de gravidade que se propagam sobre um leito móvel (i.e. fundo do mar), podem erodir, transportar e depositar grandes quantidades de sedimentos a grandes distâncias (TALLING et al., 2007). Este transporte de material pode ter uma natureza destrutiva de proporções catafóricas: no ano de 2015, o rompimento de uma barragem de rejeitos de mineração, próximo ao município de Mariana/MG, liberou cerca de 50 milhões de metros cúbicos de rejeitos formando uma corrente que destruiu o distrito de Bento Rodrigues. No mesmo dia a corrente atingiu o rio Doce contaminando todo o ecossistema, por mais de 600 km, até mergulhar no Oceano Atlântico (ESCOBAR, 2015; MARTA-ALMEIDA et al., 2016).

Um exemplo de engenharia está relacionado a operações de bloqueios e eclusas em um estuário (transição entre um rio e o mar). Cada vez que a instalação é operada, um volume finito de água salgada é liberado para o rio formando uma corrente de densidade. Conhecer a distribuição espaço-temporal das tensões de cisalhamento sobre o fundo, induzidas pela passagem de uma corrente, é fundamental para estimar a capacidade de transporte de sedimento da corrente e os efeitos a longo prazo de operar uma represa na morfologia do canal (CONSTANTINESCU, 2014).

Estudos teóricos e experimentais foram conduzidos para entender a estrutura das correntes e para prever a evolução temporal de parâmetros globais como a velocidade da frente e altura da cabeça da corrente (GLADSTONE et al., 1998; ROOIJ; DALZIEL, 2001; SHER; WOODS, 2015). Medidas da distribuição de tensões de cisalhamento junto ao fundo, por exemplo, são quase impossíveis de se obter experimentalmente. Simulações numéricas, entretanto, podem ser utilizadas para estimar de maneira precisa a distribuição destas variáveis no espaço e no tempo, e proporcionam dados para um melhor entendimento das relações e interação dos parâmetros adimensionais associados ao problema, tais como o número de Reynolds, a concentração inicial, a difusividade, o tamanho e o material de partículas, por exemplo.

No método conhecido como simulação numérica direta, do inglês *direct numerical simulation* (DNS), um sistema de equações governantes, formado pelas equações de Navier-Stokes, é resolvido sem a necessidade de modelos de turbulência (LES/LEUR, 2008) devido à alta resolução da malha de cálculo. Neste tipo de simulação (i.e., DNS) as escalas de movimento são resolvidas no espaço e no tempo até as menores escalas dissipativas, permitindo o acesso a um vasto volume de dados com muita riqueza de informações (em disco, normalmente na ordem de terabytes). Este é um método consolidado, mas limitado a escoamentos com $Re \sim O(10^4)$ (ESPATH et al., 2013; FRANCISCO et al., 2017), mesmo com o uso de supercomputadores. Correntes de densidade com números de Reynolds desta magnitude ficam restritos a casos laboratoriais, mas são importantes para investigações fundamentais.

A simulação de grandes escalas, do inglês *large-eddy simulation* (LES), é uma alternativa para redução do custo computacional (horas de cálculo ou espaço em disco) de DNS e possibilita a avaliação de correntes com números de Reynolds superiores. A metodologia baseia-se nos modelos de viscosidade turbulenta, que adicionam a dissipação viscosa da energia cinética do escoamento que deveria ter sido gerada pelas menores escalas de movimento que não foram resolvidas devido à falta de resolução espacial. O objetivo de um modelo é dissipar a quantidade correta de energia do escoamento calculado a partir das grandes escalas e permitir um fluxo de energia realístico de um ponto de vista físico entre as escalas resolvidas e as modeladas.

O primeiro modelo de LES foi desenvolvido para simulações de circulação atmosférica (SMAGORINSKY, 1963). Desde então diversas melhorias foram propostas visando a uma maior exatidão e, especialmente, no controle da dissipação aportada em regiões transicionais ou de pouca turbulência (GERMANO et al., 1991; LILLY, 1992) e próximo a paredes (DUCROS et al., 1998; NICLOUD; DUCROS, 1999). Esta abordagem explícita, entretanto, adiciona operações numéricas extras como filtragem dos campos de grandezas numéricas e médias complexas que podem inviabilizar a investigação de escoamentos não-simétricos e sem direções homogêneas. Lamballais et al. (2011) propõem a utilização de dissipação numérica imposta pela modificação dos coeficientes dos esquemas de diferenças finitas da derivada de segunda ordem, utilizados na discretização do termo viscoso das equações de quantidade de movimento e do transporte escalar. Não sendo adicionadas equações extras ou modelos ao sistema: a dissipação ocorre precisamente nas escalas desejadas e na intensidade desejada. Esse método, conhecido como simulação de grandes escalas implícita, do inglês *implicit large-eddy simulation* (ILES), possui vantagens com relação à versão explícita, visto que não são adicionadas operações numéricas extras e as grandes escalas são invisíveis ao método.

Este trabalho investiga metodologias de LES que são eficazes na redução de mais de 85% do número de pontos necessários para uma simulação a números de Reynolds de 10^4 comparado à DNS ou permitem um aumento substancial na ordem de grandeza do mesmo $O(10^6)$. Após os objetivos, é apresentada uma revisão bibliográfica de correntes de densidade e da descrição de turbulência. Em seguida, na metodologia introduzem-se as simplificações utilizadas, as equações governantes e condições de contorno. Por fim, na metodologia numérica, conceitos sobre o código computacional empregado, esquemas numéricos, formalismo e modelos de LES explícitos. Nos resultados, primeiro apresenta-se um estudo comparando resultados de DNS com LES, bem como um entendimento do impacto da mudança de metodologia para a qualidade de estimativas globais das correntes de densidade, em seguida, comparação entre resultados numéricos e experimentais. Por fim, as conclusões e sugestões de trabalhos futuros.

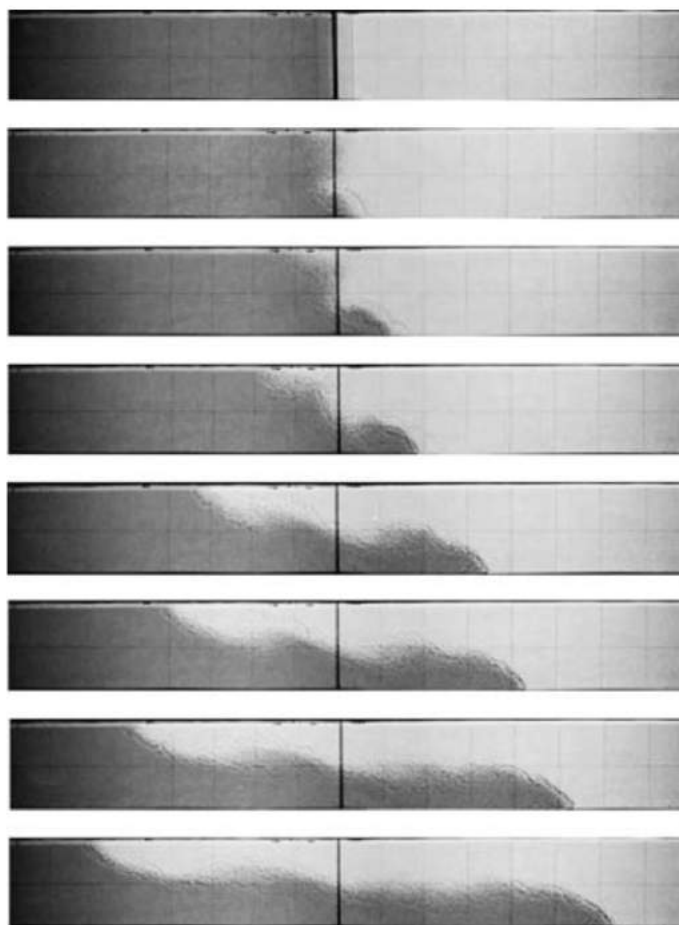


Figura 1.1. Evolução de uma corrente de densidade em laboratório. Fluido mais denso à esquerda. Fonte: Shin et al. (2004).

2. OBJETIVOS

Este trabalho ataca dois problemas: um primário, que consiste na necessidade de se investigar números de Reynolds elevados, com valores mais próximos aos encontrados na natureza, e um secundário, que atende a necessidade de redução do custo computacional das simulações.

O alto custo de DNS atrasa o desenvolvimento das ferramentas computacionais e a introdução de novas configurações de escoamento, bem como possíveis varredura de parâmetros. Por tais motivos foi necessário a introdução da metodologia de LES implícita e uma criteriosa comparação da mesma com resultados de DNS e modelos explícitos disponíveis na literatura.

O método de DNS é utilizado para a comparação, visando quantificar os resultados de diferentes modelos LES. A metodologia implícita baseada no modelo ISVV é empregada de maneira inédita no contexto de escoamentos estratificados e seu desempenho posto a prova contra os modelos explícitos disponíveis na literatura. O primeiro destes sendo o modelo Smagorinsky (SMAG), o segundo é o dinâmico (DSMAG), que resulta no ajuste do modelo no espaço e no tempo, e o terceiro é o modelo de viscosidade de turbulenta que se adapta a paredes (WALE).

2.1. Objetivos Específicos

Os pontos a seguir guiam o desenvolvimento desta dissertação:

- Introduzir os métodos de simulações de grandes escalas disponíveis na literatura no código computacional;
- Verificar o desempenho dos modelos via análise *a priori* com resultados de DNS;
- Escolher o método mais adequado para investigação em outras configurações;
- A partir do mesmo, reproduzir numericamente experimentos com resultados disponíveis na literatura;
- Executar simulações de correntes gravitacionais com valores de número de Reynolds próximos aos de escalas naturais.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, primeiramente, introduz-se o conceito de corrente de densidade, em seguida, as classificações de acordo com a forma como sua massa específica se relaciona com o fluido, e por fim a anatomia da corrente.

3.1. Correntes de densidade

Correntes de densidade, ou correntes de gravidade, são fluxos que ocorrem devido à diferença de massa específica (relativamente pequena), normalmente associadas a variações de temperatura, aos materiais (e.g., concentração salina ou óleo sobre água) ou pela presença de partículas em suspensão. Correntes salinas ou térmicas são conservativas pois conservam sua composição, enquanto que correntes com partículas em suspensão são não-conservativas pois perdem massa por processos deposicionais. Alguns exemplos são: o escoamento do ar frio junto ao chão, sob o ar quente (com menor massa específica), que se desenvolve ao abrirmos a porta de uma casa aquecida. O escoamento de vidro fundido em um molde, a fumaça ejetada pelo escapamento de automóveis e no alto de chaminés (UNGARISH, 2009).

Kármán (1940) foi pioneiro no estudo quantitativo de uma corrente de densidade motivado pela demanda militar em avaliar sobre quais circunstâncias de vento um gás liberado iria se propagar atingindo o inimigo sem atingir quem o liberou.

3.1.1. Classificação quanto ao excesso de densidade

Em estudos sobre a formação do delta do Missisipi, Bates (1953) percebeu que correntes gravitacionais apresentam diferentes regimes em função do excesso de densidade. A Figura 3.1. apresenta a classificação proposta por Bates (1953 apud MULDER; ALEXANDER, 2001): se o fluido da corrente é mais denso que o fluido ambiente ($\rho_c > \rho_a$), a corrente é denominada hiperpicnal. Esta corrente mais densa é caracterizada por escoar sob o fluido ambiente e junto ao fundo. Quando o fluido ambiente é mais denso que o fluido da corrente ($\rho_c < \rho_a$), a mesma é denominada hipopicnal, e apresenta um espalhamento sobre o fluido ambiente. As correntes mesopicnais se colocam entre as correntes hipopicnais e hiperpicnais. Este caso

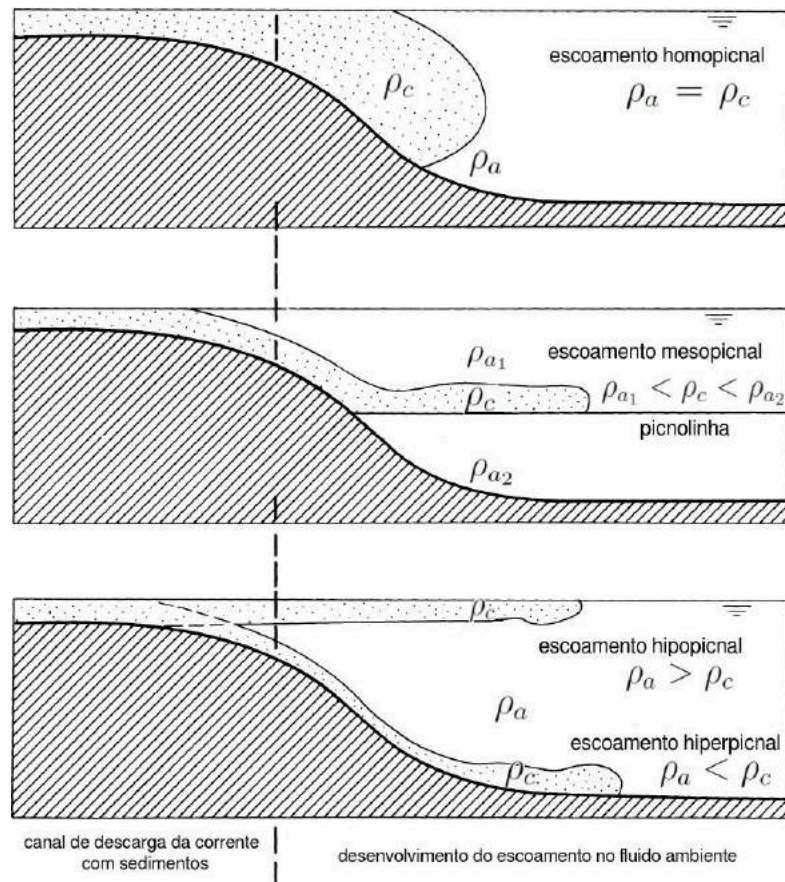


Figura 3.1. Classificação de fluxos quanto à relação de sua densidade com a do fluido ambiente. Fonte: Manica (2009), adaptado de Mulder e Alexander (2001).

acontece quando existe estratificação no fluido ambiente ($\rho_{a,1} > \rho_c > \rho_{a,2}$). Também pode-se citar o caso homopícnal, caracterizado por não possuir excesso de massa específica entre os fluidos ($\Delta\rho = 0$). É comum observar na natureza a transição entre esses diferentes casos, Parsons et al. (2001) destacam o exemplo do fenômeno de plumas que ocorre quando um rio descarrega no mar, formando inicialmente um escoamento hipopícnal que permanece na superfície até que mergulha e se transforma em uma corrente hiperpícnal ou mesopícnal. Em uma investigação de 150 rios de todo o mundo, Mulder e Syvitski (1995) estimam que 66% dos mesmos podem produzir plumas que mergulham e formam correntes hiperpícnais em períodos de 1 a 100 anos. Isto reforça a importância deste mecanismo de transferência de sedimentos para o ambiente marinho em escala geológica. Recentemente, Steel et al. (2017) demonstram o fenômeno de *lofting* (ou de empuxo reverso) que ocorre quando uma corrente apresenta a redução de densidade por deposição ou entranhamento de fluido ambiente e muda de regime.

3.2. Fluxos de turbidez

Fluxos de turbidez são um tipo de corrente de gravidade em que a diferença de densidade é gerada pela presença de partículas em suspensão. Segundo Mulder e Alexander (2001), o conceito "corrente de turbidez" remete a um fluxo turvo, ou seja, com sedimentos em suspensão. Já pela definição de Hampton et al. (1973), os mesmos são fluxos gravitacionais sedimentares, em que os sedimentos são mantidos em suspensão pela componente vertical da turbulência. De um ponto de vista hidrodinâmico, são análogas aos fluxos piroclásticos (Branney e Kokelaar (2002, p. 4) para exemplos) e avalanches de neve (MEIBURG et al., 2012). Estes fenômenos são volumetricamente o mecanismo mais importante no transporte de sedimentos para o fundo do oceano, muitas vezes atingindo distâncias extremamente grandes mesmo sob pequenos gradientes de inclinação, sendo responsáveis pela formação das maiores acumulações de sedimentos da Terra (os leques submarinos) (KNELLER et al., 2016; MEIBURG; KNELLER, 2010). Estas correntes são imprevisíveis em ambiente marinho e geralmente destroem ou deslocam cabos e equipamentos de monitoramento submarino.

Para ilustrar, em 1929 um terremoto na região de Grand Banks, próximo a província Newfoundland no Canada, originou uma corrente de turbidez que resultou no rompimento de diversos cabos submarinos (PIPER et al., 1999). A velocidade máxima da frente da corrente, estimada indiretamente pela medição dos tempos entre a quebra dos cabos, foi de aproximadamente 19 m s^{-1} , enquanto que a espessura da corrente variou de 300-400 m . Estes valores indicam um $Re \sim O(10^9 - 10^{10})$. De maneira similar, no conjunto submarino do Congo, correntes foram inferidas pela quebra de cabos (HEEZEN et al., 1964). Khripounoff et al. (2003) registram intensa atividade destes escoamentos em profundidades de 4000 m no mesmo sistema. Andrieux et al. (2013) obtêm medições diretas de correntes com duração de até 6 dias, espessuras de até 150 m e velocidades de 0.7 a 2.5 m s^{-1} . Paull et al. (2002), Xu et al. (2004) apresentam medições diretas de perfis de velocidade ao longo do cânion de Monterey, California. Foram identificadas correntes geradas por tempestades, sem presença de terremotos, com velocidades médias aproximadas de 0.5 a 2 m s^{-1} . Talling et al. (2007) mostram indícios de depósitos na bacia de Agadir oriundos de eventos individuais a mais de 1,500 km da costa da Africa.

Devido à relativa escassez de observação diretas das correntes de turbidez na natureza, a compreensão dos processos de fluxo relevantes é, portanto, baseada em grande parte em experimentos de laboratório e simulações numéricas. Meiburg e Kneller (2010) classificam correntes de turbidez como escoamentos não-conservativos, pois trocam partículas com o leito tanto por deposição quanto por erosão e re-suspensão

de partículas, podendo trocar fluido com o ambiente por mecanismos de arraste ou entranhamento. Embora eventos naturais apresentem uma vasta gama de partículas em suspensão, com diferentes diâmetros, formatos e materiais, uma abordagem comum para as simulações numéricas é assumir que os sedimentos sejam sólidos homogêneos, com formato ideal e diâmetro característico constante.

3.2.1. Classificação quanto ao mecanismo de iniciação

O início de uma corrente de densidade é facilmente compreendido se relacionado com algum acontecimento natural, sendo utilizado o ambiente marinho como exemplo. Neste contexto, os eventos mais apontados como iniciadores de correntes de densidade são os deslizamentos de terra e as descargas de rios (MEIBURG; KNELLER, 2010). Estes fenômenos são caracterizados por causar excesso de densidade, de um fluido em relação ao outro, pela presença de partículas sólidas e material orgânico em suspensão. As características destes eventos dividem os mecanismos de início de uma corrente de densidade em dois grandes grupos: remobilização instantânea de material e remobilização não-instantânea de material (MULDER; ALEXANDER, 2001). Nos últimos anos, grande parte dos estudos em correntes de turbidez foram direcionados ao mecanismo de remobilização instantânea de material e não deram a devida atenção ao mecanismo de remobilização não-instantânea de material (HOGG et al., 2016).

A Figura 3.2. apresenta de forma esquemática e por meio de sinais temporais de velocidade na direção principal do escoamento, os dois mecanismos de iniciação propostos por Mulder e Alexander (2001). A remobilização instantânea de material (Figura 3.2.a), referida na literatura como *surge-like flow*, caracterizada por um pulso, está associada ao escorregamento ou rompimento submarino de uma quantidade finita de material que entra em movimento e forma uma corrente que rapidamente acelera e, assim que se iniciem os processos de dissipação e sedimentação, sofre uma gradativa desaceleração. Este mecanismo é responsável pela formação de eventos isolados e de curta duração. Em laboratório, este tipo de fenômeno é simulado na configuração conhecida como *lock-exchange* (caso da Figura 1.1.). Meiburg e Kneller (2010) comentam que a suspensão de sedimentos pode ser ocasionada por deslizamento de encosta, terremotos, tempestades, atividades vulcânicas ou movimentos tectônicos. Já a remobilização não-instantânea de material, também conhecida por *quasi-steady flow*, é caracterizada por escoamentos alimentados de forma contínua por um período prolongado de tempo (Figura 3.2.b). Estes escoamentos estão associados, por exemplo, às cheias de rios, que transportam grandes quantidades de material para o ambiente marinho durante um tempo que pode ser de horas ou até anos, permitindo que a corrente alcance velocidades constantes mesmo após o início do processo de

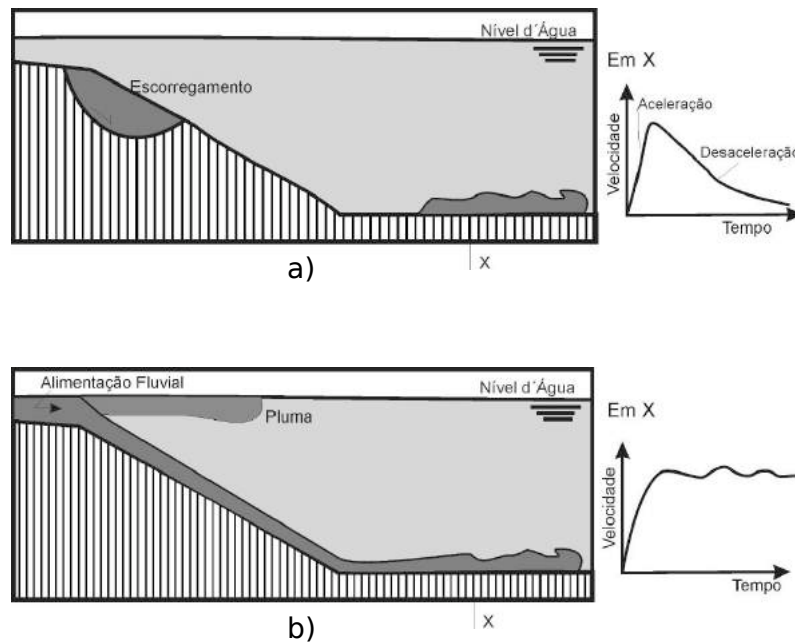


Figura 3.2. Formas de início de uma corrente de gravidade: (a) remobilização instantânea ou liberação de volume finito (exemplo de um desmoronamento) e (b) fluxo contínuo (exemplo de descarga de um rio no mar). Fonte: Manica (2009).

sedimentação devido à alimentação contínua. A Figura 3.3. apresenta fotografias da evolução de uma corrente salina obtida em laboratório por remobilização instantânea de material.

3.2.2. Hidrodinâmica da corrente

Middleton (1967) propõe uma divisão geral para correntes de densidade em três seções: cabeça, corpo e cauda. A cabeça é uma região de intensa mistura que apresenta um comportamento quase-estacionário em fluxos horizontais, tendo sua forma fortemente influenciada pela altura da coluna da água (SIMPSON, 1999). O corpo da corrente é uma região localizada atrás da cabeça e é caracterizada por duas sub-regiões de velocidade: a interna e a externa. A interna apresenta características de um escoamento parietal com gradientes de velocidade positivos, similares a uma camada limite turbulenta. Já a região externa apresenta características de uma camada de cisalhamento, geralmente de 5 a 10 vezes mais espessa que a região interna, com gradientes negativos e tensões de cisalhamento de sinal oposto (MEIBURG; KNELLER, 2010). A cauda de uma corrente é uma região de intensa turbulência e dissipação. A Figura 3.4. apresenta um esquema da geometria de correntes hiperpicnais. Correntes com comportamento de pulso, não geram corpo, enquanto que correntes contínuas não geram cauda.

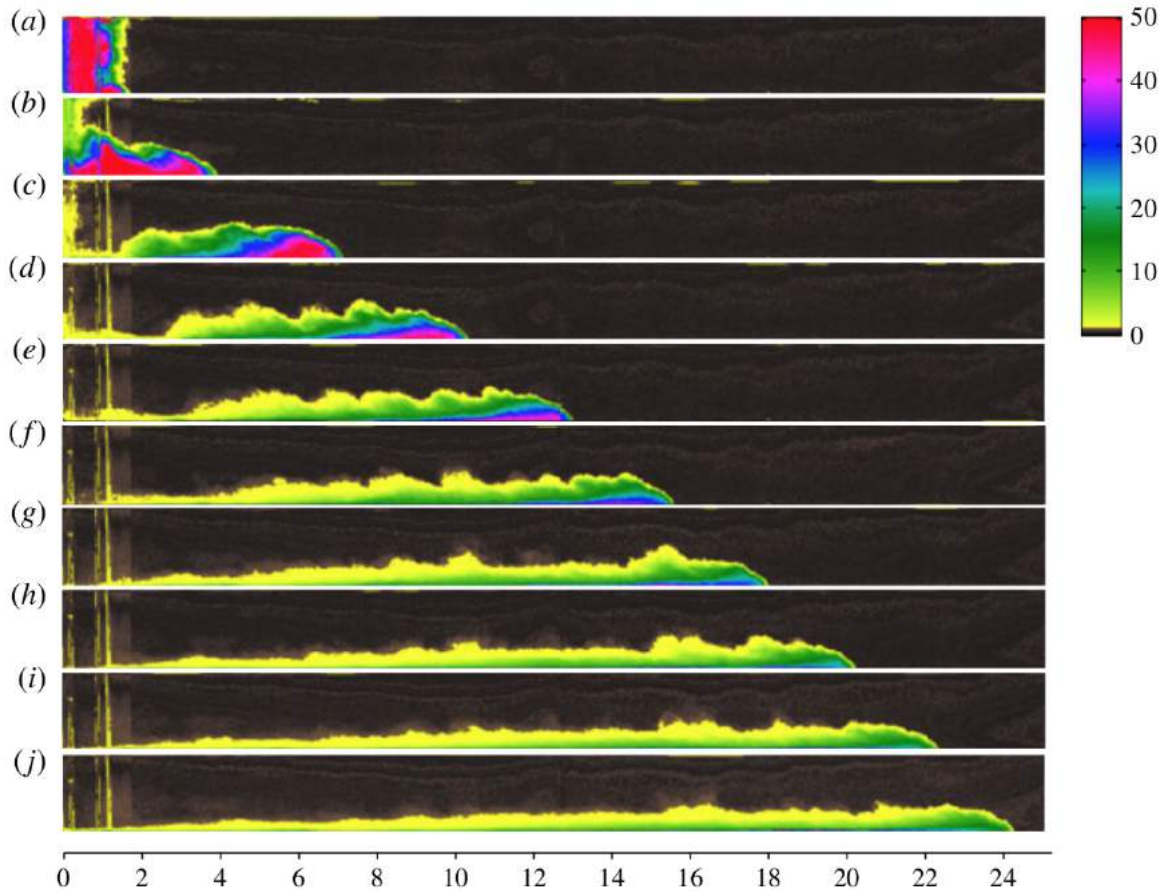


Figura 3.3. Fotografias de uma corrente de densidade salina demonstrando a evolução da salinidade por meio de contornos coloridos por tratamento de imagem. Canal em dimensões adimensionais e escala em gramas de sal por litro de fluido. Fonte: Sher e Woods (2015).

Kneller e Buckee (2000) apresentam uma descrição bidimensional simples de correntes de densidade composta por um perfil de velocidade longitudinal e um perfil de concentração de sedimentos (ver Fig. 3.5.). Esse modelo divide o fluxo em uma região inferior, mais densa e com espessura constante, e em uma região superior, zona mais diluída devido ao entranhamento do fluido ambiente. Essa aproximação pode ser diretamente comparada com a forma de jatos parietais. Porém como há presença de gravidade, pode-se tratar de jatos parietais estratificados (ação gravitacional influencia sobre o campo de velocidades). De acordo com Manica (2009), a altura onde ocorre a velocidade máxima do perfil de velocidade é controlada pela razão de forças de arraste nas interfaces superior e inferior, e, em muitos casos experimentais, ocorrem entre 20 e 30% da altura média da corrente.

Simpson (1999) apresenta estudos laboratoriais de correntes de densidade por variações de temperatura com o incremento gradual da diferença e observa que a forma

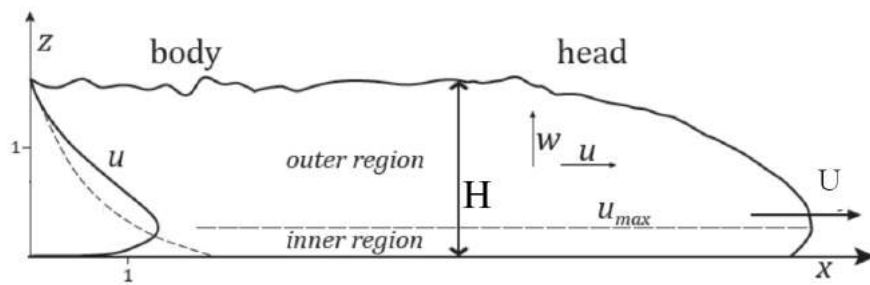


Figura 3.4. Esquema de corrente de turbidez demonstrando em duas seções: corpo (*body*) e cabeça (*head*). Fonte: Meiburg e Kneller (2010).

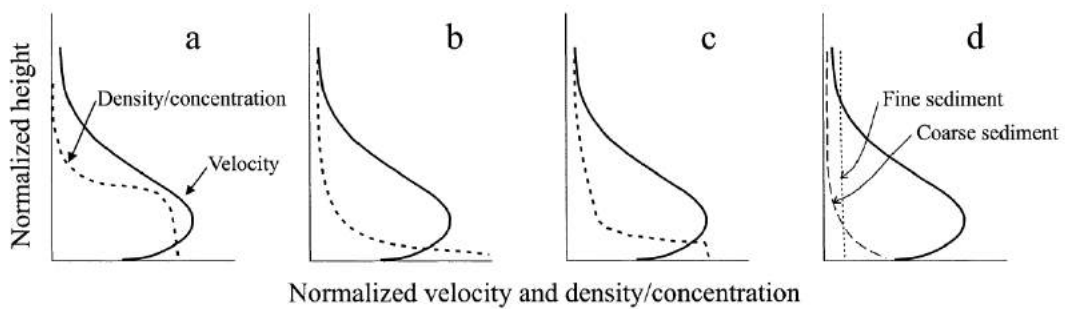


Figura 3.5. Perfis de velocidade e concentração normalizados para correntes de densidade. Fonte: Kneller e Buckee (2000).

da cabeça é independente do gradiente térmico a partir de um valor suficientemente alto. O autor também percebe a formação de uma região de mistura turbulenta na parte superior da corrente atrás da cabeça. Baseado nestes experimentos espera-se que a partir de um certo Re crítica não ocorram variações significativas na forma e nas características gerais da cabeça da corrente.

Simpson (1999) relata também a respeito dos principais mecanismos de mistura observados em correntes de densidade. O primeiro, exibido na Fig. 3.6.a, é conhecido como vórtices de Kelvin-Helmholtz (KH) e ocorre em interfaces cisalhantes. Este fenômeno apresenta, inicialmente, comportamento bidimensional (2D). O segundo, exibido na Fig. 3.6.b, são estruturas tridimensionais (3D) conhecidas como lobos e fendas, do inglês *lobe-and-cleft*, formadas devido à presença de paredes e pela intrusão de fluido com menor densidade na cabeça da corrente.

McElwaine et al. (2004) apresentam estudos experimentais sobre a formação de lobos e fendas em que fotografa correntes, em um canal de laboratório com fundo de vidro, e segue as fendas enquanto se separam e se unem. Os mesmos propõem que as estruturas de lobos e fendas são uma característica genérica, cinemática de sistemas com frentes em evolução e que não são relacionadas com a dinâmica da

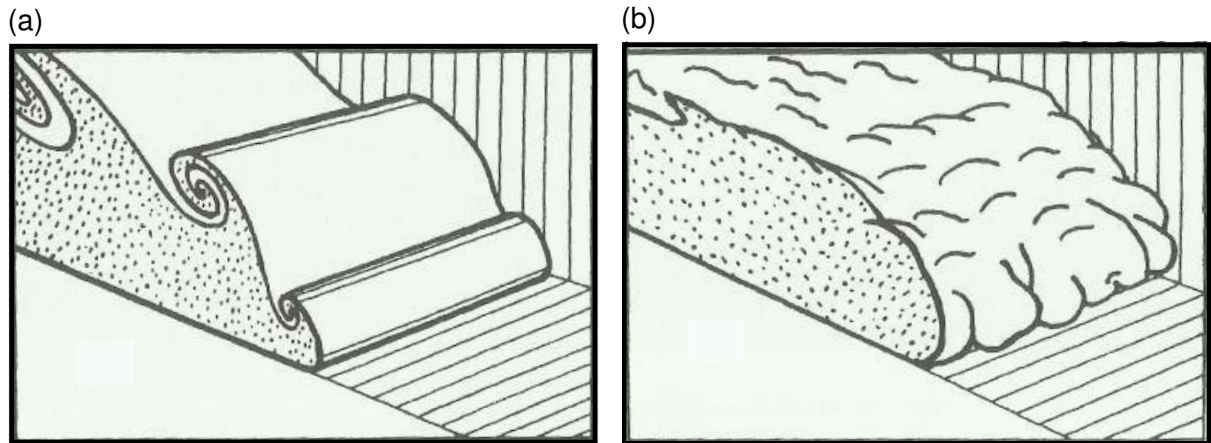


Figura 3.6. Estruturas presentes na região frontal de uma corrente de gravidade: (a) vórtices de Kelvin-Helmholtz e (b) estruturas de lobos-e-fendas. Fonte: Simpson (1999).

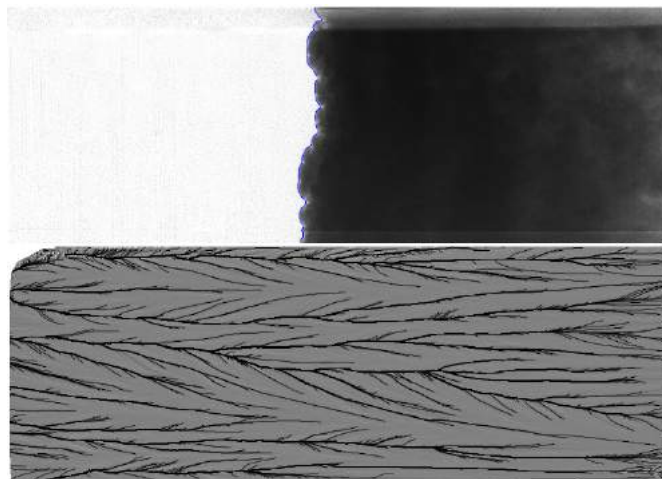


Figura 3.7. Vista de fundo de uma corrente de densidade se propagando sobre um canal horizontal com fundo rígido: visualização instantânea da corrente (superior) e o mapeamento da evolução das fendas (inferior). Fonte: McElwaine et al. (2004).

corrente. Ou seja, qualquer sistema com uma estrutura de frente se propagando com velocidade aproximadamente constante irá desenvolver lobos e fendas. Os chamados de lobos são as projeções entre as fendas. Na Figura 3.7. podemos ver que com a evolução da corrente as fendas se formam, se mesclam e nunca desaparecem. Simpson (1999) sugere que a formação dos mesmos esteja associada ao excesso de fluido menos denso na cabeça da corrente, que por sua vez penetra através do corpo da corrente originando a formação das fendas.

3.3. Turbulência

Tsinober (2009) apresenta uma definição para o conceito de turbulência:

"A turbulência é a manifestação do comportamento espaço-temporal caótico no escoamento de fluidos a elevados números de Reynolds,, i.e., de um sistema dissipativo fortemente não linear com um número significativo de graus de liberdade (muito provavelmente) descrito pelas equações de Navier-Stokes (NS)."¹

Como pode-se entender pela definição, a turbulência não é uma propriedade do fluido, mas do escoamento. Tennekes e Lumley (1972 apud TSINOBER, 2009, p. 19–23) propõem uma lista das principais características:

1. Irregularidade: a turbulência é definitivamente caótica. O contrario não é necessariamente verdade: escoamentos caóticos podem não ser turbulentos. Fluxos turbulentos apresentam uma natureza espaço-temporal aleatória/estocástica intrínseca, Já que não há necessidade de uma força externa (ou interna) no escoamento (ou nos seus limites), nem é necessário iniciar o fluxo turbulento com alguma condição inicial aleatória desde que o Re seja suficientemente grande.
2. Natureza multi-escala: fluxos turbulentos são, normalmente, sistemas grandes com ampla gama de graus de liberdade que interagem fortemente. Em fluxos atmosféricos, por exemplo, as escalas que se manifestam variam de $O(km) \rightarrow O(mm)$. Devido à extrema complexidade do fenômeno (aliado a sua aleatoriedade intrínseca), é natural que sua descrição seja estatística. A interação entre os diversos graus de liberdade, resultante da não-linearidade, é essencial (sistemas lineares, por exemplo, podem ter muitos graus de liberdade que não interagem e não se influenciam) mas não suficiente: a interação não-linear pode produzir comportamentos regulares organizados conhecidos como estruturas coerentes (comentadas no Capítulo 6).
3. Imprevisibilidade: dois fluxos turbulentos inicialmente (mas não precisamente) idênticos tornam-se irreconhecivelmente diferentes em um tempo de interesse. Os detalhes de qualquer realização são fortemente diferentes de qualquer outra realização. A perda de previsibilidade ocorre porque qualquer realização individual é extremamente sensível a pequenas perturbações. No entanto, diferentes realizações do mesmo fluxo turbulento têm as mesmas propriedades estatísticas.

¹O conjunto de equações formado pela equação da continuidade e pela equação da conservação da quantidade de movimento é conhecido desde Navier (1827) e Stokes (1845).

Propriedades estatísticas dos escoamentos turbulentos são insensíveis aos distúrbios (i.e., estatisticamente estáveis). Essa insensibilidade aos distúrbios se traduz somente de forma estatística. O problema da previsibilidade da meteorologia devido à forte dependência das condições iniciais está associado à dinâmica e às estatísticas de um erro inicial, medida das diferenças entre realizações de um escoamento com condições iniciais semelhantes.

4. Natureza dissipativa: fluxos turbulentos são sempre dissipativos, tensões de cisalhamento aumentam a energia interna do fluido ao custo da energia cinética. Dessa forma, se não houver uma alimentação contínua de energia cinética para compensar as perdas viscosas, a turbulência se dissipa. Este fornecimento de energia se dá por meio de grandes escalas (que apresentam pequena dissipação). Os processos em fluxos turbulentos são irreversíveis, i.e., unidirecionais no tempo.
5. Tridimensionalidade: fluxos turbulentos são tridimensionais² e rotacionais, i.e., transportam vorticidade³ não-nula. Os mesmos possuem campos de vorticidade, com produção contínua e positiva de entropia, associados à energia cinética disponível aos efeitos de dissipação.

As características qualitativas da turbulência são conhecidas e onipresentes em todos os escoamentos turbulentos (i.e., são universais). Além dessas características qualitativas gerais, buscaram-se formas quantitativas para a descrição dos mesmos. Desde os trabalhos de Kolmogorov, acredita-se que a turbulência em pequena escala possua propriedades universais independentes das grandes escalas. Tsinober (2009), recentemente, comenta que há evidências de que o mesmo não esteja correto. Estas propriedades, discutidas a seguir, estão associadas a mecanismos não-lineares e, em geral, são quantitativamente não-universais, embora, como mencionado, sejam qualitativamente universais.

3.3.1. Descrição estatística

Devido à complexidade dos escoamentos turbulentos e ao caráter aleatório das flutuações de velocidade, uma descrição determinística é muito limitada, e uma abordagem estatística das flutuações é natural e usual para descrever e quantificar a

²Não há consenso se fluxos bidimensionais com comportamento caótico devem ser qualificados como turbulentos, já que os mesmos não possuem o mecanismo de deformação de vorticidade (ou *vortex stretching*).

³A vorticidade é uma grandeza vetorial obtida a partir do rotacional do campo de velocidades, na forma $\omega = \nabla \times u$, e pode ser decomposta em duas componentes: a componente simétrica do tensor taxa de deformação $S_{ij} = \frac{1}{2}(\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i)$, e na componente anti-simétrica do tensor taxa de rotação $\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(\partial u_i/\partial x_j - \partial u_j/\partial x_i)$.

turbulência nos escoamentos. Consideramos $\langle \phi \rangle$ como a representação de uma média estocástica ou média no conjunto (*ensemble average*) de uma variável randômica ϕ obtida por N realizações independentes do mesmo fenômeno ϕ_l :

$$\langle \phi \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \phi_l. \quad (3.1)$$

As flutuações turbulentas ϕ'_l associadas à realização ϕ_l são definidas como

$$\phi'_l = \phi_l - \langle \phi \rangle, \quad \text{com} \quad \langle \phi'_l \rangle \equiv 0. \quad (3.2)$$

Quando ϕ é uma função aleatória estacionária no tempo, podemos aplicar o princípio de ergodicidade de acordo com o qual é equivalente, em um contexto estatístico, a considerar repetidos experimentos indefinidamente por meio de uma única realização ou um único experimento com um número infinito de realizações. Admite-se, portanto, que um único experimento ϕ de duração suficientemente longa ($T \rightarrow \infty$) pode representar todos os cenários possíveis ($N \rightarrow \infty$). Define-se uma média no tempo

$$\langle \phi \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \phi(t) dt. \quad (3.3)$$

Pode-se recorrer ao princípio da *decomposição de Reynolds*, em que o valor da velocidade instantânea u_i pode ser dividido em um valor médio no tempo $\langle u_i \rangle$ e um valor de flutuação u'_i , na forma

$$u_i = \langle u_i \rangle + u'_i. \quad (3.4)$$

Se o mesmo for aplicado sobre as equações de NS há o aparecimento das equações de escoamento médio conhecidas como *equações de Reynolds* e junto com elas o termo não-linear

$$\langle u_i u_j \rangle = \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle + \langle u'_i u'_j \rangle, \quad (3.5)$$

que possui um termo desconhecido $\langle u'_i u'_j \rangle$, chamado de *tensor de tensões de Reynolds* ou termo de fechamento.

3.3.2. Dinâmica de escalas

Richardson (1922) introduziu o conceito da cascata de energia em que a energia cinética é adicionada ao escoamento (por meio do mecanismo de produção) nas maiores escalas de movimento. A energia adicionada é transferida (por meio de processos não-lineares e sem interferência da viscosidade) para escalas menores até a

completa dissipação da mesma em forma de calor. No conjunto de trabalhos conhecido como K41 (KOLMOGOROV, 1941a; KOLMOGOROV, 1941b; KOLMOGOROV, 1941c), Kolmogorov adicionou e quantificou a ideia de Richardson. Em particular, com relação às menores escalas propondo que as mesmas são universais (similares em todos os escoamentos turbulentos) e dependem somente da viscosidade cinemática do fluido $\hat{\nu}$ e da taxa média de dissipação da energia cinética de turbulência por unidade de massa $\hat{\epsilon}$, o autor desenvolve por análise dimensional microescalas de Kolmogorov. As hipóteses de K41 levam em consideração campos médios, assumindo como base a taxa média de dissipação de energia e isotropia (uniformidade espacial: caso ideal em que as escalas são independentes das direções espaciais). Kolmogorov (1941a) propõe que a dissipação média da energia cinética da turbulência, pode ser obtida na forma dimensional

$$\hat{\epsilon} = 2\hat{\nu}\hat{S}_{ij}\hat{S}_{ij}, \quad (3.6)$$

considerando turbulência homogênea e isotrópica⁴, escoamento incompressível e $Re \rightarrow \infty$. Aqui a taxa de dissipação deve ser obtida em função das flutuações e não pode ser instantânea e precisa necessariamente ser uma média adequada (em um período de tempo ou em uma direção homogênea). Consideramos campos médios, uma vez que representam os valores típicos das menores escalas em um dado fluxo. A *escala de comprimento de Kolmogorov* é estimada na forma

$$\eta_K = (\hat{\nu}^3/\hat{\epsilon})^{1/4}. \quad (3.7)$$

Lembrando que na escala de Kolmogorov a turbulência já foi extinta, neste ponto o Re equivale a unidade, ou seja, as forças inerciais são da mesma ordem de grandeza que as forças viscosas.

3.4. Simulação numérica

DNS consiste no método computacional mais exato para resolver as equações de NS. No mesmo, busca-se calcular até as menores escalas de movimento, a partir de condições iniciais e de contorno apropriadas para o escoamento considerado (POPE, 2000). Em DNS, todas as escalas de movimento, desde a escala integral (limitada pelas condições de contorno) até η_K (determinada pela viscosidade), são explicitamente resolvidas. Por tal motivo, o espaçamento da malha de cálculo precisa ser próxima a menor escala do escoamento $\Delta x_i \sim O(\eta_K)$, e o passo de tempo precisa ser da mesma ordem que a escala de tempo dos menores vórtices (detalhes sobre o método em Moin e Mahesh (1998)).

⁴No caso de turbulência homogênea e isotrópica não há escoamento médio, somente flutuações de velocidade, portanto $\hat{S}_{ij} \equiv \hat{s}_{ij} = \frac{1}{2}(\partial \hat{u}'_i/\partial x_j + \partial \hat{u}'_j/\partial x_i)$. Este é um caso dificilmente encontrando na natureza e em situações de engenharia.

Pope (2000) examina a distribuição do custo computacional das escalas resultantes de uma DNS de THI. Para determinar como a energia cinética turbulenta, do inglês *turbulent kinetic energy* (TKE), se distribui entre as escalas de diferentes tamanhos, é usual considerar a função do espectro de energia tridimensional $E(k)$ ⁵. No espaço espectral tridimensional de número de onda, os modos representados estão dentro do cubo de aresta $2k_{max}$. Em uma simulação bem-resolvida (diga-se $k_{max}\eta = 1,5$), somente os modos dentro da esfera de raio k_{max} apresentam significado físico. Como pode ser visto na Figura 3.8., a escalas energéticas e da região inercial correspondem à casca da pequena esfera com número de onda $|k|$ entre k_E e k_{DI} , enquanto que a região dissipativa correspondem à grande esfera entre k_{DI} e k_{max} ⁶. Somente 0,016% dos modos representados estão dentro da esfera de raio k_{DI} , correspondendo as escalas de energia da região inercial do espectro e 99,98% dos modos estão na região de escalas dissipativas. O custo das simulações, conforme supra demonstrado, se traduz em tempo de computação em horas-máquina e volume de dados em memória para resolver todas as escalas dissipativas. Estes aumentam rapidamente e escalam com Re^3 (BIEGERT et al., 2017), o que limita as simulações a valores moderados do mesmo. DNS é o método mais simples de um ponto de vista conceitual e, quando podendo ser aplicado, provém uma riqueza de dados com alta resolução espacial e temporal.

Härtel et al. (2000a), Härtel et al. (2000b) apresentam a primeira simulação DNS de correntes gravitacionais em configuração *lock-exchange* para $Re = 1225$ (reproduzida na Figura 3.9.). O estudo demonstrou, por exemplo, que o ponto de velocidade nula da corrente esta localizado atrás do nariz da corrente e explorou o complexo processo de formação das estruturas de lobos-e-fendas. Necker et al. (2002) estendem o estudo a $Re = 2240$. Cantero et al. (2008) obtêm $Re = 15000$ na mesma configuração, correspondendo a correntes com escala de altura de $0,5m$ e velocidade de avanço da frente de $3cm/s$. Espath et al. (2014) apresentam simulações com condição de não deslizamento no fundo e comparam seus resultados com experimentos de Rooij e

⁵Em THI, o espectro de energia cinética turbulenta (i.e., $\frac{1}{2}\langle u'_i u'_j \rangle$) representa a distribuição da energia associada as escalas do escoamento em função do número de onda. O mesmo é obtido no espaço de Fourier por meio da soma da integral das cascas da esfera, centrada na origem, de raio k (Sagaut (2006, p. 286–287) ou Pope (2000, p. 188–189) para demonstração).

⁶Sagaut (2006) explica que três regiões características podem ser verificadas no comportamento da função espectro de energia $E(k)$: A região de grande escalas (1), onde a turbulência é produzida. Essas escalas são acopladas ao campo médio e são afetadas pelas condições de contorno, portanto não possuem caráter universal. Contudo, seguindo os argumentos referentes ao caráter finito da densidade espectral de energia (i.e., $A(k) = E(k)/4\pi k^2$), podemos dizer que $E(k) \simeq k^4 - k^2$ para $k \ll 1$. A região inercial (2), associada às escalas intermediárias, na qual a energia é transferida por interação não-lineares, sem ação de viscosidade ou produção. O espectro de energia depende apenas de k e ϵ . Como a energia é transferida sem perda, ϵ permanece constante. Supondo que existe uma forma auto-similar do espectro, por argumentos dimensionais obtêm-se $E(k) \sim \epsilon^{2/3} k^{-5/3}$. Na região dissipativa (3), as menores escalas são responsáveis pela dissipação de energia cinética pela viscosidade e apresentam um decrescimento até η_K .

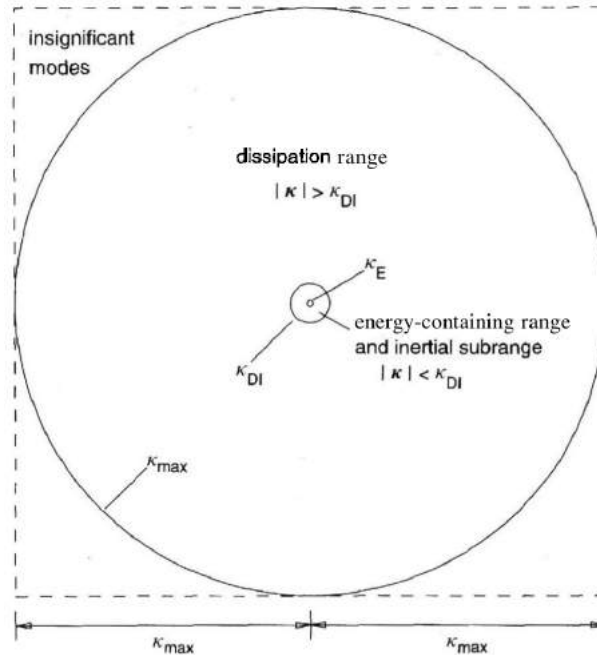


Figura 3.8. Solução de uma DNS de THI em espaço de espectral em função do número de onda. Os modos com significado físico estão dentro do cubo de aresta $2k_{max}$ delimitado pela linha tracejada. Três esferas são identificadas: a de raio k_{max} (máximo número de onda resolvido nas três direções), a de radio k_{DI} correspondendo as escalas de energia da região inercial do espectro e k_E , raio correspondendo ao pico de energia associado a escala integral. Fonte: Pope (2000, p. 351).

Dalziel (2001) e com simulações de Necker et al. (2002). Mesmo estando limitada a escalas de laboratório, DNS provém informações detalhadas da estrutura e estatísticas dos escoamentos, sendo uma ferramenta excelente de pesquisa.

Neste contexto, LES entra como alternativa para redução do custo computacional e a viabilização de cálculos em grandes domínios, por exemplo, ou a investigação dos efeitos induzidos pelo número de Reynolds de valores encontrados em laboratórios ($5000 < Re < 50000$) a valores $O(10^6)$ que são comparáveis aos observados na natureza. Neste tipo de cálculo, efetuados em resoluções muito inferiores à DNS, as pequenas escalas são removidas com o uso de filtros numéricos e seus efeitos introduzidos por meio de modelos. A Figura (3.10.) apresenta um espectro de energia cinética em escalas log-log com a indicação da área de atuação da DNS e LES. Em LES as grandes escalas (ou as escalas mais energéticas) do escoamento são resolvidas enquanto que as pequenas escalas que apresentam um comportamento universal são, geralmente, modeladas por meio de um tensor de submalha que precisa ser incluído para garantir o fechamento do sistema de equações governantes. Isto não só garante uma redução do número de graus de liberdade necessários para a simulação, mas evitam o acúmulo de energia nas pequenas escalas.

No contexto de correntes gravitacionais, Ooi et al. (2007) introduzem LES-2D.

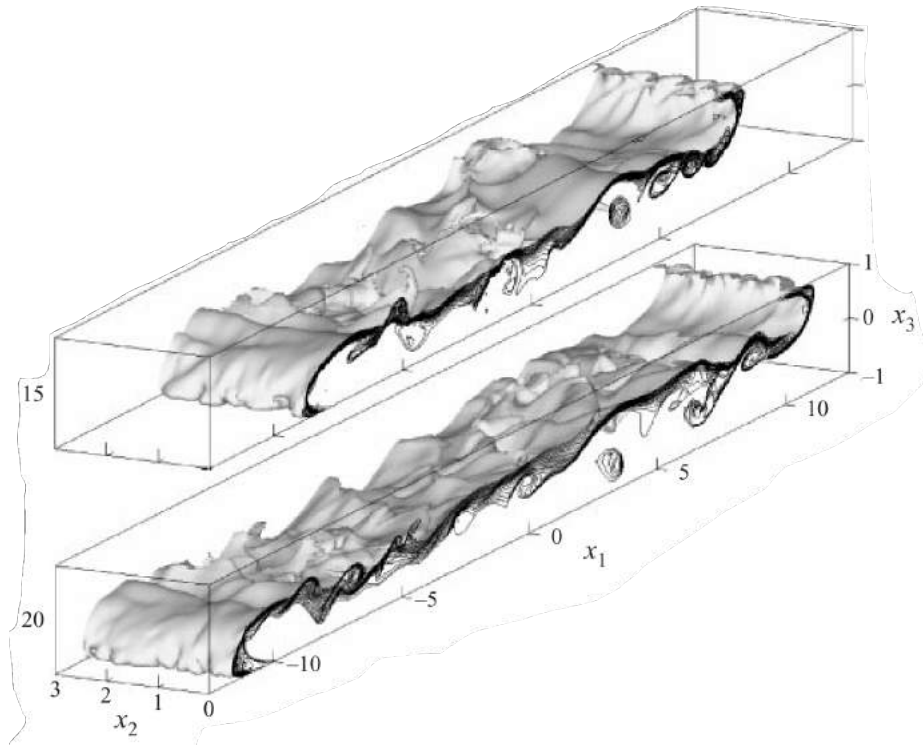


Figura 3.9. Isolinas de concentração para tempos diferentes obtidas por DNS em configuração *lock-exchange*. Fonte: Härtel et al. (2000b).

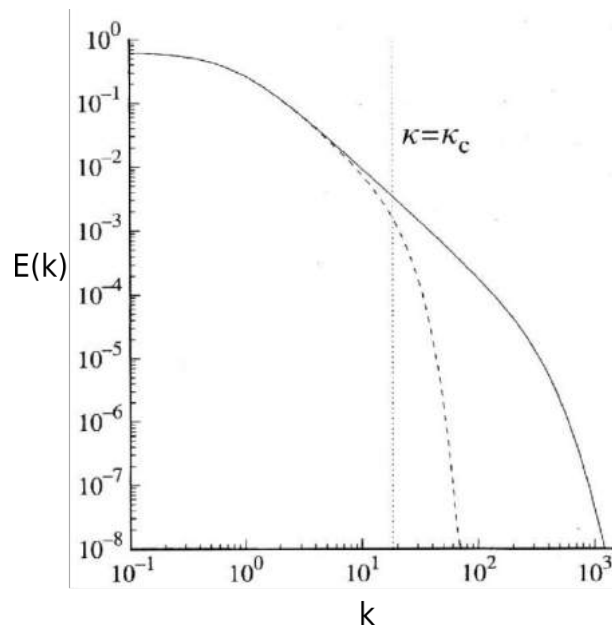


Figura 3.10. Ilustração do espectro de energia resultantes de DNS e LES. Energia das escalas em função do número de onda k . k_c representa o número de onda de corte introduzido pela malha de cálculo em LES. Fonte: Pope (2000, p. 609).

Ooi et al. (2009) investigam via LES-3D correntes salinas em *lock-exchange* sobre um fundo rígido e plano. Eles investigaram o efeito do Re na estrutura do escoamento junto

ao fundo e das distribuições de velocidade de fricção. E concluíram que o arrasto do sedimento aumenta, aumentando o Re da corrente. Constantinescu (2014) apresenta simulações de grandes escalas a números de Reynolds de até 126.000. Os resultados demonstram que a metodologia LES explícito com modelos de submalha consegue captar às estruturas globais da corrente e que a influência do número de Schmidt é mínima sobre a velocidade de avanço da corrente.

Segundo Rafei et al. (2017), a simulação de grandes escalas implícita, do inglês *implicit large-eddy simulation* (ILES), é uma forma não convencional de simulação de grandes escalas introduzida por Boris et al. (1992). A ideia não requer o emprego de modelo submalha: o efeito dissipativo das pequenas escalas é incorporado de maneira intrínseca no comportamento dos esquemas numéricos utilizados na simulação. Esta forma de LES é caracterizada por uma dissipação numérica inerente que desempenha o papel de um modelo de escala submalha que está implícito e, neste caso, não emula (ou modela), mas dissipa as pequenas escalas de movimento do escoamento. Rafei et al. (2017) também comentam que ILES ainda não recebeu uma aceitação universal na comunidade acadêmica devido à falta de fundamentação teórica que de suporte a esta metodologia e, que apesar disto, diversos grupos de pesquisa têm utilizado ILES, comparando seus resultados com casos de escoamentos bem conhecidos o que tem aumentando a credibilidade do método. Além disso, o fato de que nenhum modelo SGS é usado evita erros de modelagem que afetem a exatidão da solução numérica, em contraste com a abordagem explícita de LES, onde os erros de modelagem, diferenciação e *aliasing* podem ter impactos na solução numérica.

Na abordagem convencional de ILES, a dissipação sintética é adicionada por meio da discretização do termo convectivo (procedimento chamado de *upwinding*). Em uma abordagem mais recente, Lamballais et al. (2011) propõe a realização de ILES por meio de uma dissipação numérica controlada incluída nos esquemas de derivação de segunda ordem utilizados na discretização dos termos viscosos por meio da modificação dos coeficientes. Esta abordagem se mostrou muito precisa em comparação com resultados DNS (como pode ser visto em Dairay et al. (2015) e Dairay et al. (2017)) o que indica a eficiência da abordagem ILES, que é totalmente independente da modelagem de pequenas escalas.

3.5. Aproximação de Boussinesq

Lesieur (2008, p. 52) define a Aproximação de Boussinesq como uma simplificação que nos permite considerar variações de densidade quando as pressões e densidades estão próximas as do estado de equilíbrio hidrostático. Em sua essência, a aproximação assume que as grandezas envolvidas no escoamento apresentam

pequenas variações do seu estado de base e não que as mesmas sejam constantes. A aproximação, geralmente, é válida para casos de convecção natural e simplifica as equações governantes ignorando as variações de densidade com exceção dos termos multiplicados pela aceleração da gravidade. Ou seja, no estudo de correntes gravitacionais, podemos desprezar variação de densidade no termo inercial das equações e considera somente variações no termo de empuxo.

Por outro lado, o uso de um sistema de equações simplificado pela Aproximação de Boussinesq acaba restringindo a análise para casos de baixas concentrações, visto que em correntes com altas concentrações as variações de densidade são significativas e aproximação não é mais válida, sendo necessário a resolução do sistema de equações muito mais complexo. Por análise dimensional, baixas concentrações nos limitam a valores máximos $O(5\%)$. Entretanto não há consenso na literatura até qual valor de concentração se faz válida a hipótese de, visto que o valor está associado ao material considerado. No contexto de pequenas variações, outra simplificação é a de não considerar a viscosidade dinâmica das correntes como função da concentração.

Lowe et al. (2005) e Birman et al. (2005) investigam correntes conservativas em função da relação de densidades

$$\gamma = \frac{\hat{\rho}_a}{\hat{\rho}_c}, \quad (3.8)$$

onde $\hat{\rho}_a$ e $\hat{\rho}_c$ representam valores médios dos coeficientes de massa específica do fluido ambiente e da corrente, respectivamente. Birman e Meiburg (2006) investigam via DNS 2D correntes para diferentes valores de γ e utilizam um sistema de equações incompressível completo, não simplificado pela Aproximação de Boussinesq. Na Figura 3.11. percebe-se que em uma simulação com $\gamma = 0,92$, a corrente mantém simetria entre os lados. Para os casos com $\gamma \lesssim 0,9$ verifica-se a perda de simetria, especialmente no processo de pareamento de vórtices. Além disso, percebe-se um sensível aumento na velocidade de avanço da corrente em função da diminuição da relação de densidades.

Para os casos não-conservativos, ou seja, correntes formadas pela mistura de partículas sólidas com o fluido ambiente, Mulder e Alexander (2001) aproximam a massa específica da corrente como uma combinação da massa específica das partículas $\hat{\rho}_p$ e da fração volumétrica C_r , na forma

$$\hat{\rho}_c = \hat{\rho}_a + (\hat{\rho}_p - \hat{\rho}_a) C_r. \quad (3.9)$$

Pode-se, assim, estimar a relação de densidades de uma corrente não-conservativa

$$\gamma = \frac{\hat{\rho}_a}{(\hat{\rho}_p - \hat{\rho}_a) C_r + \hat{\rho}_a}, \quad (3.10)$$

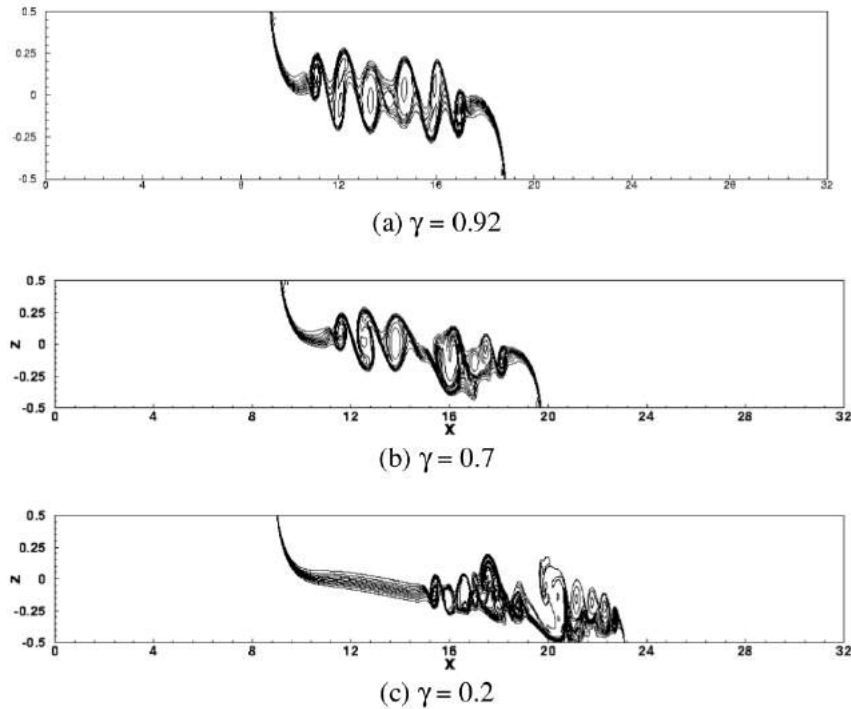


Figura 3.11. Contornos de concentração para simulações com diferentes valores de γ com $Re = 4000$ em $t = 10$, mostrando a mudanças nas velocidade da frente e altura das correntes das correntes. Fonte: Birman e Meiburg (2006)

deixando em evidencia

$$\gamma = \frac{1}{1 + RC_r}, \quad \text{com} \quad R = \frac{\hat{\rho}_p}{\hat{\rho}_a} - 1. \quad (3.11)$$

De acordo com Mulder e Alexander (2001), correntes que não contém material coesivo em sua composição apresentam reologia Newtoniana para valores de C_r de até 40%. Neste trabalho será considerado que uma corrente pode ser aproximada por um sistema de equações simplificado pela Aproximação de Boussinesq se $\gamma \geq 0.95$. Ou seja, para correntes não-conservativas (com material em suspensão) considera-se valido o sistema de equação simplificado pela Aproximação de Boussinesq não somente em função da concentração, mas em função da relação de densidades. Isso permite, por exemplo, considerar na análise correntes com material de pequena massa específica e grandes concentrações, bem como correntes com material de elevada massa específica e pequenas concentrações. A Figura 3.12. ilustra o comportamento de γ em função unicamente de R e C_r .

3.6. Sedimentação de partículas

Baseado na teoria de fluidos ao redor de uma esfera, uma partícula com densidade maior que a do fluido em que se encontra irá acelerar devido ao seu peso

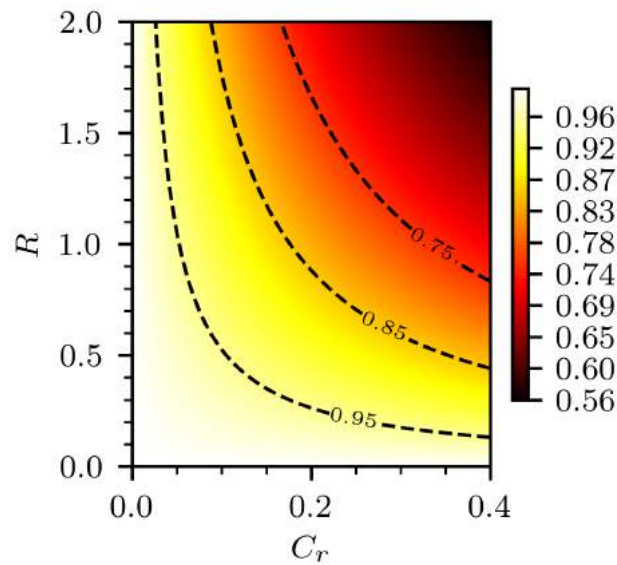


Figura 3.12. Relação de densidades γ para correntes com partículas em suspensão (não-conservativas) em função da diferença relativa de massa específica R e da fração volumétrica de partículas C_r .

até alcançar uma velocidade de queda constante (JULIEN, 2010). Esta velocidade está relacionada com o peso da esfera, forças de empuxo e de arrasto. Por meio do balanço de forças sobre a esfera em função das propriedades da partícula e do fluido ambiente, pode-se obter a chamada *lei de Stokes* (MILLIKAN, 1923). A mesma é uma aproximação razoável se aplicada à partículas esféricas de pequeno diâmetro e em baixas concentrações (para que efeitos floculação sejam desprezíveis). Neste trabalho utiliza-se a aproximação proposta por Ferguson e Church (2004) para a velocidade de sedimentação. A relação estende a lei de Stokes e pode estimar a velocidade de queda para partículas com diâmetros maiores que $100\mu m$, na forma

$$u_s = \frac{1}{\hat{U}} \frac{R\hat{g}\hat{d}^2}{18\nu + (0.3R\hat{g}\hat{d}^3)^{0.5}}, \quad (3.12)$$

sendo \hat{g} é a gravidade, \hat{d} o diâmetro da partícula, \hat{U} a velocidade característica do escoamento para fins de adimensionalização. Ao analisar a Eq. (3.12), percebe-se que para pequenos diâmetros de partículas os efeitos viscosos predominam, mas se tornam desprezíveis para grandes diâmetros. A relação se reduz a lei de Stokes se o diâmetro de sedimento for pequeno e tende a um valor de arraste constante para sedimento grosso. Gladstone et al. (1998) sugere que a velocidade de sedimentação pode ser até 30% menor do que a aproximada se a partícula possuir uma forma com muitos ângulos, devido ao incremento das forças de arrasto. Sabe-se que a velocidade de queda sofre um decréscimo com o aumento da concentração. Estas variações apresentam pequena ordem de magnitude e, juntamente com efeitos de inercia e interações entre partículas, não serão consideradas neste trabalho.

4. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Neste capítulo, são apresentados conceitos utilizados para a definição do conjunto de equações governantes que regem a dinâmica do escoamento. As equações governantes são apresentadas em sua forma adimensional e geral para os casos DNS/LES, sendo válidas para todas as configurações de escoamentos investigadas. Na parte final, é apresentado um detalhamento das condições de contorno do domínio computacional.

Em experimentos laboratoriais, correntes gravitacionais são formadas por pequenas diferenças de densidade. Nesta condição, a aproximação de Boussinesq pode ser empregada e conseqüentemente, as variações de massa específica são desprezadas, com exceção do termo gravitacional. Pode-se também considerar um campo escalar para avaliar-se a dispersão do campo de concentração (e.g., salina ou de partículas), por meio de uma formulação Euleriana via uma equação de transporte.

4.1. Equações governantes

Escoamentos com sedimentos em suspensão podem ser modelados pela avaliação combinada de equações de conservação da massa, quantidade de movimento e transporte de quantidades escalares. No presente estudo, consideram-se as hipóteses de escoamento incompressível, pequenas concentrações de partículas e assumindo pequenas e lineares variações de densidade em função da concentração de partículas. O que possibilita o emprego das equações de Navier-Stokes (NS) simplificadas pela aproximação de Boussinesq. O comportamento do campo de concentração de partículas pode ser descrito com a equação do transporte escalar em que a velocidade de convecção das partículas é dada pela soma da velocidade local do fluido u_i e da velocidade de sedimentação das partícula u_s , positiva no sentido da aceleração da gravidade. Aqui utiliza-se a formulação Euleriana em que não simulam-se individualmente as partículas, senão por meio da concentração das mesmas no domínio de cálculo. Esta formulação pode ser empregada quando o número de Stokes das partículas analisadas são muito menores que a unidade, portanto considera-se que a sua velocidade seja equivalente à do escoamento, a mesma foi investigada inicialmente na forma monodispersa para uma granulometria uniforme por Necker et al. (2002),

Espath et al. (2013), e estendida, nos trabalhos de Francisco (2014), Schuch (2016), Francisco et al. (2017), para avaliar casos com múltiplas frações de partículas (de granulometria variada), sendo necessário a resolução de uma equação para cada diâmetro de partículas considerado. A esta metodologia dá-se o nome polidispersa e neste contexto, temos que a concentração de partículas total das frações c_t (não pode ser superior a unidade) é dada por

$$c_t = \sum_{\ell=1}^N c_{\ell}; \quad \ell = 1, \dots, N, \quad (4.1)$$

sendo N o número total de frações granulométricas consideradas. Cada fração ℓ considerada possui um valor de concentração médio inicial $c_{0,\ell}$, um valor de velocidade de queda $u_{s,\ell}$ e uma constante de difusividade mássica do material κ_{ℓ} . Como este trabalho investiga escoamentos em diferentes configurações, via DNS e LES, e por questão de simplicidade as equações governantes são apresentadas na forma adimensional

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (4.2a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \left(\frac{1}{Re} + \nu_t \right) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \nu_t}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + e_i^g Ri c_t, \quad (4.2b)$$

$$\frac{\partial c_{\ell}}{\partial t} = -(u_j + u_{s,\ell} e_j^g) \frac{\partial c_{\ell}}{\partial x_j} + \left(\frac{1}{Re Sc_{\ell}} + \kappa_t \right) \frac{\partial^2 c_{\ell}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \kappa_t}{\partial x_j} \frac{\partial c_{\ell}}{\partial x_j}, \quad \ell = 1, \dots, N \quad (4.2c)$$

sendo que x_i representa os eixos de coordenadas espaciais, u_i as componentes da velocidade, p a pressão e $e_j^g = (0, -1, 0)$ o vetor unitário agindo na direção da gravidade. Em DNS, têm-se $\nu_t = \kappa_t = 0$. Em LES, implícito ($\nu_t = \kappa_t = 0$) e explícito ($\nu_t \neq 0$ e $\kappa_t \neq 0$), as grandezas resultantes são filtradas pela malha de calculo (e.g., $\bar{u}_i, \bar{p}, \bar{c}_{\ell}$). Para correntes conservativas tem-se $u_{s,\ell} = 0$ e $\ell = 1$ (caso monodisperso). Detalhes sobre o procedimento de adimensionalização podem ser encontrados nos anexos de Francisco (2014) e Schuch (2016). Com relação a nomenclatura, a equação da quantidade de movimento é composta pelos seguintes termos, respectivamente: aceleração local, aceleração convectiva (ou termo não-linear), gradiente de pressão, termo viscoso (Laplaciano da velocidade), termo fechamento ou de modelo (nos casos de LES explícita) e o termo de empuxo ou gravitacional.

Define-se um domínio adimensional para a resolução das Eqs. (4.2). As dimensões espaciais: L_1, L_2 e L_3 são adimensionalizadas por meio da divisão com a escala de comprimento característico: \hat{H} . Os grupos de parâmetros adimensionais introduzidos nas equações governantes são: o número de Reynolds,

$$Re = \frac{\hat{U} \hat{H}}{\hat{\nu}}, \quad (4.3)$$

sendo \hat{U} a escala de velocidade característica e $\hat{\nu}$ a viscosidade cinemática média do fluido. Os valores de \hat{U} e \hat{H} são obtidos em função do escoamento. O número de Richardson¹,

$$Ri = \frac{\hat{g}'\hat{H}}{\hat{U}^2}, \quad (4.4)$$

razão entre as forças de empuxo e inerciais, função da gravidade reduzida

$$\hat{g}' = \hat{g} \frac{\hat{\rho}_c - \hat{\rho}_a}{\hat{\rho}_a}. \quad (4.5)$$

O número de Schmidt

$$Sc_\ell = \frac{\hat{\nu}}{\hat{\kappa}_\ell}, \quad (4.6)$$

razão entre difusão de quantidade de movimento, onde $\hat{\kappa}_\ell$ é a difusão mássica do material da fração de partículas considerada. Segundo Härtel et al. (2000a), se $Sc \geq O(1)$ o mesmo apresenta mínimos efeitos na dinâmica da corrente. O aumento do mesmo, reduz a difusividade das partículas, e por consequência gera forte refinamento das estruturas geradas no campo de escalar. Ou seja, o transporte escalar ocorre em escalas menores que o menor vórtice. Bonometti e Balachandar (2008) confirmam que o Sc apresenta fraca influência sobre a estrutura e a dinâmica da corrente se $Re > O(10^4)$ e que os padrões de lobos-e-fendas são independentes do mesmo. Para casos de $Re < 10^4$, as estruturas de mistura e velocidade da frente sofrem fortes efeitos de difusão. Neste trabalho considera-se Sc igual a unidade.² Dessa forma, as estruturas turbulentas geradas no campo de escalar tem a mesma ordem de grandeza das escalas de movimento do campo de velocidades e a mesma malha de cálculo pode ser considerada.

4.2. Domínios fechados

Correntes em configuração do tipo *lock-exchange* e liberação de volume finito são produzidas em domínios computacionalmente fechados, visto que não há entrada ou saída de fluido. Nestes casos, ocorre a conversão da energia potencial inicial em

¹O sistema de equações está acoplado se $Ri > 0$, ou seja, o campo escalar influencia na advecção do campo de velocidades de forma *ativa*. Se considerarmos um campo escalar para representar, por exemplo, temperatura em um sistema Boussinesq, tem-se um escalar dito *homogêneo* ou *passivo*, visto que as variações de densidade devido a variação de temperatura são, neste contexto, insignificantes (i.e., $Ri \rightarrow 0$).

²O espectro de escalas presentes no campo escalar é sensível ao Sc . Segundo Yeung et al. (2004): se $Sc \lesssim 1$ a menor estrutura presente no campo escalar é conhecida como a escala de Obukhov-Corrsin, estimada por $\eta_{OC} \equiv \eta_K Sc^{-3/4}$ (onde η_K é a escala de Kolmogorov (Eq. (3.7))), enquanto que para $Sc \gg 1$ a menor escala é conhecida como a escala de Batchelor, estimada por $\eta_B \equiv \eta_K Sc^{-1/2}$. Se $Sc = 1$ tem-se $\eta_{OC} = \eta_B = \eta_K$.

energia cinética. Como condição inicial ($t = 0$) todo o domínio encontra-se em repouso $u_i = 0$ e com um volume de fluido mais denso enclausurado em um subdomínio com dimensões $\hat{L}_{1b} \times \hat{L}_{2b} \times \hat{L}_{3b}$ separado por uma placa. Se igualarmos a fórmula da energia cinética com a potencial, e considerando a distância até o centro de gravidade da massa de fluido com maior densidade, obtemos a velocidade característica, conhecida como velocidade de empuxo, na forma

$$\hat{U} = \sqrt{\hat{g}' \hat{L}_{2b}}. \quad (4.7)$$

Já escala de comprimento característico pode ser arbitrada. Normalmente considera-se $\hat{H} = \hat{L}_{2b}$ ou (b) $\hat{H} = \hat{L}_{2b}/2$. A primeira opção resulta em domínios menores e Re maiores enquanto que a segunda, domínios maiores e Re menores. A velocidade característica de empuxo é independente do comprimento característico. Por definição, se considerado a escala (a) o número de Richardson simplifica-se a unidade, caso contrario (b) o mesmo é a metade.

Segundo Shin et al. (2004) se a altura da coluna de fluido com concentração equivale a altura do domínio, $L_2 = L_{2b}$ da-se o nome de liberação completa, entretanto se $L_2 > L_{2b}$ o caso é conhecido por nos casos conhecidos como liberação parcial. Se a placa estiver posicionada no meio do domínio, ou seja, $L_{1b} = L_1/2$ tem-se um caso em *lock-exchange*. Quando $L_{1b} < L_1/2$ tem-se um caso de liberação de volume finito, ver exemplo na Fig. 4.1.

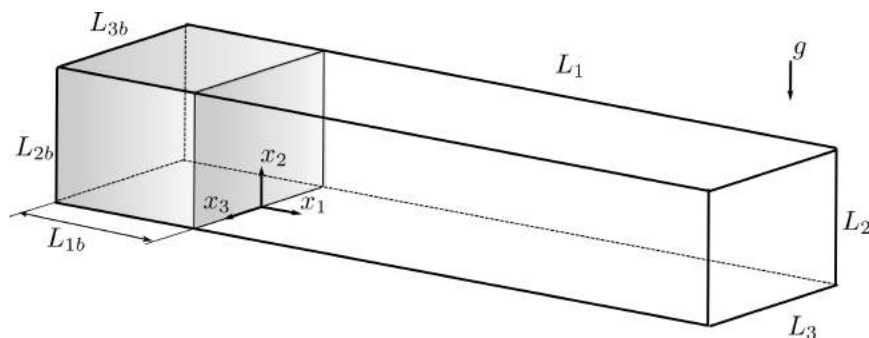


Figura 4.1. Esquema de um escoamento tipo liberação de volume finito em domínio fechado. Fonte: Espath et al. (2014).

4.3. Domínios abertos

Em configurações numericamente abertas há prescrição da distribuição de entrada de velocidade nos contornos do domínio de cálculo, como consequência (pela condição de incompressibilidade) se faz necessário uma saída. Nesta configuração

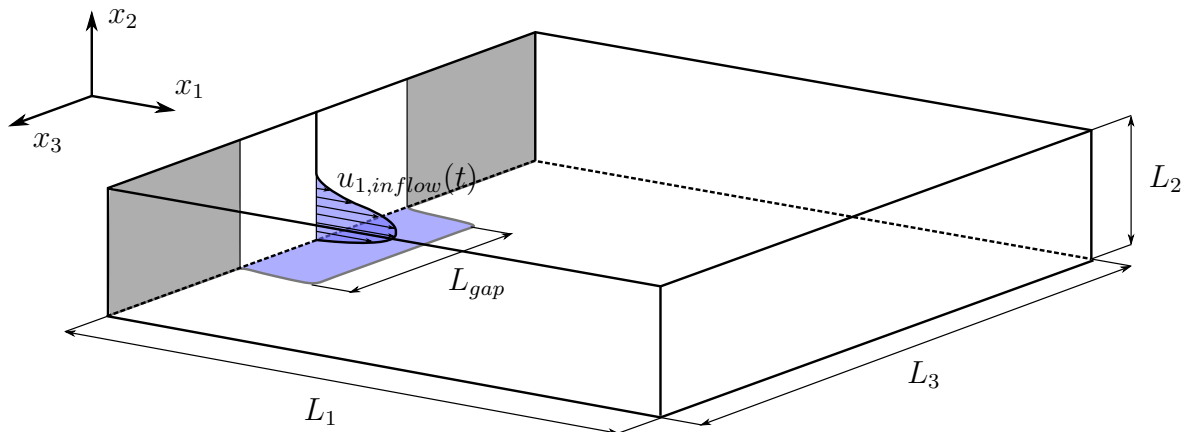


Figura 4.2. Esquema de domínio aberto em transição canal/bacia.

geralmente são obtidos escoamentos do tipo fluxo contínuo. Nestes casos, não há necessariamente energia no tempo inicial, e geralmente há a injeção de fluido com ou sem partículas para o sistema, e portanto, \hat{U} é aproximado como o valor de velocidade média de injeção e \hat{H} a espessura da janela de injeção ou a espessura média da corrente. Como condição inicial ($t = 0$) todo o domínio encontra-se em repouso e sem partículas em suspensão, $c_\ell = u_i = 0$. Na entrada utiliza-se a condição de contorno de Dirichlet. Para o controle da vazão de entrada de fluido, é utilizada uma função de controle

$$Q(t) = \tanh\left(\frac{2t}{t_1}\right) \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{-2t + t_2 + t_3}{t_2 - t_3}\right) \right], \quad (4.8)$$

parametrizada por três tempos característicos: t_1 , t_2 e t_3 , que representam, respectivamente, o tempo de aceleração (t_1), tempo de início da desaceleração (t_2) e o tempo

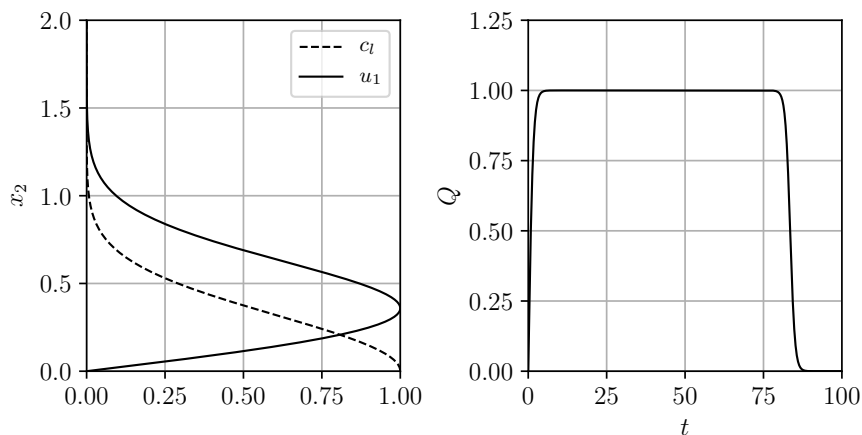


Figura 4.3. Ilustração dos perfis de velocidade, de concentração de sedimentos e da função de controle de vazão.

final de injeção de partículas no domínio (t_3). A componente de velocidade longitudinal u_1 é prescrita sobre o contorno ($x_1 = 0$) por um perfil de velocidades parametrizado pela constante δ_1 e δ_2 , na forma

$$u_1(t, x_2) = \begin{cases} \delta_1 x_2 \exp\left(\frac{\delta_2}{2} x_2^2\right) Q(t) & \text{se } 0 \leq t \leq t_3, \\ 0 & \text{se } t > t_3, \end{cases} \quad (4.9a)$$

$$u_2 = u_3 = 0. \quad (4.9b)$$

O perfil de concentração de sedimentos na entrada do domínio, função de δ_3 , é dado por

$$c_\ell(t, x_2) = \begin{cases} \exp\left[-\left(\frac{x_2}{\delta_3}\right)^2\right] c_{0\ell} & \text{se } 0 \leq t \leq t_3, \\ 0 & \text{se } t > t_3. \end{cases} \quad (4.10)$$

A partir do primeiro passo de tempo se dá a entrada de partículas segundo o perfil de concentração c_ℓ até o tempo final de injeção t_3 . A Fig. 4.3. ilustra os perfis de velocidade e de concentração. Os valores de δ_1 , δ_2 e δ_3 são função de cada caso e podem ser estimados com dados experimentais.

No contorno de saída, o código permite o fluxo de velocidade e concentração através de uma equação de convecção unidimensional

$$\frac{\partial c_\ell}{\partial t} + U^{b,1} \frac{\partial c_\ell}{\partial x_1} = 0, \quad (4.11a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + U_j^{b,u} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0, \quad (4.11b)$$

onde $U^{b,1}$ é a velocidade de convecção normal ao contorno para o campo de concentração de partículas, enquanto $U_j^{b,u}$ é a velocidade de convecção associada ao transporte de vórtices para fora do domínio computacional (mais informações sobre este tipo de condição de contorno em Le et al. (1997, p. 353) e Ol'Shanskii e Staroverov (2000)). Em todas as simulações foram consideradas velocidades convectivas (normais à saída) $U^{b,1} = U_j^{b,u} = 1$.

O topo do domínio, $x_2 = L_2$, é tratado como uma superfície não deformável por meio da condição de deslizamento livre para velocidade

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_2} = u_2 = \frac{\partial u_3}{\partial x_2} = 0. \quad (4.12)$$

O fundo do canal considerado como uma parede não-deformável e portanto é imposta uma condição de não deslizamento para a velocidade, $u_i = 0$. Para os casos conservativos considera-se fluxo nulo de concentração na parede. Para os casos

não-conservativos, o depósito de partículas no fundo do canal é emulado, por meio de uma condição de contorno do tipo Dirichlet, segundo a equação

$$\frac{\partial c_\ell}{\partial t} - u_{s,\ell} \frac{\partial c_\ell}{\partial x_2} = 0. \quad (4.13)$$

Cada fração de partículas deixa o domínio com velocidade de queda $u_{s,\ell}$ constante na direção do vetor gravidade. Vale ressaltar que a altura da camada de depósitos nos casos investigados é muito pequena, portanto, alterações da topologia do fundo decorrentes do acúmulo de partículas e/ou erosão são desconsideradas.

5. METODOLOGIA NUMÉRICA

5.1. Código computacional

Neste trabalho empregou-se o código computacional livre **Incompact3d**¹ utilizado para resolver numericamente o conjunto de equações governantes (4.2). O mesmo é escrito em Fortran e foi projetado para DNS e LES de escoamentos incompressíveis nas mais diversas configurações, permitindo calcular até as mais finas escalas (LAIZET; LAMBALLAIS, 2009). O código de arquitetura paralela é construído sobre uma biblioteca de decomposição bidimensional do domínio de cálculo (2DE-COMP), deixando flexível e eficiente a utilização do código em qualquer sistema, de computadores pessoais a grandes supercomputadores (LI; LAIZET, 2010).

O termo convectivo da equação de NS é resolvido na formulação anti-simétrica por ser condicionalmente estável e para minimizar erros de *aliasing* (distorção numérica no sinal) que resultam ao se avaliar termos não-lineares em malhas cartesianas (KRAVCHENKO; MOIN, 1997). Já o termo não-linear da equação do transporte é resolvido, necessariamente, na forma não-conservativa, visto que os campos de velocidade e escalar podem possuir condições de contorno distintas.

O código utiliza o método de predição-correção (CHORIN, 1968), no qual primeiro calculam-se os termos convectivo e difusivo da equação de quantidade de movimento (4.2b) para um tempo t^k e, na sequência, um valor da velocidade intermediária. Conhecendo este, aplica-se o acréscimo do gradiente de pressão para avançar ao tempo $k+1$ e o divergente sobre a equação resultante. Determina-se o valor da pressão p^{k+1} e obtêm-se a velocidade em $k+1$. Por fim, conhecendo a velocidade u_i^{k+1} , verifica-se a condição de incompressibilidade da maneira supramencionada. O gradiente de pressão é obtido pela resolução de uma equação de Poisson (e.g., $\nabla^2 a = b$) no espaço espectral com o uso de transformada rápida de Fourier (LAIZET; LAMBALLAIS, 2009). O avanço no tempo é feito pelo esquema de integração temporal linear de múltiplos passos de terceira ordem de Adams-Bashforth (AB3).

¹O código computacional utilizado com a implementação de todas os métodos mencionados neste trabalho esta disponível em <<https://github.com/xcompact3d/Incompact3d>>

5.2. Discretização espacial

Os termos não-lineares do sistema de equações apresentam derivadas parciais de primeira ordem. Pode-se obter esquemas de derivação por diferenças finitas (DF) de alta ordem de exatidão por meio da expansão de séries de Taylor (MOIN, 2010). Ao considerar-se o valor da primeira derivada de uma função f_i no ponto i , e ao incluir pontos próximos e suas derivadas no estêncil em questão obtêm-se os chamados *esquemas compactos*. Neste contexto, o valor da primeira derivada de uma função f_i no ponto i depende do valor da função nos pontos próximos ($f_{i-2}, f_{i-1}, f_{i+1}, f_{i+2}$) e suas derivadas ($f'_{i-2}, f'_{i-1}, f'_{i+1}, f'_{i+2}$). Lele (1992) investiga esta ideia e propõe esquemas compactos sob uma aproximação geral

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x}, \quad (5.1)$$

onde os parâmetros a, b, c, α são relacionados por equações de restrição para cada ordem de exatidão desejada (equações 2.1.1 à 2.1.5 de (LELE, 1992, p 40)). Casos com $\alpha = 0$ geram esquemas explícitos, entretanto casos com $\alpha \neq 0$ resultam em esquemas tri-diagonais que são facilmente resolvidos com o uso do algoritmo de Thomas (eliminação de Gauss simplificada) e apresentam boa relação entre exatidão numérica e custo computacional. Para verificar a exatidão do esquema numérico em função do conjunto de parâmetros utilizados, podemos utilizar o conceito de número de onda modificado (demonstração no Apêndice B.1)

$$k'(w) = \frac{a(w) + (b/2)(2w) + (c/3) \sin(3w)}{1 + 2\alpha \cos(w)}. \quad (5.2)$$

A Figura 5.1. demonstra o comportamento espectral, por meio da Eq. (5.2), de esquemas centrados sobre a aproximação 5.1 para diferentes conjuntos de parâmetros. No código em questão, pelos motivos supracitados, para quase totalidade do domínio emprega-se um esquema de derivada de primeira compacto centrado, com sexta-ordem de exatidão, obtido com os parâmetros $a = 14/9, b = 1/9, \alpha = 1/3$ e $c = 0$. Nos contornos do domínio ($i = 1$ e $i = n$), utiliza-se um esquema de terceira-ordem descentrado com coeficientes $\alpha = 2, a = -5/2, b = 2$ e $c = 1/2$. Para os vizinhos dos contornos ($i = 2$ e $i = n - 1$) se utiliza um esquema centrado de quarta-ordem com $\alpha = 1/4, a = 3/2$. A redução da ordem de exatidão dos esquemas de derivadas nos contornos é desprezível e não reduz a ordem global do código (LAIZET; LAMBALLAIS, 2009). Estes esquemas apresentam comportamento 'quase-espectral' devido à alta exatidão numérica e sub-dissipativos visto que não conseguem acompanhar a solução exata nos grandes números de onda.

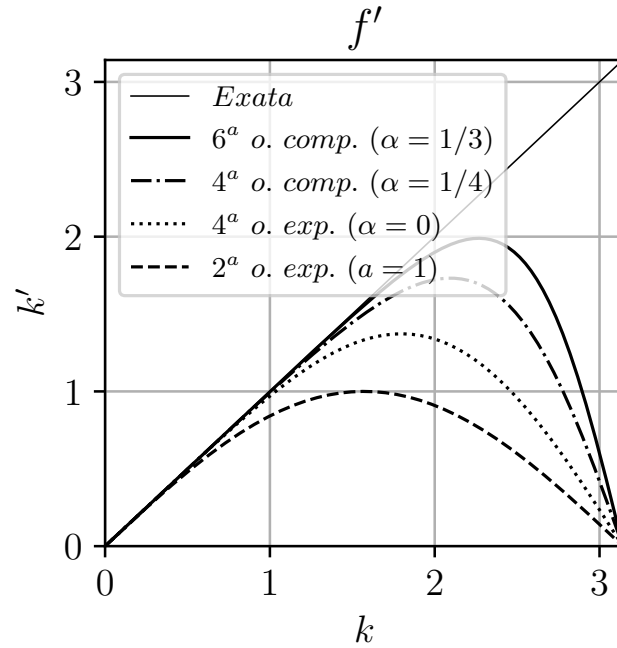


Figura 5.1. Gráfico do número de onda modificado k' (Eq. (5.2)) vs número de onda k para aproximações da derivada de primeira ordem f' centradas: (a) derivada exata, (b) esquema de segunda-ordem explícito, (c) esquema de quarta-ordem explícito ($\alpha = 1/4$), (d) esquema de quarta-ordem compacto ou Padé ($\alpha = 1/4$), (e) esquema de sexta-ordem compacto ou Padé ($\alpha = 1/3$).

A mesma metodologia pode ser desenvolvida para a aproximação das derivadas de segunda ordem utilizadas na discretização do termo viscoso (Laplaciano) na forma

$$\alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2} + d \frac{f_{i+4} - 2f_i + f_{i-4}}{16\Delta x^2}, \quad (5.3)$$

onde os coeficientes a , b , c , d e α da aproximação estão correlacionados por restrições (equações 2.1.1 à 2.1.5 de Lele (1992)).

A exatidão do conjunto de parâmetros pode ser avaliada no espaço espectral, por meio do número de onda modificado quadrado, com a seguinte equação (demonstração no Apêndice B.2)

$$k''(w) = \frac{2a(1 - \cos(w)) + \frac{b}{2}(1 - \cos(2w)) + \frac{2c}{9}(1 - \cos(3w)) + \frac{d}{8}(1 - \cos(4w))}{1 + 2\alpha \cos(w)}. \quad (5.4)$$

5.2.1. Núcleo para DNS

Devido à necessidade de controlar os erros de *aliasing* e o aparecimento de ruído (*wiggles*) junto às menores escalas (fenômeno comum em códigos de DF),

Lamballais et al. (2011) desenvolvem um conjunto de coeficientes para a derivada de segunda ordem, sobre a aproximação Eq. (5.3), parametrizados sobre uma constante arbitrária n . O mesmo foi idealizado para imitar o conceito de hiperviscosidade, utilizado para o mesmo fim em códigos espectrais. A manipulação dos coeficientes equivale à adição de um filtro numérico, que se adapta localmente às pequenas escalas, junto à derivada. Não são adicionadas equações extras ou modelos, a dissipação ocorre precisamente nas escalas desejadas e na intensidade desejada. Os coeficientes modificados são utilizados nos esquemas de discretização do termo viscoso da equação de quantidade de movimento (4.2b). No núcleo proposto, a intensidade da dissipação é controlada por um parâmetro único.

DNS são efetuadas com resoluções marginais (muito próximas às menores escalas) devido ao alto custo associado. Mesmo com a utilização de esquemas de derivação de alta ordem e a formulação adequadas, é normal o aparecimento de oscilações espúrias junto as pequenas escalas. Estas flutuações, conhecidas como *wiggles*, podem ser controladas com o uso de malhas ainda mais refinadas, resultando em um enorme aumento no custo computacional das simulações. Lamballais et al. (2011) propõe um conjunto de coeficientes para a aproximação da derivada de segunda ordem, que garante a introdução de dissipação numérica por meio de um comportamento super-dissipativo. Este artifício, chamado de viscosidade turbulenta espectral, do inglês *Spectral Vanishing Viscosity* (SVV), é similar ao conceito do método de *upwinding*, no qual utilizam-se esquemas de derivada de primeira ordem explícitos descentrados de para se introduzir dissipação numérica adicional. Esta técnica, comum em códigos de DF de baixa ordem, é cara visto que exige a inversão de sistemas matriciais pentadiagonais. Lamballais et al. (2011) demonstram que a metodologia de SVV maior ordem de exatidão e custo desprezível, se comparado ao uso de esquemas *upwinding*. No seguinte conjunto de coeficientes para DNS, referido como O6DNS,

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \frac{272 - 45k_c''\Delta x^2}{416 - 90k_c''\Delta x^2}, \\
 a &= \frac{48 - 135k_c''\Delta x^2}{1664 - 360k_c''\Delta x^2}, \\
 b &= \frac{528 - 81k_c''\Delta x^2}{208 - 45k_c''\Delta x^2}, \\
 c &= \frac{-432 + 63k_c''\Delta x^2}{1664 - 360k_c''\Delta x^2}, \\
 d &= 0,
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

sendo o número de onda modificado quadrático para número de onda $k\Delta x = \pi$ avaliado como $k_c''\Delta x^2(n) = n\pi^2$, de forma que a intensidade do erro de dissipação

numérica introduzida nos maiores números de onda é livremente ajustada por n . Para DNS, geralmente utiliza-se $n = 4$ (valor cuidadosamente investigado na seção de discussões de Lamballais et al. (2011)). Pode-se aumentar o valor de n de maneira a utilizar o efeito de dissipação, de forma análoga a um modelo de submalha, para controlar o acúmulo de energia das escalas não resolvidas no escoamento. Entretanto, para valores maiores que 10, por exemplo, sabe-se que esta metodologia aumenta muito a viscosidade e exige uma redução excessiva no passo de tempo, devido a estabilidade do esquema de integração temporal.

5.2.2. Núcleo para ILES

Para resolver esta limitação e utilizar o conceito de ISVV em simulações LES com elevado número de Reynolds, Dairay et al. (2015) desenvolvem um segundo núcleo com dois parâmetros, permitindo um grau de liberdade extra no controle da dissipação introduzida pelos esquemas. Dairay et al. (2017) apresentam uma profunda investigação sobre esta metodologia de LES implícita, discutindo seus pontos positivos e comparando com os modelos explícitos no contexto do problema de vórtices de Taylor-Green (TGV) (escoamento homogêneo). O conjunto de coeficientes projetados para simulação de grandes escalas, referido como O6LES,

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \frac{1/2 - (320k_m'' \Delta x^2 - 1296)}{405\pi^2 - 640k_m'' \Delta x^2 + 144}, \\
 a &= \frac{-(4329\pi^2/8 - 32k_m'' \Delta x^2 - 140\pi^2 k_m'' \Delta x^2 + 286.)}{405\pi^2 - 640k_m'' \Delta x^2 + 144}, \\
 b &= \frac{2115\pi^2 - 1792k_m'' \Delta x^2 - 280\pi^2 k_m'' \Delta x^2 + 1328}{405\pi^2 - 640k_m'' \Delta x^2 + 144}, \\
 c &= \frac{-(7695\pi^2/8 + 288k_m'' \Delta x^2 - 180\pi^2 k_m'' \Delta x^2 - 2574)}{405\pi^2 - 640k_m'' \Delta x^2 + 144}, \\
 d &= \frac{198\pi^2 + 128k_m'' \Delta x^2 - 40\pi^2 k_m'' \Delta x^2 - 736}{405\pi^2 - 640k_m'' \Delta x^2 + 144}, \tag{5.6}
 \end{aligned}$$

onde $k_m'' \Delta x^2 = k_m^2 (n \exp(-((\pi - k_m)/(0.3\pi - k_m))^2) + 1)$. A intensidade é função do parâmetro n , enquanto que agora a faixa de números de onda atingidos é dada por um segundo parâmetro k_m , fixado em $2\pi/3$. A intensidade de dissipação por meio desse método para diferentes valores do parâmetro n podem ser encontrados na Figura 5.2., onde é possível visualizar o número de onda no eixo das abcissas, em que maiores números de onda representam menores escalas de turbulência. Já no eixo das ordenadas, pode ser visualizada sobredissipação ou subdissipação numérica, em que a solução espectral representa a solução exata.

Dairay et al. (2015) comentam que o pequeno valor de dissipação numérica introduzida por meio do uso do núcleo para DNS (O6DNS) é projetado exclusivamente

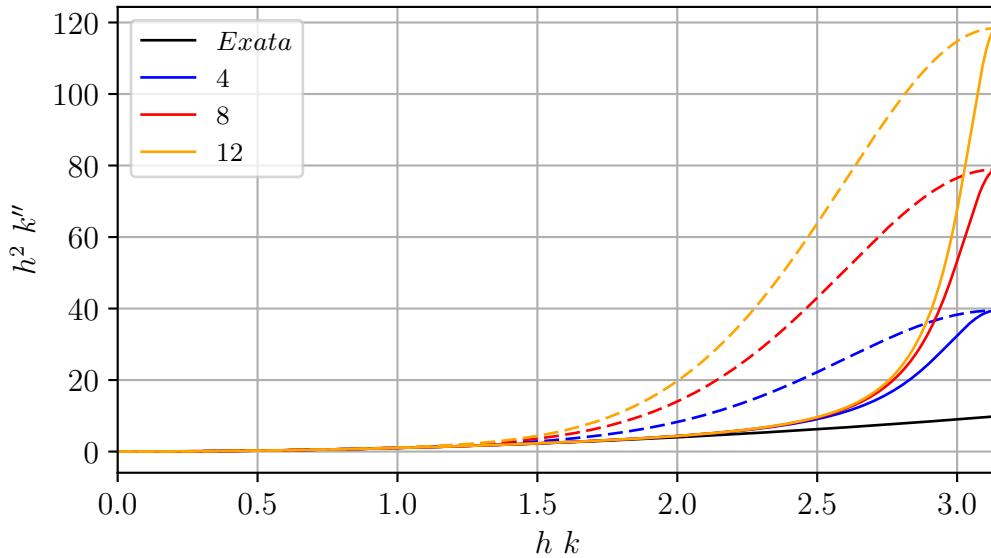


Figura 5.2. Comparação entre núcleos para dissipação numérica artificial em esquemas de derivada segunda. Linha sólida para esquema de um ponto (O6DNS). Linha pontilhada representa esquema o de dois pontos (O6LES).

para o controle de erros numéricos na pequena escala, enquanto que o núcleo para LES (O6LES) pode ser visto como um modelo de submalha².

5.3. Formalismo LES e modelos submalha

Em LES considera-se que a região inercial do espectro de energia é mais ou menos universal e pode ser parametrizada pela taxa de transferência de energia. Portanto esta taxa for estimada de alguma forma, pode ser utilizada para modelar o efeito do intervalo inercial nas simulações, evitando o custoso cálculo das escalas dissipativas (JIMÉNEZ, 2002). No método LES, uma operação de filtragem é aplicada no sistema de equações e cada grandeza é dividida em uma parte de grande escala e uma parte de pequena escala (LEONARD, 1975). O primeiro nível de filtro, representado por $(\bar{\cdot})$, é imposto pela malha de cálculo. O tensor de tensões residuais (termo de fechamento)³ pode ser estimado com base nos campos filtrados conhecidos

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (5.7)$$

Em LES explícito, o efeito das grandes escalas é calculado enquanto que as escalas menores que a malha (ditas de submalha) são modeladas. De acordo

²A terminologia "submalha" é empregada pelo senso comum, apesar de Dairay et al. (2017) comentarem que a o termo "subfiltro" seja mais apropriado.

³O mesmo é análogo ao tensor de tensões de Reynolds: $\langle u'_i u'_j \rangle = \langle u_i u_j \rangle - \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle$.

com Germano et al. (1991), "as pequenas escalas do escoamento tendem a ser mais isotrópicas que as grandes e, portanto, podem ser parametrizadas por meio de modelos simples e universais". Os modelos de escala submalha, do inglês *subgrid scale* (SGS), baseiam-se na suposição de uma viscosidade turbulenta, do inglês *eddy viscosity*, e consideram que a produção e a dissipação de energia em pequena escala estejam em equilíbrio (energia adicionada e removida a uma taxa constante). Ou seja, as grandes escalas do movimento são calculadas diretamente a partir da solução das equações de NS filtradas, enquanto que as pequenas escalas são modeladas pelo tensor SGS e seus efeitos traduzidos no sistema por meio da viscosidade turbulenta. A Hipótese de Boussinesq assume que o tensor de tensões de Reynolds é proporcional à componente simétrica sem traço do tensor taxa de deformação, e que haja um alinhamento entre o tensor de tensões e o tensor de taxa de deformação, na forma

$$\tau_{ij} = -2\nu_t \bar{S}_{ij}. \quad (5.8)$$

Estas abordagens introduzem no sistema um escalar adicional, conhecido como viscosidade turbulenta ν_t , que permite a obtenção de um tensor submalha sob a hipótese de Boussinesq.

5.3.1. Modelo Smagorinsky estático

Smagorinsky (1963) propõe o primeiro modelo de submalha para LES desenvolvido para simulações numéricas de circulação geral atmosférica. O mesmo (SMAG) foi desenvolvido para turbulência homogênea e isotrópica e é baseado nas grandes escalas do escoamento. O modelo assume que a viscosidade turbulenta é proporcional ao comprimento do filtro de malha $\bar{\Delta}$ e possui a forma

$$\nu_t = C_S^2 \bar{\Delta}^2 |\bar{S}|, \quad (5.9)$$

sendo $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$ a magnitude do tensor taxa de deformação e C_S o coeficiente de Smagorinsky (e.g., $C_S = 0.065 \sim 0.2$). Sagaut (2006) comenta que o valor da constante é independente do número de onda de corte $k_c = \pi/\bar{\Delta}$, mas função da forma do espectro de energia e que, na prática, a mesma é ajustada para melhorar os resultados das simulações. Lilly (1992) comenta que C_S pode ser obtido assumindo que k_c encontra-se dentro da região de $k^{-5/3}$ da cascata de energia cinética de Kolmogorov para o espectro de energia $E(k) = C_K \epsilon^{2/3} k^{5/3}$ e requerendo que a dissipação média do modelo de submalha seja idêntica a ϵ . Um valor aproximado para a constante é obtido por

$$C_S = \frac{1}{\pi} \left(\frac{3C_K}{2} \right)^{-3/4}. \quad (5.10)$$

Para uma constante de Kolmogorov de $C_K \simeq 1.4$ tem-se $C_S \simeq 0.18$. O valor de C_K é desconhecido em escoamentos no contexto de engenharia, transicionais e estratificados. A largura do filtro de malha, função do espaçamento, pode ser estimada como $\bar{\Delta} = (\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3)^{1/3}$. Moin et al. (1991) apontam algumas limitações do modelo: (1) o valor ótimo da constante varia em função do escoamento; (2) o modelo não cumpre o comportamento assintótico perto da parede; (3) o modelo não desaparece em escoamentos laminares e é muito dissipativo em regiões de transição laminar/turbulenta; (4) o modelo não permite a transferência reversa de energia (do inglês *backscatter*) das pequenas escalas para as grandes escalas.

5.3.2. Modelo Smagorinsky dinâmico

Visando adaptar o modelo para a estrutura local do escoamento, Germano et al. (1991) propuseram um procedimento dinâmico. Neste método (DSMAG) o modelo de Smagorinsky é adaptado por meio do ajuste automático do valor da constante $C(x_1, x_2, x_3, t)$ em cada ponto do domínio de cálculo no espaço e no tempo. No contexto do modelo dinâmico, um segundo filtro (filtro de teste) com largura $\tilde{\Delta}$ maior que $\bar{\Delta}$ é necessário. O tilde ($\tilde{\cdot}$) representa campos filtrados nas três direções do escoamento com o uso do operador compacto de sexta-ordem (similar ao esquema de derivada primeira) proposto por Lele (1992, p. 40) (conjunto de coeficientes C.2.8 com $\alpha = \beta = 0$). O mesmo resulta em uma relação de 2 entre o filtro teste e a filtro de malha: $\tilde{\Delta} = 2\bar{\Delta}$.

Pode-se definir os tensores de tensões residuais baseadas no filtro de malha e no filtro de teste, respectivamente

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j, \quad (5.11)$$

$$T_{ij} = \widetilde{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{\bar{u}_i} \widetilde{\bar{u}_j}. \quad (5.12)$$

Germano (1990) propõe uma identidade, obtida ao se aplicar o filtro de teste sobre a Eq. (5.11) e a subtrair da Eq. (5.12)

$$\mathcal{L}_{ij} = T_{ij} - \tau_{ij} = \widetilde{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{\bar{u}_i} \widetilde{\bar{u}_j}, \quad (5.13)$$

que resulta no termo conhecido chamado de tensor de tensões resolvidas.

Se parametrizarmos ambos T_{ij} e τ_{ij} da mesma maneira (utilizando o modelo de Smagorinsky, por exemplo), por meio da Eq. (5.8), tem-se

$$T_{ij} = 2C_S^2 \tilde{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij}, \quad (5.14)$$

$$\tau_{ij} = 2C_S^2 \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}. \quad (5.15)$$

Substituindo as Eqs. (5.15) e (5.14) na identidade Eq. (5.13), tem-se

$$\mathcal{L}_{ij} = \left(2C_S^2 \tilde{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij} \right) - \left(2C_S^2 \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \right). \quad (5.16)$$

A constante C_S^2 fica em evidencia e é redefinida permitindo valores negativos

$$\mathcal{L}_{ij} = C_D \mathcal{M}_{ij}, \quad (5.17)$$

em função do termo de modelo

$$\mathcal{M}_{ij} = 2\bar{\Delta}^2 \widetilde{|\bar{S}| \bar{S}_{ij}} - 2\tilde{\Delta}^2 |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij}. \quad (5.18)$$

O resultado é uma relação em função de grandezas que são conhecidas e obtidas com \bar{u}_i em função do espaço e do tempo. Não é possível isolar o valor de C_D para que o mesmo possa ser aplicado na Eq. (5.9), entretanto pode-se minimizar o erro aplicando a técnica de mínimos quadrados de forma que se obtenha um valor único. Na forma original proposta por Germano et al. (1991), multiplica-se ambos lados da Eq. (5.17) por \bar{S}_{ij} para obter

$$C_D = \frac{\mathcal{L}_{ij} \bar{S}_{ij}}{\mathcal{M}_{ij} \bar{S}_{ij}}. \quad (5.19)$$

Entretanto, considera-se a modificação proposta por Lilly (1992) que define um operador Q para minimizar, por mínimos quadrados, o erro da relação (5.17)

$$Q = \left(\mathcal{L}_{ij} - \frac{1}{3} \mathcal{L}_{kk} \delta_{ij} - 2C \mathcal{M}_{ij} \right)^2, \quad (5.20)$$

considerando $dQ/dC_D = 0$, tem-se

$$C_D = \frac{\mathcal{L}_{ij} \mathcal{M}_{ij}}{\mathcal{M}_{ij} \mathcal{M}_{ij}}, \quad (5.21)$$

por fim estima-se a viscosidade turbulenta na forma

$$\nu_t = \langle C_D \rangle \bar{\Delta}^2 |\bar{S}|. \quad (5.22)$$

5.3.3. Modelo local de adaptação local de paredes

O modelo de viscosidade turbulenta de adaptação local de paredes, do inglês *Wall-Adapting Local Eddy-viscosity* (WALE), proposto por Nicoud e Ducros (1999), é baseado no quadrado do tensor do gradiente de velocidade. O mesmo visa remover a

influência do escoamento médio, não utilizando o módulo do tensor taxa de deformação e possui a forma

$$\nu_t = C_W^2 \Delta^2 \frac{(\bar{s}_{ij}^d \bar{s}_{ij}^d)^{3/2}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{5/2} + (\bar{s}_{ij}^d \bar{s}_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (5.23)$$

sendo

$$\bar{s}_{ij}^d = \frac{1}{2} (\bar{g}_{ij}^2 + \bar{g}_{ji}^2) - \frac{\delta_{ij}}{3} \bar{g}_{kk}^2, \quad (5.24)$$

o tensor de traço nulo composto pelos gradientes do campo de velocidade resolvido $\bar{g}_{ij} = \partial \bar{u}_i / \partial x_j$ e C_W o coeficiente do modelo. Ducros et al. (1998) comentam que o valor da constante para o modelo pode ser estimado como função $C_W \approx 3.25 C_S$. Nicoud e Ducros (1999) testam alguns valores de constante e obtêm melhores correlações com dados experimentais de THI para $C_W = 0.5$. Ma et al. (2009) comentam que esta parametrização apresenta vantagens em relação ao modelo Smagorisky: (1) o operador espacial consiste em uma mistura tanto da tensão local como das taxas de rotação; (2) a viscosidade turbulenta vai naturalmente para zero na proximidade de uma parede (comportamento assintótico $\nu_t \sim (x_2)^3$).

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados deste trabalho foram divididos em duas seções. Na Seção 6.1 estatísticas de cálculos LES com diferentes modelos são comparados com DNS. O modelo de ISVV, que apresenta melhor correlação, é utilizado em diversas configurações de escoamentos comparáveis com experimentos disponíveis na literatura. Na Seção 6.2 o modelo com melhor custo-benefício é aplicado em simulações que recriar casos experimentais disponíveis na literatura. As condições de contorno dos cálculos apresentados estão sumarizados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1. Condições de contorno.

Cálculo	$x_1 = 0$	$x_1 = L_1$	$x_2 = 0$	$x_2 = L_2$	$x_3 = 0$	$x_3 = L_3$
A1–6	DL/FN	DL/FN	ND/FN	DL/FN	P	P
B1	DL/FN	DL/FN	ND/FN	DL/FN	DL/FN	DL/FN
B2	ND/FN	ND/FN	ND/D	DL/FN	P	P
B3	ND/FN	ND/FN	ND/D	DL/FN	P	P
B4	E	S	ND/D	DL/FN	S	S
B5	DL/FN	DL/FN	ND/FN	DL/FN	P	P

DL: Deslizamento livre; ND: Não deslizamento; P: Periódico; S: Saída; E: Entrada; D: Depósito; FN: Fluxo nulo.

6.1. Comparação com DNS

Como já mencionado, correntes salinas são fluxos gravitacionais conservativos e, por tal motivo, se tornam um caso interessante para a comparação de diferentes modelos LES, já que deve haver conservação temporal do campo escalar (comentado a seguir). O escoamento selecionado para a comparação das duas metodologias do tipo LES: a primeira, baseada puramente em dissipação numérica (i.e., ISVV) e a segunda, fundamentada em modelos de submalha explícitos sob a Hipótese de Boussinesq (i.e., SMAG, DSMAG, WALE). A configuração de escoamento canônico de remobilização instantânea de material, em configuração fechada, foi selecionada e executada a um número de Reynolds suficientemente alto para o desenvolvimento de variadas escalas de movimento e estruturas turbulentas complexas. A um valor de

$Re = 10.000$, a simulação é suficientemente cara (de um ponto de vista computacional) e turbulenta (de um ponto de vista físico), justificando a utilização de LES.

Nesta investigação, o uso de resultados de DNS é fundamental e serve como referência para a avaliação da qualidade dos quatro tipos de LES testados. Nesta seção, todas as simulações foram efetuadas em um domínio $L_1, L_2, L_3 = 18, 2, 2$ com mistura de água e sal confinada em um subdomínio $L_{1b}, L_{2b}, L_{3b} = 1, 2, 2$ como condição inicial. Considerou-se $Re = 10.000$, que resulta em uma relação $\gamma = 0,99$ e, portanto, se faz válido no sistema de equações utilizado baseado na Aproximação de Boussinesq. O número de pontos das LES foi selecionado por diversos testes com o uso de ISVV e representam 4% da malha de cálculo da DNS, ou seja, uma redução muito significativa no custo para um caso equivalente.

No contexto de correntes de densidade, os vórtices de KH e as estruturas de lobos-e-fendas se apresentam como uma dificuldade que o modelo LES precisa permitir o desenvolvimento. Além disso, não há, em um primeiro momento, homogeneidade no tempo, já que os casos apresentam comportamento transiente. Para a DNS utilizada como referência, cálculo A1, consideram-se o mesmo domínio computacional e parâmetros numéricos de Espath et al. (2014), com exceção da velocidade de queda (nula devido à salinidade) e o número de pontos na direção transversal ao escoamento x_3 (reduzido em 180 pontos). Os parâmetros considerados se mostram suficientes, pois a DNS resultante não apresenta acúmulo de energia nas pequenas escalas, como pode ser visto por meio de iso-superfícies de critério-Q (DUBIEF; DELCAYRE, 2000) na Figura 6.1. Visualmente percebe-se que, mesmo com um critério baixo, não há o aparecimento de estrias nas estruturas coerentes do escoamento.

Os principais parâmetros dos cálculos estão sumarizados na Tabela 6.2. Os mesmos evoluíram a um passo de tempo constante $\Delta t = 3 \times 10^{-4}$ e foram finalizados em $t = 60$. O A1 é a DNS de referência, recém explicada. No A2 é utilizado o esquema O6LES para simulações LES com base no ISVV. O A3 é executado com o esquema O6DNS e o modelo de Smagorinsky com $C_s = 0.18$. O A4 é obtido com o modelo

Tabela 6.2. Parâmetros numéricos de simulação.

Cálculo	Tipo	n_1, n_2, n_3	Esquema	n	Custo
A1	DNS	2305, 513, 200	O6DNS	4	100% [†]
A2	ISVV	(769, 193, 64)*	O6LES	100	3%
A3	SMAG	(769, 193, 64)*	O6DNS	4	5%
A4	DSMAG	(769, 193, 64)*	O6DNS	4	12%
A5	WALE	(769, 193, 64)*	O6DNS	4	6%

* 4% do número de pontos da DNS;

† 200 horas em 144 núcleos do supercomputador Santos Dumont.

dinâmico e o valor da constante médio em x_3 . O A5 considera o modelo WALE e $C_w = 0.5$. Os parâmetros utilizados nos cálculos apresentados resultaram de diversas execuções para obtenção dos valores adequados e, por simplicidade, estudos de convergência não são apresentados. Para os modelos explícitos, foi necessário um procedimento adicional de truncamento que mantém o campo de concentração sob o valores $0 \leq \bar{c} \leq 1$. Este procedimento adiciona uma filtragem adicional no campo e é necessário para estabilizar as simulações, além disso se mostrou necessário o uso de precisão dupla¹.

Com a DNS em domínios fechados é possível obter o balanço de energias (detalhes no Apêndice A), o mesmo não é mais completamente válido em LES, pois não leva em consideração o termo de dissipação aportado pelos modelos. Como pode se ver Figura 6.2.c, o A1 apresenta um balanço de energia com conservação superior à 99%, o que garante a excelente qualidade da simulação e toda dissipação é gerada pelas escalas de movimento reproduzidas na malha de cálculo. No caso do modelo ISVV, não existem maneiras bem definidas para quantificar a quantidade de energia que foi dissipada pelo modelo em função do esquema numérico e seu coeficiente n . Como há uma simulação de referência (DNS) podemos fazer uma comparação

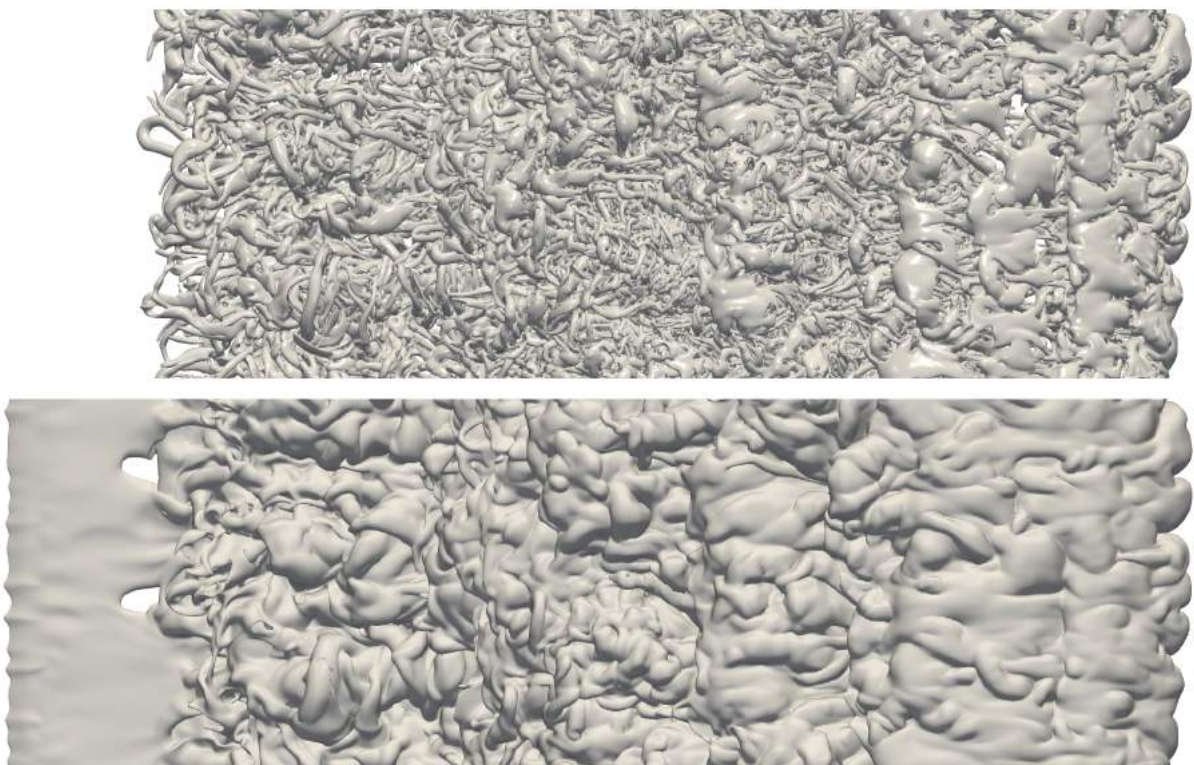


Figura 6.1. Iso-superfícies de critério-Q (com $Q = 0.5$, parte superior) e de concentração (com $c=0.05$, parte inferior) do A1 em $t=9$.

¹A precisão da representação numérica é normalmente: simples (7 dígitos decimais) ou dupla (15 dígitos decimais).

direta dos balanços de energia de DNS com o mesmo obtido via LES, sob os mesmos parâmetros de malha e passo de tempo, pode-se supor que o resíduo com relação a DNS seja a parcela da energia que foi dissipada pelo modelo. Pode-se perceber que os modelos explícitos estão dissipando muita energia, o que pode ser visto no balanço total, e como consequência a corrente avança a uma velocidade menor que a prevista pela DNS. Até entrar na chamada fase de escorregamento, na qual a corrente apresenta velocidade constante, todos os modelos reproduzem o resultado da DNS. Após esta fase, quando a corrente atinge a chamada fase inercial, regime tridimensional altamente dissipativo, o modelo ISVV apresenta melhor concordância.

Para comparar de uma maneira quantitativa a performance dos cálculos efetuados com os diversos modelos apresentados se faz necessária a obtenção de algumas grandezas globais sobre os resultados. A posição da frente da corrente em função do tempo, $x_f(t)$, é obtida por meio de uma varredura em um plano médio (na direção homogênea) da soma das frações de concentração de escalas (unitária no caso de corrente salina). A velocidade de avanço pode ser facilmente inferida na forma $u_f = d(x_f)/dt$. Estas estatísticas podem ser vistas nas Figura 6.2.a e Figura 6.2.b. O caso A2 consegue reproduzir com excelente correlação a evolução da frente com relação ao A1. A massa suspensa no domínio computacional, m_s , é obtida por meio da integração no volume de cálculo de todas as frações de escalar consideradas

$$m_s(t) = \int_{\Omega} c_t d\Omega. \quad (6.1)$$

Esta estatística, apresentada na Figura 6.2.e, é muito sensível aos erros numéricos e ao acúmulo de energia no cálculo.

A Figura 6.4. apresenta a evolução de isolinhas de 1.5% de concentração junto ao fundo do canal até o tempo final de simulação. A velocidade adimensional de fricção (ou de cisalhamento) na parede é de grande importância e pode ser utilizada, por exemplo, para computar perfis autossimilares de velocidade ou para estimar o potencial erosivo de um fluxo (NECKER et al., 2002). A mesma pode ser estimada em função da tensão de cisalhamento do escoamento junto à parede, na forma

$$u^* = \sqrt{\tau_w} \quad \text{com} \quad \tau_w = \frac{1}{Re} \sqrt{\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right)^2} \Big|_{x_2=0}. \quad (6.2)$$

A Figura 6.5. apresenta mapas de u^* sobre o fundo do canal. Percebe-se que o modelo ISVV (Fig. 6.5.b) resulta em um mapa mais próximo ao da DNS (Fig. 6.5.a). Os mapas resultantes dos modelos explícitos de SMAG (Fig. 6.5.c) e DSMAG (Fig. 6.5.d) dissipam muita energia perto da parede e geram estruturas mais grosseiras, de menor intensidade. O mapa do modelo WALE (Fig. 6.5.e), consegue reproduzir estruturas mais refinadas (como esperado pelo formalismo do modelo) entretanto com muito ruído.

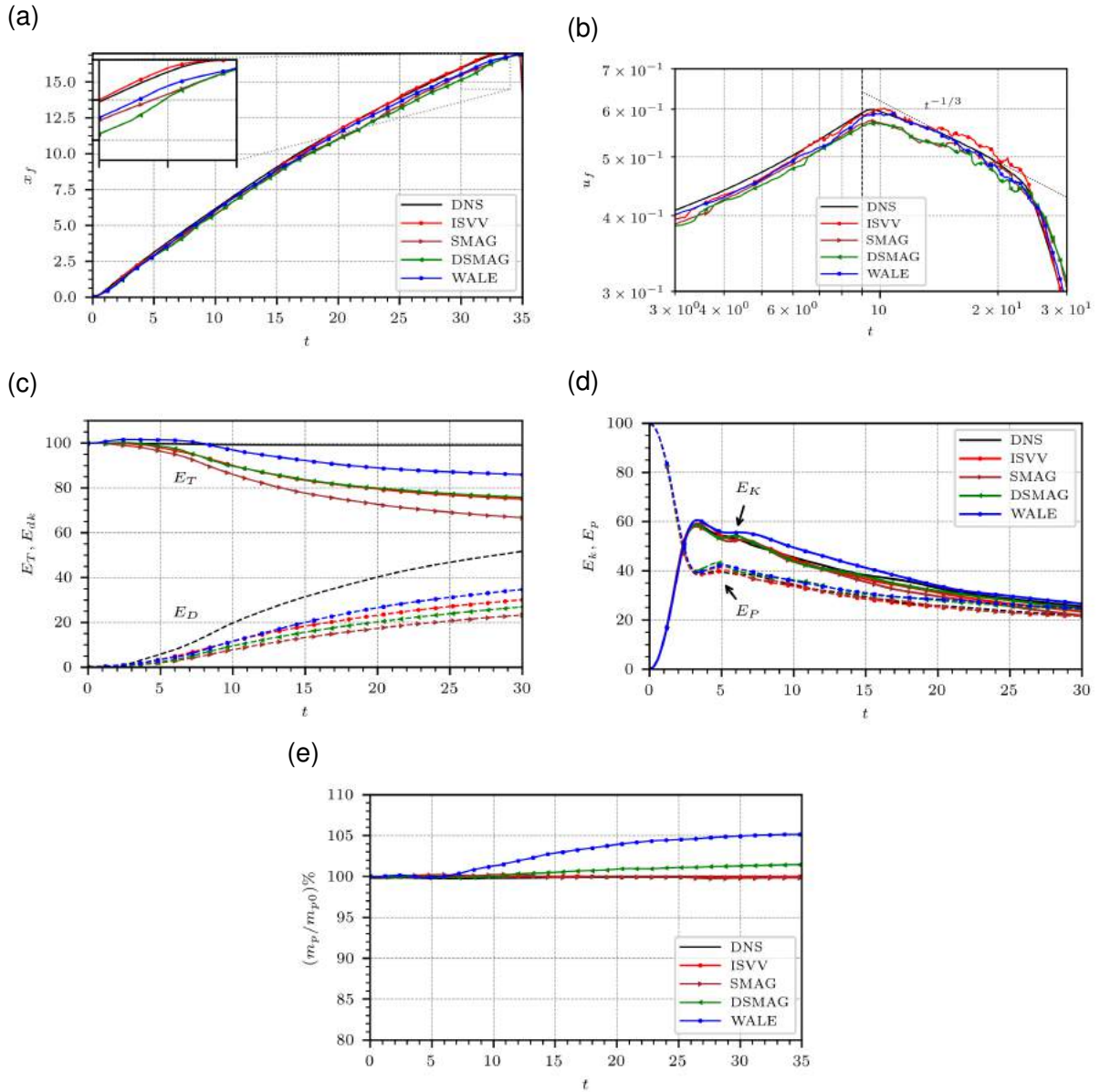


Figura 6.2. Resultado dos cálculos apresentados na Seção 6.1: (a) Evolução da posição da frente da corrente $x_f(t)$. (b) Evolução da velocidade de avanço da frente da corrente $u_f(t)$. (c) Evolução do balanço de energia de DNS. (d) Evolução da parcelas de energia cinética $E_k(t)$ e potencial $E_p(t)$. (d) Evolução da massa $m_p(t)$ normalizada pela massa inicial $m_p(t = 0)$.

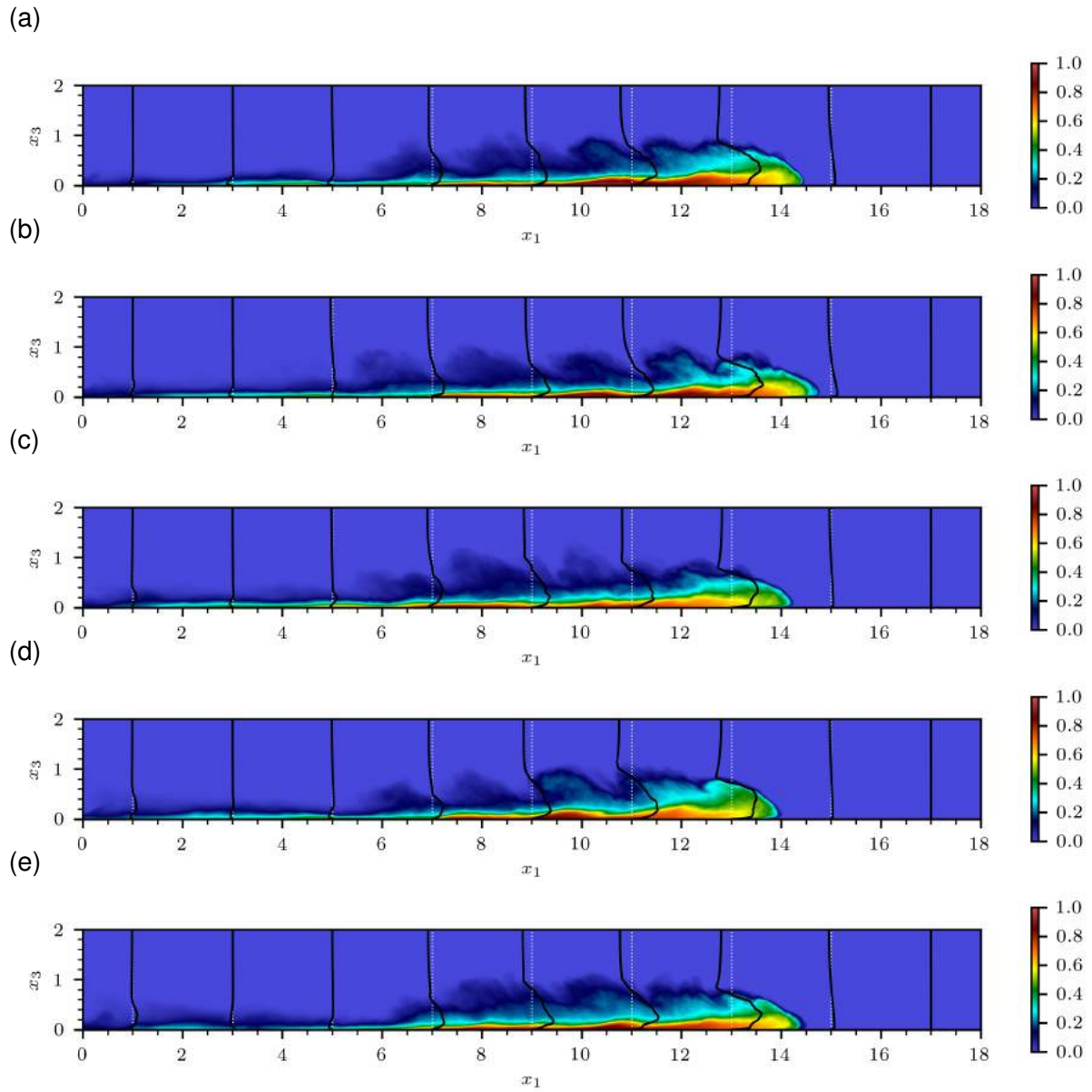


Figura 6.3. Campo de concentração médio em x_3 , com perfis de velocidade longitudinal em linha preta sólida, em $t = 12$: (a) DNS, (b) ISVV, (c) SMAG, (d) DSMAG, (e) WALE.

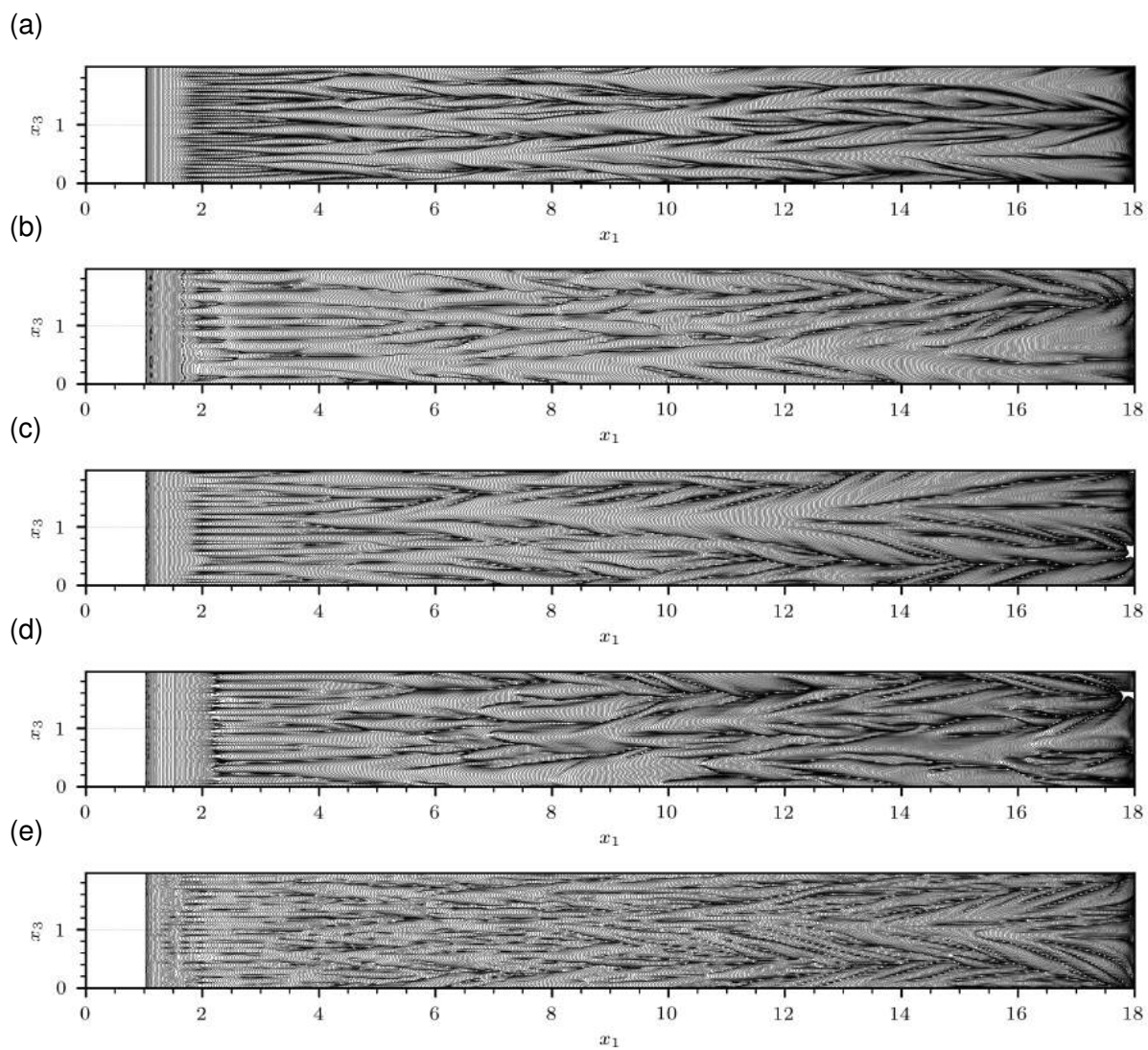


Figura 6.4. Evolução de isolinhas de concentração junto ao fundo do canal: (a) DNS, (b) ISVV, (c) SMAG, (d) DSMAG, (e) WALE.

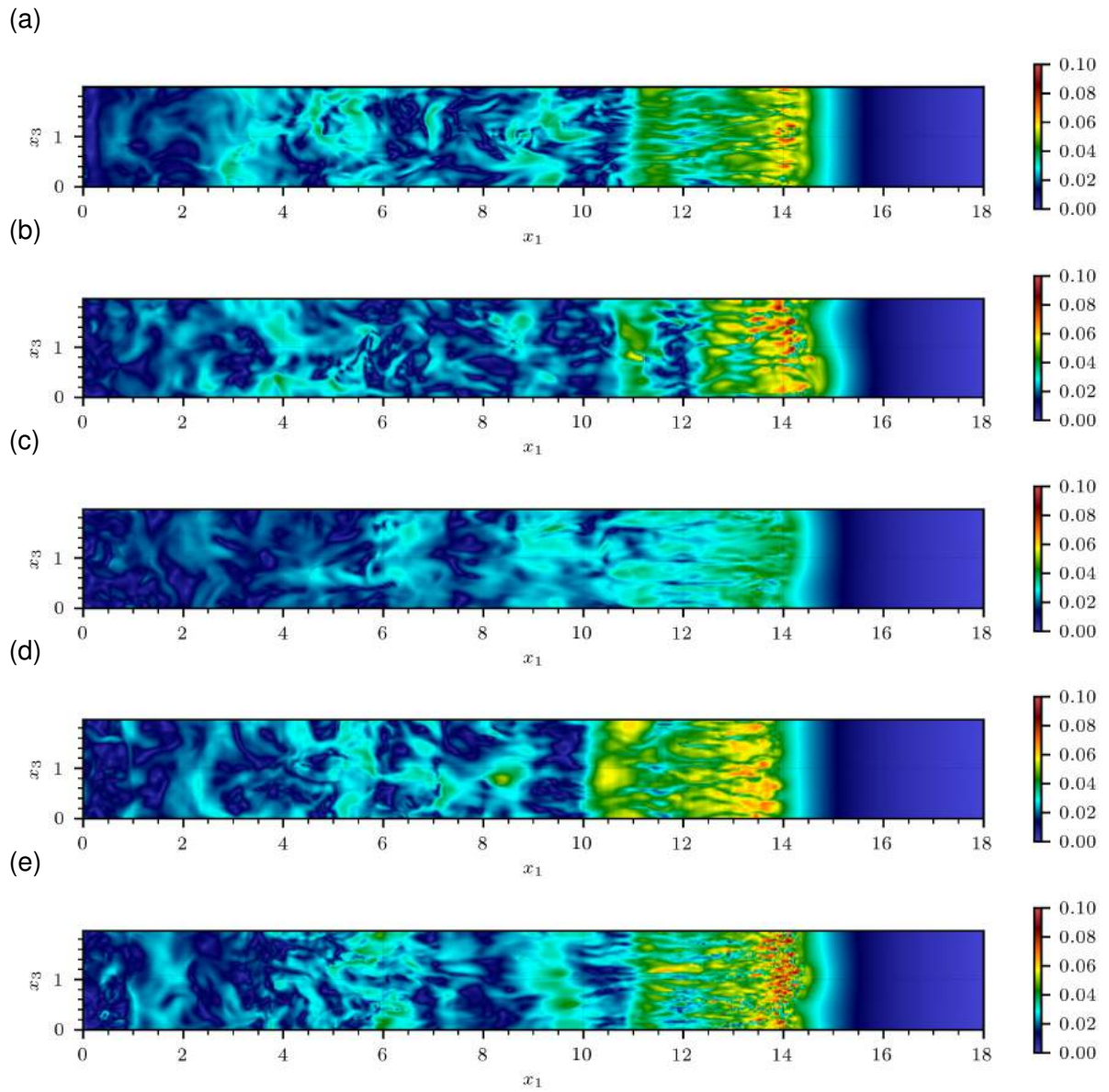


Figura 6.5. Mapa de velocidade de fricção junto ao fundo em $t = 24$: (a) DNS, (b) ISVV, (c) SMAG, (d) DSMAG, (e) WALE.

6.2. Comparação com experimentos

Nesta seção são exploradas LES com modelo ISVV que visam recriar experimentos disponíveis na literatura. A mesma é concisa e com o foco na comparação das estatísticas disponíveis com os resultados numéricos, com intenção de verificar a capacidade da metodologia ISVV de reproduzir os aspectos dinâmicos e morfológicos de correntes gravitacionais em diferentes configuração. Os casos apresentados possuem números de Reynolds impraticáveis via DNS com os recursos computacionais disponíveis. A escolha do modelo em questão justifica-se pela excelente correlação com DNS demonstrada na seção anterior, junto com o baixo custo computacional.

Os principais parâmetros dos cálculos estão sumarizados na Tabela 6.3. Todos correspondem a cálculos de LES em precisão simples, com modelo ISVV, e esquema O6LES para valores diferentes de n . O caso B1 representa o experimento S3 de Hallworth et al. (2001) que apresenta uma propagação axissimétrica. O mesmo é executado em um domínio reduzido (1/4 do experimental) com $L_1, L_2, L_3 = 14.2, 1.74, 14.2$, subdomínio de raio $r_0 = 2.18$ e altura $L_{2b} = 1$, $Re = 136.000$, $Ri = 1$ e $\gamma = 0.98$. A determinação da posição da frente da corrente é obtida por meio de um campo de concentrações médio na direção azimutal, obtida em coordenadas polares por meio de uma interpolação bilinear. A Figura 6.6.a compara a evolução da posição da frente obtida de forma experimental, por teoria de águas rasas e do caso B1. A Figura 6.6.b é apresentada para demonstrar a evolução radial do caso investigado, junto com um significativo refinamento das estruturas de lobos-e-fendas.

O B2 representa o experimento d14 de Rooij e Dalziel (2001) e é obtido em domínio $L_1, L_2, L_3 = 17, 2, 1.9$, com subdomínio $L_{1b}, L_2, L_3 = 1, 2, 1.9$, a $Re = 16.700$, $Ri = 0.5$ e $u_s = 0.013$. A Figura 6.7.a compara a evolução da posição da frente com um único valor de posição da frente experimental, inferido por meio do artigo de referência

Tabela 6.3. Parâmetros numéricos de simulação.

Cálculo	Re	n_1, n_2, n_3	Δt	n	Custo [†]
B1 ¹	136.000	701, 201, 701	3×10^{-4}	1000	1100/384
B2 ²	16.700	769, 193, 64	4×10^{-4}	180	280/144
B3 ³	34.800	1921, 257, 64	3×10^{-4}	100	1200/192
B4 ⁴	10.000	385, 193, 385	5×10^{-4}	40	900/144
B5	1.000.000	2305, 513, 192	3×10^{-4}	2000	2200/576

[†] Tempo [min] / Número de processadores utilizados;

¹ Similar ao exp. S3 monodisperso conservativo de Hallworth et al. (2001);

² Similar ao exp. d14 monodisperso não-conservativo de Rooij e Dalziel (2001);

³ Similar ao exp. D polidisperso não-conservativo de Gladstone et al. (1998);

⁴ Similar ao caso REY10K2 monodisperso não-conservativo de Francisco et al. (2018).

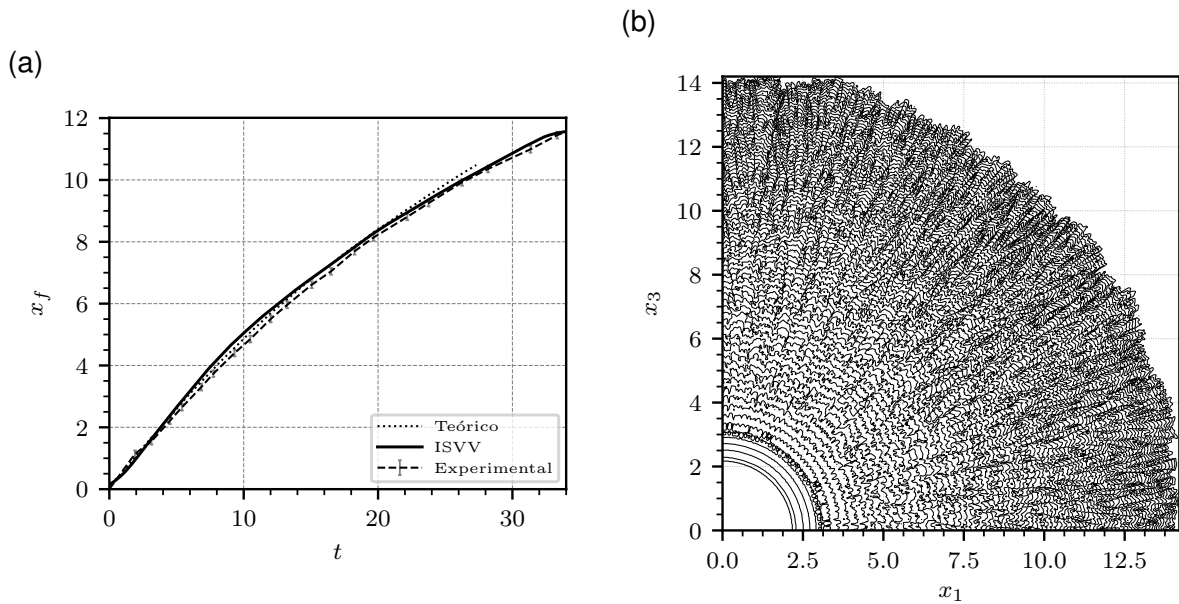


Figura 6.6. Resultados do caso B1: (a) Posição da frente $x_f(t)$. (b) Isolinhas de concentração junto ao fundo.

(Fig. 3 de Rooij e Dalziel (2001, p. 209)). A Figura 6.7.b compara o depósito final da simulação com o do experimento e apresenta boa correlação, com exceção dos tempos iniciais. Atribui-se a diferença na região inicial das curvas à recirculação gerada ao retirar-se a placa separadora, efeito não recriado na simulação.

O B3 corresponde ao experimento D de Gladstone et al. (1998). O mesmo é bidisperso, ou seja, composto por duas frações de sedimentos: 50% fino (com $u_{s, fino} = 0.003$) e 50% grosso (com $u_{s, grosso} = 0.02$), e necessita de um domínio de cálculo de $L_1, L_2, L_3 = 25.8, 2, 1$, com subdomínio $L_{1b}, L_{2b}, L_{3b} = 1, 2, 1$, $Re = 34.850$ e $Ri = 1$. A simulação com modelo ISVV consegue reproduzir a estatística de evolução da posição da frente da corrente obtida de forma experimental.

O B4 foi desenvolvido em domínio aberto e visa reproduzir uma corrente em transição canal-bacia e recria os casos desenvolvidos em domínio fechado, com o uso do método de fronteira imersa (IBM). O resultado apresenta uma drástica redução de custo e consegue reproduzir as complexas estruturas de depósito junto ao fundo. Considerou-se $Re = 10.000$ em domínio $L_1, L_2, L_3 = 12, 2, 12$ equivalente ao caso REY10K2 de Francisco et al. (2018) que pode ser visto na Figura 6.9.b (reproduzida para facilitar a comparação). O caso B4 que apresenta entrada e saída de fluido, e por tal motivo, não necessita o uso de IBM. O caso B4 pode ser visto na Figura 6.9.a Em uma rápida comparação visual entre os resultados, que a LES consegue reproduzir as estruturas de lobos com ordem de grandeza semelhante às da DNS, mesmo com as correntes apresentando desenvolvimentos distintos em função das condições iniciais. O B5 não possui relação direta com algum experimento em específico. O mesmo foi

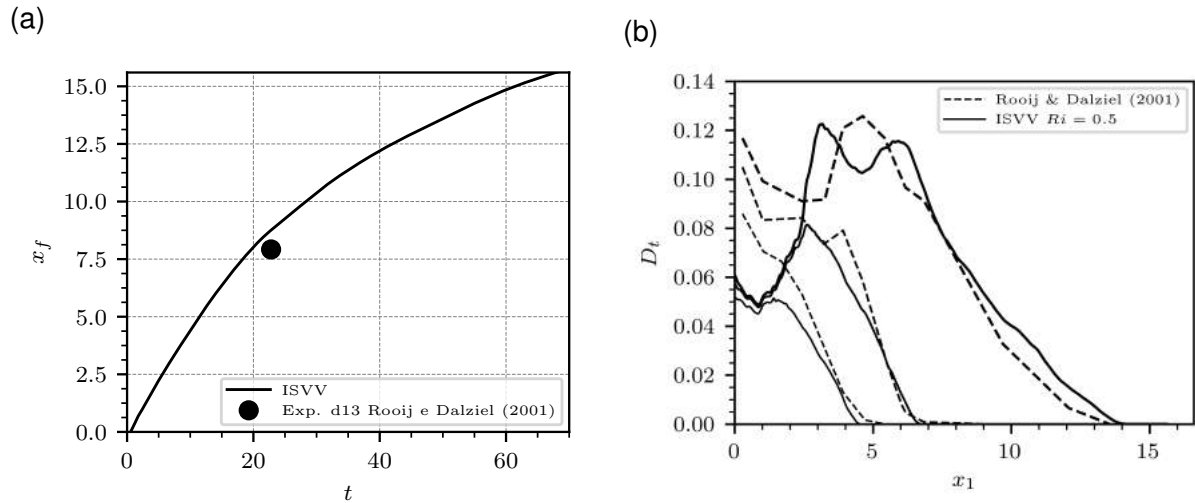


Figura 6.7. Resultados do Caso d14: (a) Posição da frente $x_f(t)$. (b) Perfis de depósito comparando diferentes tempos de simulação com tempos $t = 7.3, 11, 60$ do experimento.

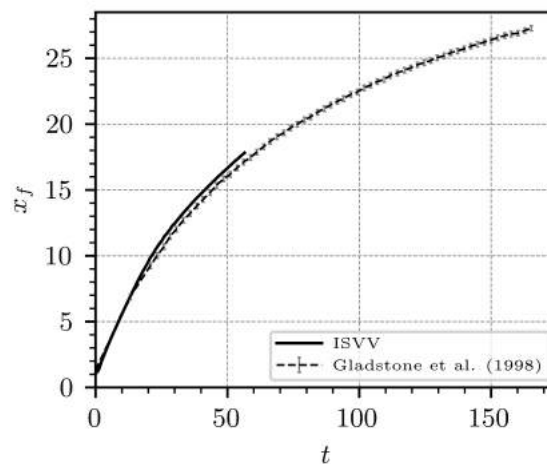


Figura 6.8. Resultados de posição da frente $x_f(t)$ do cálculo B3. Comparação entre o resultado obtido e a curva experimental.

executado para verificar se o modelo implícito tem capacidade para simular correntes com $Re = O(10^6)$, como pode ser visto na Fig. 6.10.b, que apresenta o resultado com uma corrente bem desenvolvida, sem acúmulo de energia no campo de concentração. A malha de cálculo considerada foi a do A1 (Fig. 6.10.a).

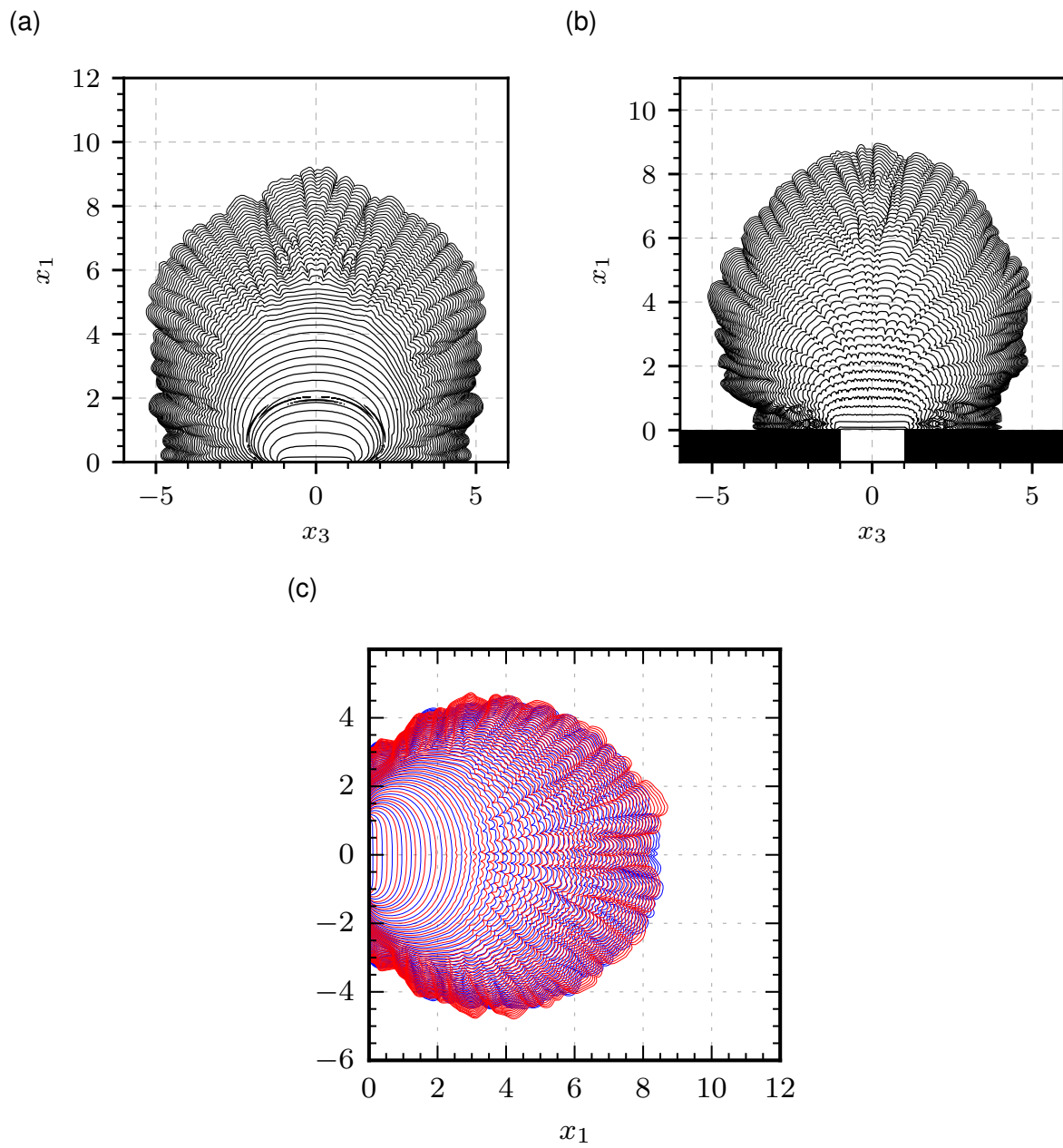


Figura 6.9. Resultados do Caso B4: Evolução de isolinhas de 1.5% de concentração no fundo para $t = 20$. (a) LES em domínio aberto. (b) DNS em domínio fechado. Fonte: Reproduzido de Francisco et al. (2018). (c) Sobreposição de isolinhas para DNS (em vermelho) e LES (em preto) em domínio aberto.

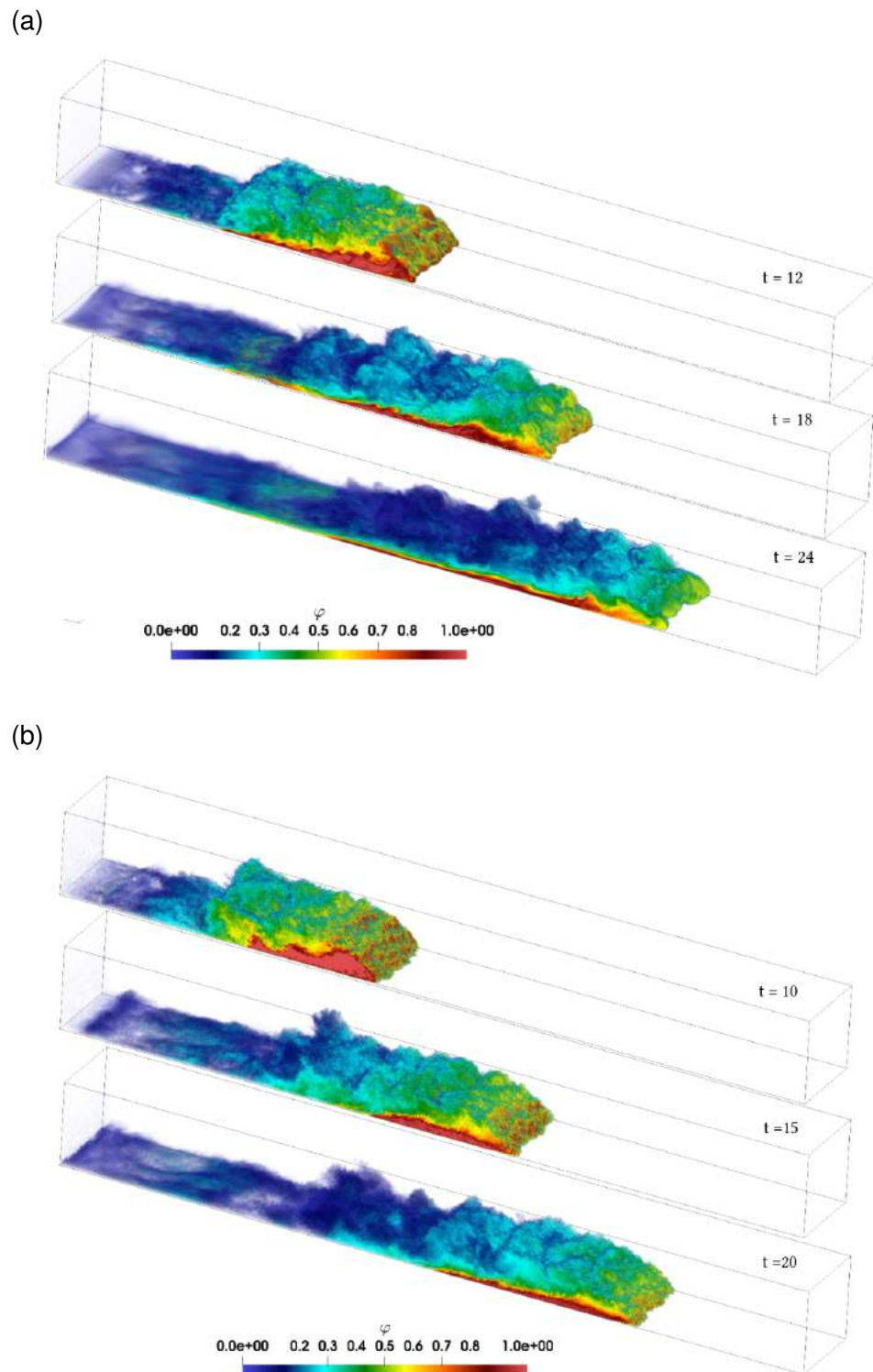


Figura 6.10. Evolução do campo de concentração salina para os casos (a) DNS a $Re = 10^4$ e (b) LES com ISVV a $Re = 10^6$. Ambos efetuados com a mesma malha de cálculo A1. LES possibilita um incremento de duas vezes na ordem de grandeza do número de Reynolds da simulação.

7. CONCLUSÕES

Esta dissertação apresenta uma comparação entre simulações de grandes escalas e simulação numérica direta. A Seção 6.1 dos resultados compara o desempenho de quatro modelos de LES: ISVV, Smagorinsky, dinâmico Smagorinsky e WALE. Percebe-se que a metodologia de LES com o modelo ISVV é capaz de produzir uma aproximação mais realística, tanto perto da parede (visto por meio do mapa de velocidade de fricção, Fig. 6.4.) quanto nas estatísticas de posição e velocidade da frente. O desempenho inferior dos modelos explícitos pode ser atribuído ao fato de que os mesmos foram desenvolvidos para turbulência homogênea e isotrópica em escoamentos e por isso, é aceitável que não consigam reproduzir a DNS de um fluxo transicional, altamente anisotrópico.

Já na Seção 6.2, cálculos LES com o uso do modelo ISVV, efetuados com o conjunto de coeficientes O6LES, conseguem reproduzir experimentos realizados em laboratório. Como pode ser visto, nos casos B1, B2 e B3 que reproduzem curvas de posição da frente muito próximas às obtidas de forma experimental. O caso em bacia B4, produzido em domínio aberto, consegue captar formas de fundo análogas às obtidas por DNS. O escoamento resultante apresenta complexidade adicional já que o não-confinamento permite um grau de liberdade extra ao escoamento resultante, se comparado aos casos confinados em canais, não sendo mais possível fazer médias. Esta restrição já impossibilita o uso do modelo dinâmico, por exemplo.

A escolha do valor das constantes dos modelos é uma dificuldade nas duas abordagens LES. Em ISVV, por exemplo, não há uma fundamentação teórica para o valor de n (com exceção do caso particular, demonstrado por Dairay et al. (2017), do problema TGV), se fazendo necessária o uso da tentativa e erro. O mesmo se dá para os modelos explícitos, tanto para o valor dos coeficientes C_S e C_W , quanto para o valor máximo permitido para C_D .

O balanço de massa é a estatística mais sensível aos erros numéricos introduzidos pelos modelos de submalha, condições de contorno e parâmetros de simulação. De maneira geral, quando as derivadas de segunda ordem do sistema de equações são avaliadas por esquemas numéricos com comportamento sob-dissipativo (modelo ISVV) o resultado da simulação se aproxima à DNS. Juntamente com a significativa

redução do custo das simulações aportada pela redução do número de pontos associada a não adição de cálculos extras devido ao modelo estar embutido junto ao comportamento das derivadas. A técnica também reproduz estatísticas de casos laboratoriais, em diferentes configurações de escoamento, com elevados números de Reynolds. Por tais motivos, LES baseadas no modelo ISVV apresentam o melhor custo benefício, se comparado com os modelos clássicos disponíveis na literatura. A modelagem matemática computacional se mostra capaz de reproduzir as estatísticas de modelagem física baseadas em estudos experimentais.

8. PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS

A partir desta Dissertação, pode-se sugerir o desenvolvimentos em pesquisas futuras dos seguintes temas:

- Obter o balanço de massa para casos não-conservativos e com entrada e saída de fluido.
- Desenvolver e implementar metodologia para estimar a eficiência de mistura da corrente e verificar se a ISVV consegue reproduzir as estatísticas de DNS;
- Permitir a variação da viscosidade do fluido e velocidade de sedimentação em função da concentração;
- Considerar a estratificação (por temperatura ou salinidade) do fluido ambiente;
- Implementar no código **Incompact3d** uma malha específica para o campo escalar e um valor de n específico para os esquemas de derivada segunda do mesmo (e.g., O6LES-C), de forma a possibilitar a simulação de escoamentos com $Sc > 1$;

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDRIEUX, O.; COOPER, C. K.; WOOD, J. et al. Turbidity current measurements in the congo canyon. In: OFFSHORE TECHNOLOGY CONFERENCE. **Offshore Technology Conference**. [S.l.], 2013.
- BATES, C. C. Rational theory of delta formation. **AAPG Bulletin**, American Association of Petroleum Geologists, v. 37, n. 9, p. 2119–2162, 1953.
- BIEGERT, E.; VOWINCKEL, B.; OUILLON, R.; MEIBURG, E. High-resolution simulations of turbidity currents. **Progress in Earth and Planetary Science**, Springer, v. 4, n. 1, p. 33, 2017.
- BIRMAN, V.; MARTIN, J.; MEIBURG, E. The non-boussinesq lock-exchange problem. part 2. high-resolution simulations. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 537, p. 125–144, 2005.
- BIRMAN, V.; MEIBURG, E. High-resolution simulations of gravity currents. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, SciELO Brasil, v. 28, n. 2, p. 169–173, 2006.
- BONOMETTI, T.; BALACHANDAR, S. Effect of schmidt number on the structure and propagation of density currents. **Theoretical and Computational Fluid Dynamics**, Springer, v. 22, n. 5, p. 341, 2008.
- BORIS, J.; GRINSTEIN, F.; ORAN, E.; KOLBE, R. New insights into large eddy simulation. **Fluid dynamics research**, Elsevier, v. 10, n. 4-6, p. 199–228, 1992.
- BRANNEY, M. J.; KOKELAAR, B. P. Pyroclastic density currents and the sedimentation of ignimbrites. In: GEOLOGICAL SOCIETY OF LONDON. [S.l.], 2002.
- CANTERO, M. I.; BALACHANDAR, S.; GARCÍA, M. H.; BOCK, D. Turbulent structures in planar gravity currents and their influence on the flow dynamics. **Journal of Geophysical Research: Oceans**, Wiley Online Library, v. 113, n. C8, 2008.
- CHORIN, A. J. Numerical solution of the navier-stokes equations. **Mathematics of computation**, v. 22, n. 104, p. 745–762, 1968.
- CONSTANTINESCU, G. Les of lock-exchange compositional gravity currents: a brief review of some recent results. **Environmental Fluid Mechanics**, Springer, v. 14, n. 2, p. 295–317, 2014.
- DAIRAY, T.; FORTUNÉ, V.; LAMBALLAIS, E.; BRIZZI, L.-E. Direct numerical simulation of a turbulent jet impinging on a heated wall. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 764, p. 362–394, 2015.

DAIRAY, T.; LAMBALLAIS, E.; LAIZET, S.; VASSILICOS, J. C. Numerical dissipation vs. subgrid-scale modelling for large eddy simulation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 337, p. 252–274, 2017.

DUBIEF, Y.; DELCAYRE, F. On coherent-vortex identification in turbulence. **Journal of turbulence**, Taylor & Francis, v. 1, n. 1, p. 011–011, 2000.

DUCROS, F.; NICOUD, F.; POINSOT, T. **Wall-adapting local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries**. [S.l.]: Oxford University Computing Laboratory, Oxford, UK, 1998. 293–299 p.

ESCOBAR, H. Mud tsunami wreaks ecological havoc in Brazil. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 350, n. 6265, p. 1138–1139, 2015. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/350/6265/1138>>.

ESPATH, L.; PINTO, L.; LAIZET, S.; SILVESTRINI, J. Two- and three-dimensional direct numerical simulation of particle-laden gravity currents. **Computers & Geosciences**, Elsevier, v. 63, p. 9–16, 2014.

ESPATH, L. F. R.; PINTO, L. C.; LAIZET, S.; SILVESTRINI, J. H. Two- and three-dimensional direct numerical simulation of particle-laden gravity currents. **Computers and Geosciences**, v. 63, p. 9–16, 2013.

FERGUSON, R.; CHURCH, M. A simple universal equation for grain settling velocity. **Journal of sedimentary Research**, Society for Sedimentary Geology, v. 74, n. 6, p. 933–937, 2004.

FRANCISCO, E.; ESPATH, L.; LAIZET, S.; SILVESTRINI, J. Reynolds number and settling velocity influence for finite-release particle-laden gravity currents in a basin. **Computers & Geosciences**, Elsevier, v. 110, p. 1–9, 2018.

FRANCISCO, E. P. **Modelagem matemática e Simulação Numérica Direta de correntes de gravidade poli-dispersas**. Dissertação (Mestrado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, PUCRS, Porto Alegre, Abril 2014.

FRANCISCO, E. P.; ESPATH, L.; SILVESTRINI, J. Direct numerical simulation of bi-disperse particle-laden gravity currents in the channel configuration. **Applied Mathematical Modelling**, Elsevier, 2017.

GERMANO, M. Averaging invariance of the turbulent equations and similar subgrid scale modeling. **CTR Manuscript**, v. 116, 1990.

GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. **Physics of Fluids A: Fluid Dynamics**, AIP, v. 3, n. 7, p. 1760–1765, 1991.

GLADSTONE, C.; PHILLIPS, J. C.; SPARKS, R. S. J. Experimentation on bidisperse, constant-volume gravity currents: propagation and sediment deposition. **Sedimentology**, v. 46, p. 833–843, 1998.

HALLWORTH, M. A.; HUPPERT, H. E.; UNGARISH, M. Axisymmetric gravity currents in a rotating system: experimental and numerical investigations. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 447, p. 1–29, 2001.

HAMPTON, J.; MOORE, P.; THOMAS, H. Subjective probability and its measurement. **Journal of the Royal Statistical Society. Series A (General)**, JSTOR, p. 21–42, 1973.

HÄRTEL, C.; CARLSSON, F.; THUNBLOM, M. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. part 2. the lobe-and-cleft instability. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 418, p. 213–229, 2000.

HÄRTEL, C.; MEIBURG, E.; NECKER, F. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. part 1. flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 418, p. 189–212, 2000.

HEEZEN, B.; MENZIES, R.; SCHNEIDER, E.; EWING, W.; GRANELLI, N. Congo submarine canyon. **AAPG bulletin**, American Association of Petroleum Geologists, v. 48, n. 7, p. 1126–1149, 1964.

HOGG, A. J.; NASR-AZADANI, M. M.; UNGARISH, M.; MEIBURG, E. Sustained gravity currents in a channel. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge Univ Press, v. 798, p. 853–888, 2016.

JIMÉNEZ, J. **An introduction to turbulence**. 2002. 141 p.

JULIEN, P. **Erosion and Sedimentation**. Cambridge University Press, 2010. ISBN 9781139486965. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=Gv72uiVmWEYC>>.

KÁRMÁN, T. von. The engineer grapples with nonlinear problems. **Bulletin of the American Mathematical Society**, v. 46, p. 615–683, 1940.

KHRIPOUNOFF, A.; VANGRIESHEIM, A.; BABONNEAU, N.; CRASSOUS, P.; DENNIELOU, B.; SAVOYE, B. Direct observation of intense turbidity current activity in the zaire submarine valley at 4000 m water depth. **Marine Geology**, Elsevier, v. 194, n. 3-4, p. 151–158, 2003.

KNELLER, B.; BUCKEE, C. The structure and fluid mechanics of turbidity currents: a review of some recent studies and their geological implications. **Sedimentology**, v. 47, p. 62–94, 2000.

KNELLER, B.; NASR-AZADANI, M. M.; RADHAKRISHNAN, S.; MEIBURG, E. Long-range sediment transport in the world's oceans by stably stratified turbidity currents. **Journal of Geophysical Research: Oceans**, Wiley Online Library, v. 121, n. 12, p. 8608–8620, 2016.

KOLMOGOROV, A. N. Dissipation of energy in locally isotropic turbulence. In: **Dokl. Akad. Nauk SSSR**. [S.l.: s.n.], 1941. v. 32, n. 1, p. 16–18.

KOLMOGOROV, A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In: **Dokl. Akad. Nauk SSSR**. [S.l.: s.n.], 1941. v. 30, n. 4, p. 299–303.

KOLMOGOROV, A. N. On the degeneration of isotropic turbulence in an incompressible viscous fluid. In: **Dokl. Akad. Nauk SSSR**. [S.l.: s.n.], 1941. v. 31, p. 319–323.

- KRAVCHENKO, A.; MOIN, P. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 131, n. 2, p. 310–322, 1997.
- LAIZET, S.; LAMBALLAIS, E. High-order compact schemes for incompressible flows: A simple and efficient method with quasi-spectral accuracy. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 228, n. 16, p. 5989–6015, 2009.
- LAMBALLAIS, E.; FORTUNÉ, V.; LAIZET, S. Straightforward high-order numerical dissipation via the viscous term for direct and large eddy simulation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 230, n. 9, p. 3270–3275, 2011.
- LE, H.; MOIN, P.; KIM, J. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. **Journal of fluid mechanics**, v. 330, n. 1, p. 349–374, 1997.
- LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. **Journal of Computational Physics**, v. 103, n. 1, p. 16–42, 1992.
- LEONARD, A. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. **Advances in geophysics**, Elsevier, v. 18, p. 237–248, 1975.
- LESIEUR, M. Introduction to turbulence in fluid mechanics. **Turbulence in Fluids: Fourth Revised and Enlarged Edition**, Springer, p. 1–23, 2008.
- LI, N.; LAIZET, S. 2decomp & fft-a highly scalable 2d decomposition library and fft interface. In: **Cray User Group 2010 conference**. [S.l.: s.n.], 2010. p. 1–13.
- LILLY, D. K. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. **Physics of Fluids A: Fluid Dynamics**, AIP, v. 4, n. 3, p. 633–635, 1992.
- LOWE, R. J.; ROTTMAN, J. W.; LINDEN, P. The non-boussinesq lock-exchange problem. part 1. theory and experiments. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 537, p. 101–124, 2005.
- MA, J.; WANG, F.; TANG, X. Comparison of several subgrid-scale models for large-eddy simulation of turbulent flows in water turbine. In: **Fluid Machinery and Fluid Mechanics**. [S.l.]: Springer, 2009. p. 328–334.
- MANICA, R. **Geração de Correntes de Turbidez de Alta Densidade: Condicionantes Hidráulicos e Depositionais**. Tese (Doutorado) — Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.
- MARTA-ALMEIDA, M.; MENDES, R.; AMORIM, F. N.; CIRANO, M.; DIAS, J. M. Fundão dam collapse: Oceanic dispersion of river doce after the greatest brazilian environmental accident. **Marine Pollution Bulletin**, v. 112, n. 1–2, p. 359 – 364, 2016. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0025326X16306038>>.
- MCELWAINE, J.; PATTERSON, M.; DALZIEL, S. Lobe and cleft formation at the head of a gravity current. In: **Proceedings of the XXI International Congress of Theoretical and Applied Mechanics**. [S.l.: s.n.], 2004. p. 15–21.
- MEIBURG, E.; KNELLER, B. Turbidity currents and their deposits. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Annual Reviews, v. 42, p. 135–156, 2010.

MEIBURG, E.; MCELWAINE, J.; KNELLER, B. Turbidity currents and powder snow avalanches. In: **Handbook of Environmental Fluid Dynamics: Volume One: Overview and Fundamentals**. [S.l.]: Taylor & Francis, 2012.

MIDDLETON, G. V. Experiments on density and turbidity currents: lii. deposition of sediment. **Canadian Journal of Earth Sciences**, NRC Research Press, v. 4, n. 3, p. 475–505, 1967.

MILLIKAN, R. Stokes' law of fall completely corrected. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 9, n. 3, p. 67–70, 1923.

MOIN, P. **Fundamentals of Engineering Numerical Analysis**. Cambridge University Press, 2010. ISBN 9780521711234. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=uvpwKK7ZVwMC>>.

MOIN, P.; MAHESH, K. Direct numerical simulation: a tool in turbulence research. **Annual review of fluid mechanics**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 30, n. 1, p. 539–578, 1998.

MOIN, P.; SQUIRES, K.; CABOT, W.; LEE, S. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. **Physics of Fluids A: Fluid Dynamics**, AIP, v. 3, n. 11, p. 2746–2757, 1991.

MULDER, T.; ALEXANDER, J. The physical character of subaqueous sedimentary density flows and their deposits. **Sedimentology**, Wiley Online Library, v. 48, n. 2, p. 269–299, 2001.

MULDER, T.; SYVITSKI, J. P. Turbidity currents generated at river mouths during exceptional discharges to the world oceans. **The Journal of Geology**, University of Chicago Press, v. 103, n. 3, p. 285–299, 1995.

NAVIER, C. Memoir on the laws of fluid motion. **Mem., acad. sci.(Paris)**, v. 6, p. 389, 1827.

NECKER, F.; HÄRTEL, C.; KLEISER, L.; MEIBURG, E. High-resolution simulations of particle-driven gravity currents. **International Journal of Multiphase Flow**, Elsevier, v. 28, n. 2, p. 279–300, 2002.

NECKER, F.; HÄRTEL, C.; KLEISER, L.; MEIBURG, E. Mixing and dissipation in particle-driven gravity currents. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 545, p. 339–372, 2005.

NICOUD, F.; DUCROS, F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. **Flow, turbulence and Combustion**, Springer, v. 62, n. 3, p. 183–200, 1999.

OL'SHANSKII, M.; STAROVEROV, V. M. On simulation of outflow boundary conditions in finite difference calculations for incompressible fluid. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 33, n. 4, p. 499–534, 2000.

OOI, S. K.; , G. ; WEBER, L. Numerical simulations of lock-exchange compositional gravity current. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 635, p. 361–388, 2009.

OOI, S. K.; CONSTANTINESCU, G.; WEBER, L. J. 2d large-eddy simulation of lock-exchange gravity current flows at high grashof numbers. **Journal of Hydraulic Engineering**, American Society of Civil Engineers, v. 133, n. 9, p. 1037–1047, 2007.

PARSONS, J. D.; BUSH, J. W.; SYVITSKI, J. P. Hyperpycnal plume formation from riverine outflows with small sediment concentrations. **Sedimentology**, Wiley Online Library, v. 48, n. 2, p. 465–478, 2001.

PAULL, C.; USSLER, W.; GREENE, H.; KEATEN, R.; MITTS, P.; BARRY, J. Caught in the act: the 20 december 2001 gravity flow event in monterey canyon. **Geo-Marine Letters**, Springer, v. 22, n. 4, p. 227–232, 2002.

PIPER, D. J.; COCHONAT, P.; MORRISON, M. L. The sequence of events around the epicentre of the 1929 grand banks earthquake: initiation of debris flows and turbidity current inferred from sidescan sonar. **Sedimentology**, Wiley Online Library, v. 46, n. 1, p. 79–97, 1999.

POPE, S. **Turbulent Flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780521598866.

RAFEI, M. E.; KÖNÖZSY, L.; RANA, Z. Investigation of numerical dissipation in classical and implicit large eddy simulations. **Aerospace**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 4, n. 4, p. 59, 2017.

RICHARDSON, L. **Weather prediction by numerical process (Cambridge U. Press)**. [S.l.]: Dover Publications edition (1965) New York, 1922.

ROOIJ, F. D.; DALZIEL, S. Time-and space-resolved measurements of deposition under turbidity currents. **Particulate Gravity Currents, Wiley, New York**, p. 207–215, 2001.

SAGAUT, P. **Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006.

SCHUCH, F. N. **Análise de pluma hiperpicnal poli-dispersa por Simulação Numérica Direta**. Dissertação (Mestrado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, PUCRS, Porto Alegre, Março 2016.

SHER, D.; WOODS, A. W. Gravity currents: entrainment, stratification and self-similarity. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 784, p. 130–162, 2015.

SHIN, J.; DALZIEL, S.; LINDEN, P. Gravity currents produced by lock exchange. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 521, p. 1–34, 2004.

SIMPSON, J. **Gravity Currents: In the Environment and the Laboratory**. Cambridge University Press, 1999. (In the Environment and the Lab). ISBN 9780521664011. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=2HhBMYBZe-oC>>.

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. **Monthly weather review**, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963.

STEEL, E.; BUTTLES, J.; SIMMS, A. R.; MOHRIG, D.; MEIBURG, E. The role of buoyancy reversal in turbidite deposition and submarine fan geometry. **Geology**, v. 45, n. 1, p. 35, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1130/G38446.1>>.

STOKES, G. G. Stokes, trans. Cambridge Philos. Soc. 8, 287 (1845). **Trans. Cambridge Philos. Soc.**, v. 8, p. 287, 1845.

TALLING, P.; WYNN, R.; MASSON, D.; FRENZ, M.; CRONIN, B.; SCHIEBEL, R.; AKHMETZHANOV, A.; DALLMEIER-TIESSEN, S.; BENETTI, S.; WEAVER, P. et al. Onset of submarine debris flow deposition far from original giant landslide. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 450, n. 7169, p. 541, 2007.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L. **A first course in turbulence**. [S.l.]: MIT press, 1972.

TSINOBER, A. **An informal conceptual introduction to turbulence**. [S.l.]: Springer, 2009.

UNGARISH, M. **An Introduction to Gravity Currents and Intrusions**. CRC Press, 2009. ISBN 9781584889045. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=tM_44bTSCUQC>.

WINTERS, K. B.; LOMBARD, P. N.; RILEY, J. J.; D'ASARO, E. A. Available potential energy and mixing in density-stratified fluids. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 289, p. 115–128, 1995.

XU, J.; NOBLE, M.; ROSENFELD, L. K. In-situ measurements of velocity structure within turbidity currents. **Geophysical Research Letters**, Wiley Online Library, v. 31, n. 9, 2004.

YEUNG, P.; XU, S.; DONZIS, D.; SREENIVASAN, K. Simulations of three-dimensional turbulent mixing for schmidt numbers of the order 1000. **Flow, turbulence and combustion**, Springer, v. 72, n. 2, p. 333–347, 2004.

APÊNDICES

A. Balanço de energia para DNS

Espath et al. (2014), baseados nos estudos de Winters et al. (1995) e Necker et al. (2005), extraem um balanço de energia completo a partir das equações governantes para DNS, sem hipóteses sobre os termos de dissipação, em domínios fechados. Propõe-se a divisão da energia total do sistema em parcelas de energia cinética e potencial, além da dissipação associada com a taxa de deformação do movimento advectivo macroscópico e da difusão e dissipação microscópica do escoamento de Stokes em torno das partículas (se $u_s^\ell \neq 0$).

Ao integrar-se, sobre todo o domínio computacional, o produto escalar da velocidade u_i pela equação de quantidade de movimento (Equação 4.2b) e ao retomar-se o teorema de Gauss (a integral de um campo divergente sobre todo o domínio é equivalente a zero pois não há transporte através das fronteiras), tem-se

$$E_k(t) = \int_{\Omega} \frac{u_i u_i}{2} d\Omega, \quad (\text{A.1})$$

representando o termo de energia cinética e a macrodissipação associada ao escoamento médio

$$E_{dk}(t) = \int_{t=0}^t \int_{\Omega} \frac{2}{Re} S_{ij} S_{ij} d\Omega dt, \quad (\text{A.2})$$

e o termo de energia potencial

$$E_p(t) = \int_{\Omega} c_t x_2 d\Omega. \quad (\text{A.3})$$

De forma análoga, pode-se fazer o produto escalar do campo de concentração c_ℓ pela equação do transporte (Equação 4.2c), utilizado novamente o teorema de Gauss, obtêm-se a parcela de microdissipação de cada fração

$$E_{dp_\ell}(t) = \int_{t=0}^t \int_{\Omega} \left(\frac{1}{Sc_\ell Re} x_2 \nabla^2 c_\ell + x_2 u_\ell^s \frac{\partial c_\ell}{\partial x_2} \right) d\Omega dt. \quad (\text{A.4})$$

A energia total do sistema é aproximada pela soma das componentes normalizadas pela energia inicial

$$E_T(t) = \frac{E_k + E_{dk} + E_p + \sum E_{dp_\ell}}{E_p(t=0) + E_k(t=0)} \equiv 1. \quad (\text{A.5})$$

B. Equação do número de onda modificado

B.1. Derivada de primeira ordem

Seja o esquema geral de diferenças finitas centradas

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6h}. \quad (\text{B.1})$$

Pode-se particularizá-lo considerando $f(x_j) = e^{ikhj} = f_j$ e $f'(x_j) = ik' f_j = ik' e^{ikhj} = f'_j$

$$\begin{aligned} \beta ik' e^{ikh(j-2)} + \alpha ik' e^{ikh(j-1)} + ik' e^{ikh(j)} + \alpha ik' e^{ikh(j+1)} + \beta ik' e^{ikh(j+2)} = \\ a \frac{e^{ikh(j+1)} - e^{ikh(j-1)}}{2h} + b \frac{e^{ikh(j+2)} - e^{ikh(j-2)}}{4h} + c \frac{e^{ikh(j+3)} - e^{ikh(j-3)}}{6h}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} ik' (\beta e^{ikh(j-2)} + \alpha e^{ikh(j-1)} + e^{ikh(j)} + \alpha e^{ikh(j+1)} + \beta e^{ikh(j+2)}) = \\ a \frac{e^{ikh} - e^{-ikh}}{2h} f_j + b \frac{e^{2ikh} - e^{-2ikh}}{4h} f_j + c \frac{e^{3ikh} - e^{-3ikh}}{6h} f_j. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} ik' (\beta e^{-2ikh} + \alpha e^{-ikh} + 1 + \alpha e^{ikh} + \beta e^{2ikh}) f_j = \\ \left(a \frac{e^{ikh} - e^{-ikh}}{2h} + b \frac{e^{2ikh} - e^{-2ikh}}{4h} + \frac{e^{3ikh} - e^{-3ikh}}{6h} \right) f_j. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} ik' (1 + 2\alpha (e^{ikh} + e^{-ikh}) + 2\beta (e^{2ikh} + e^{-2ikh})) = \\ a \frac{e^{ikh} - e^{-ikh}}{2h} + b \frac{e^{2ikh} - e^{-2ikh}}{4h} + \frac{e^{3ikh} - e^{-3ikh}}{6h}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$ik' [1 + 2\alpha \cos(kh) + 2\beta \cos(2kh)] = \frac{2a}{2h} i \sin(kh) + \frac{2b}{4h} i \sin(2kh) + \frac{2c}{6h} i \sin(3kh). \quad (\text{B.6})$$

$$k' = \frac{a \sin(kh) + [b/2] \sin(2kh) + [c/3] \sin(3kh)}{h[1 + 2\alpha \cos(kh) + 2\beta \cos(2kh)]} \quad (\text{B.7})$$

B.2. Derivada de segunda ordem

Seja o esquema generalizado de diferenças finitas centrado

$$\beta f_{j+2}'' + \alpha f_{j+1}'' + f_j'' + \alpha f_{j-1}'' + \beta f_{j-2}'' =$$

$$a \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{h^2} + b \frac{f_{j+2} - 2f_j + f_{j-2}}{4h^2} + c \frac{f_{j+3} - 2f_j + f_{j-3}}{9h^2}. \quad (\text{B.8})$$

Pode-se particularizá-lo considerando o ajuste exponencial $f_j = e^{ikhj}$, $f_j' = ik' f_j$ e $f_j'' = ik' f_j' + ik'' f_j$ e tomando $\Psi = (ik')^2 + (ik'')$

$$\Psi \left[\beta (e^{ikh(j+2)} + e^{ikh(j-2)}) + \alpha (e^{ikh(j+1)} + e^{ikh(j-1)}) + e^{ikhj} \right] =$$

$$a \frac{e^{ikh(j+1)} - 2e^{ikh(j)} + e^{ikh(j-1)}}{h^2} + b \frac{e^{ikh(j+2)} - 2e^{ikh(j)} + e^{ikh(j-2)}}{4h^2} + c \frac{e^{ikh(j+3)} - 2e^{ikh(j)} + e^{ikh(j-3)}}{9h^2}. \quad (\text{B.9})$$

Desacoplando os índices através das propriedades da estrutura exponencial de multiplicação

$$\Psi f_j \left[\beta (e^{2ikh} + e^{-2ikh}) + \alpha (e^{ikh} + e^{-ikh}) + 1 \right] =$$

$$f_j \left[a \frac{e^{ikh} - 2 + e^{-ikh}}{h^2} + b \frac{e^{2ikh} - 2 + e^{-2ikh}}{4h^2} + c \frac{e^{3ikh} - 2 + e^{-3ikh}}{9h^2} \right]. \quad (\text{B.10})$$

Por meio da identidade de Euler $\cos ax = \frac{e^{aix} + e^{-aix}}{2}$ e simplificando-se ambos os lados pela divisão por f_j

$$\Psi = \frac{1}{h^2} \left[\frac{2a \{ \cos(kh) - 1 \} + \left(\frac{b}{2}\right) \{ \cos(2kh) - 1 \} + \left(\frac{2c}{9}\right) \{ \cos(3kh) - 1 \}}{2\beta \cos(2kh) + 2\alpha \cos(kh) + 1} \right]. \quad (\text{B.11})$$

Para o esquema O6LES tem-se o acréscimo de um termo extra

$$\Psi = \frac{1}{h^2} \left[\frac{2a \{ \cos(kh) - 1 \} + \left(\frac{b}{2}\right) \{ \cos(2kh) - 1 \} + \left(\frac{2c}{9}\right) \{ \cos(3kh) - 1 \} + \left(\frac{d}{8}\right) \{ \cos(4kh) - 1 \}}{2\beta \cos(2kh) + 2\alpha \cos(kh) + 1} \right]. \quad (\text{B.12})$$



Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul
Pró-Reitoria Acadêmica
Av. Ipiranga, 6681 - Prédio 1 - 3º. andar
Porto Alegre - RS - Brasil
Fone: (51) 3320-3500 - Fax: (51) 3339-1564
E-mail: proacad@pucrs.br
Site: www.pucrs.br/proacad