Simulação de grandes escalas de escoamentos
turbulentos com filtragem temporal via método de
volumes finitos

Laís Corrêa

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: _____

Laís Corrêa

Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos com filtragem temporal via método de volumes finitos

Tese apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutora em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *VERSÃO REVISADA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Fabrício Simeoni de Sousa

USP – São Carlos
Fevereiro de 2016

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

C824s	<p>Corrêa, Laís</p> <p>Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos com filtragem temporal via método de volumes finitos / Laís Corrêa; orientador Fabrício Simeoni de Sousa. - São Carlos - SP, 2016. 99 p.</p> <p>Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Ciências de Computação e Matemática Computacional) - Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, 2016.</p> <p>1. Simulação das grandes escalas. 2. Filtragem temporal. 3. Método dos volumes finitos. 4. Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante. I. Sousa, Fabrício Simeoni de, orient. II. Título.</p>
-------	--

Laís Corrêa

**Temporal large eddy simulation of turbulent flows via finite
volume method**

Doctoral dissertation submitted to the Instituto de
Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP,
in partial fulfillment of the requirements for the degree
of the Doctorate Program in Computer Science and
Computational Mathematics. *FINAL VERSION*

Concentration Area: Computer Science and
Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Fabrício Simeoni de Sousa

USP – São Carlos
February 2016

Aos meus pais, com muito amor e carinho.

Dedico este trabalho em memória de:

Giseli Ap. Braz de Lima

Valdemir Garcia Ferreira

AGRADECIMENTOS

A Deus, pelo dom da vida e a Nossa Senhora por iluminar meu caminho ao longo deste trabalho.

Aos meus pais, Maria José e Antônio, pelo grande amor, paciência, compreensão e grande apoio ao longo de todos os meus estudos, e também aos meus demais familiares que sempre estiveram ao meu lado nesta caminhada pedindo a Deus que guiasse meu caminho.

Ao meu orientador, Fabricio Simeoni de Sousa, pela paciência, disponibilidade, apoio, confiança e, principalmente, pelos seus ensinamentos e orientações.

Ao professor Gilmar Mompean, por todo apoio, paciência e disponibilidade, sempre contribuindo com seus ensinamentos, e também pelo suporte e acolhimento durante a minha estadia em Lille, França.

Ao meu namorado e companheiro, Reginaldo, por sempre me apoiar em cada passo e conquista com muita dedicação e carinho.

Aos meus amigos e colegas por toda ajuda, compreensão e apoio e, principalmente, pelos bons momentos e risadas. Em especial, aos meus novos amigos, os quais ganhei no doutorado sanduíche na França, Ramon, Maíra e Natália.

A todos os professores do LMACC-ICMC/USP pelos ensinamentos e reflexões que me auxiliaram na construção deste trabalho. E aos funcionários do ICMC-USP por toda ajuda.

A FAPESP, pelo suporte financeiro concedido para a realização do meu projeto de pesquisa, processos números 2010/16865-2 (bolsa no país) e 2012/17827-2 (bolsa BEPE).

Finalmente, agradeço a todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização do meu doutorado.

O físico Werner Heisenberg uma vez disse, “Quando eu encontrar Deus, vou fazer-lhe duas perguntas: ‘Por que a relatividade?’ e ‘Por que a turbulência?’. Acredito que ele terá uma resposta para a primeira”.

RESUMO

CORRÊA, L.. **Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos com filtragem temporal via método de volumes finitos**. 2016. 99 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

Este trabalho tem como principal objetivo o desenvolvimento de um método numérico para simulação das grandes escalas de escoamentos turbulentos tridimensionais utilizando uma modelagem de turbulência baseada em filtragem temporal (denominada TLES - *Temporal Large Eddy Simulation*). O método desenvolvido combina discretizações temporais com ordem de mínima precisão 2 (Adams-Bashforth, QUICK, Runge-Kutta), um método de projeção de ordem 2, com discretizações espaciais também de ordem 2 obtidas pelo método de volumes finitos. Esta metodologia foi empregada na simulação de problemas teste turbulentos como o canal e a cavidade impulsionada, sendo este último resultado simulado pela primeira vez com modelagem TLES. Os resultados mostram uma excelente concordância quando comparado com resultados de simulações diretas (DNS) e dados experimentais, superando resultados clássicos obtidos com formulação LES com filtragem espacial.

Palavras-chave: Simulação das grandes escalas, Filtragem temporal, Método dos volumes finitos, Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante.

ABSTRACT

CORRÊA, L.. **Temporal large eddy simulation of turbulent flows via finite volume method.** 2016. 99 f. Tese (Doutorado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC/USP), São Carlos – SP.

The main objective of this work is to develop a numerical method for large eddy simulation of tridimensional turbulent flows using a model based on temporal filtering (TLES - Temporal Large Eddy Simulation). The developed method combines at least 2nd order temporal discretizations (Adams-Bashforth, QUICK, Runge-Kutta), a 2nd order projection method, and 2nd order spatial discretizations obtained by the finite volume method. This methodology was employed to the simulation of turbulent benchmark problems such as channel and lid-driven cavity flows. The latter is simulated for the first time using a TLES turbulence modelling. Results show excellent agreement when compared to Direct Numerical Simulations (DNS) and experimental data, with better results than classical results produced by standard LES formulation with spatial filtering.

Key-words: Large eddy simulation, Temporal filtering, Finite volume method, Cubic lid-driven cavity flow.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Divisão do espectro de energia cinética turbulento.	30
Figura 2 – Relação entre o custo computacional e o grau de modelagem dos modelos RANS, LES e DNS.	32
Figura 3 – Posição dos elementos no volume de controle de uma malha deslocada 3D para a discretização das equações de transporte.	52
Figura 4 – Projeção no plano z de um volume de controle para uma malha deslocada associado à velocidade $\bar{u}_1 _e$	55
Figura 5 – Malha não uniforme utilizada na simulação do canal turbulento no plano $x-y$	64
Figura 6 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$	65
Figura 7 – Tensor de Reynolds cruzado (<i>shear stress</i>) para $Re_\tau = 395$	65
Figura 8 – Tensor de Reynolds na direção <i>streamwise</i> para $Re_\tau = 395$	66
Figura 9 – Tensor de Reynolds na direção normal à parede para $Re_\tau = 395$	66
Figura 10 – Tensor de Reynolds na direção <i>spanwise</i> para $Re_\tau = 395$	66
Figura 11 – Energia cinética k em função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$	67
Figura 12 – Espectro de energia turbulento em função da frequência apresentado pelo modelo TLES para $Re_\tau = 395$	67
Figura 13 – Evolução temporal da velocidade longitudinal no centro do canal para $Re_\tau = 395$	68
Figura 14 – Contornos das componentes (a) u e (b) v da velocidade no plano $z = \pi h/2$ para $Re_\tau = 395$	68
Figura 15 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ : uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$	69
Figura 16 – Tensor de Reynolds cruzado (<i>shear stress</i>): uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$	70
Figura 17 – Tensor de Reynolds na direção <i>streamwise</i> : uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$	70
Figura 18 – Tensor de Reynolds na direção normal à parede: uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$	71
Figura 19 – Tensor de Reynolds na direção <i>spanwise</i> : uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$	71
Figura 20 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ : comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$	72

Figura 21 – Tensor de Reynolds cruzado (<i>shear stress</i>): comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$	73
Figura 22 – Tensor de Reynolds na direção <i>streamwise</i> : comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$	73
Figura 23 – Tensor de Reynolds na direção normal à parede: comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$	73
Figura 24 – Tensor de Reynolds na direção <i>spanwise</i> : comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$	74
Figura 25 – Evolução temporal da velocidade longitudinal no centro do canal: comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$	74
Figura 26 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x	75
Figura 27 – Tensor normal cruzado (<i>shear stress</i>) para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x	76
Figura 28 – Tensor normal <i>streamwise</i> para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x	76
Figura 29 – Tensor normal <i>wall-normal</i> para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x	76
Figura 30 – Tensor normal <i>wall-normal</i> para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x	77
Figura 31 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z	77
Figura 32 – Tensor normal cruzado (<i>shear stress</i>) para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z	78
Figura 33 – Tensor normal <i>streamwise</i> para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z	78
Figura 34 – Tensor normal <i>wall-normal</i> para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z	78
Figura 35 – Tensor normal <i>wall-normal</i> para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z	79
Figura 36 – Geometria para o problema da cavidade com tampa deslizante.	80
Figura 37 – Malha computacional não uniforme nas direções x e y	80
Figura 38 – Comparação dos perfis das velocidades médias (a) u e (b) v com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$	81
Figura 39 – Comparação dos valores <i>RMS</i> das velocidades (a) u e (b) v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $y = 1$, com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$	82

Figura 40 – Comparação dos valores <i>RMS</i> das velocidades (a) u e (b), v no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $x = 1$, com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$	82
Figura 41 – Comparação dos tensores de Reynolds τ_{xy} (<i>shear stress</i>) nas direções (a) x e (b) y com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$	83
Figura 42 – Vetores de velocidade no plano $z = 1$ para $Re = 12000$ no tempo $t = 100s$. .	83
Figura 43 – Contorno das velocidades instantâneas (a) u e (b) v no plano $z = 1$ para $Re = 12000$ no tempo $t = 100s$	84
Figura 44 – Isosurfaces do critério q para o problema da cavidade, com $q = 0,5$, para $Re = 12000$	84
Figura 45 – Comparação dos perfis das velocidades médias u e v com dados DNS e LES para $Re = 18000$	85
Figura 46 – Comparação dos valores <i>RMS</i> das velocidades (a) u e (b) v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $y = 1$, com dados DNS e LES para $Re = 18000$	85
Figura 47 – Comparação dos valores <i>RMS</i> das velocidades (a) u e (b) v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $x = 1$, com dados DNS e LES para $Re = 18000$	86
Figura 48 – Comparação dos tensores de Reynolds τ_{xy} (<i>shear stress</i>) nas direções (a) x e (b) y com dados DNS e LES para $Re = 18000$	86
Figura 49 – Vetores de velocidade no plano $z = 1$ para $Re = 18000$ no tempo $t = 100s$. .	87
Figura 50 – Contorno das velocidades instantâneas (a) u e (b) v no plano $z = 1$ para $Re = 18000$ no tempo $t = 100s$	87
Figura 51 – Isosurfaces do critério Q para o problema da cavidade, com $q = 0,5$, para $Re = 18000$	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Valores para as constantes C_m e D_m utilizadas no processo de deconvolução.	44
Tabela 2	– Expressões para os diferentes termos da equação da quantidade de movimento (3.16) nas direções x , y e z	53
Tabela 3	– Malhas utilizadas no teste de refinamento na direção x	75
Tabela 4	– Malhas utilizadas no teste de refinamento na direção z	77

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADM		<i>Approximate Deconvolution Model</i>
DFC		Dinâmica dos Fluidos Computacional
DNS		<i>Direct Numerical Simulation</i>
EDO		Equação Diferencial Ordinária
LES		<i>Large Eddy Simulation</i>
QUICK	...	<i>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics</i>
RANS		<i>Reynolds Average Navier-Stokes</i>
RFS		<i>Resolved Filter-Scale</i>
RMS		<i>Root Mean Square</i>
RSFS		<i>Resolved Subfilter-Scale</i>
TADM	...	<i>Temporal Approximate Deconvolution Model</i>
TLES		<i>Temporal Large Eddy Simulation</i>
USFS		<i>Unresolved Subfilter-Scale</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Re — número de Reynolds

U_0 — escala de velocidade

L_0 — escala de comprimento

ν — viscosidade cinemática

Re_τ — número de Reynolds baseado na velocidade de atrito

$\bar{u}_i$ — campo de velocidade filtrado

t — tempo

p — pressão

ρ_0 — massa específica

x — primeira componente do vetor posição

y — segunda componente do vetor posição

z — terceira componente do vetor posição

G — função filtro

V — volume de controle

Δ — tamanho do filtro

$\bar{p}$ — pressão filtrada

τ_{ij} — tensor submalha

ν_t — viscosidade turbulenta

S_{ij} — tensor deformação

δ_{ij} — delta de Kronecker

C_S — constante de Smagorinsky

$\tilde{G}$ — função filtro teste

$\tilde{\bar{u}}$ — velocidade filtrada pelo filtro teste

T_{ij} — tensor submalha do campo $\tilde{\bar{u}}$

L_{ij} — tensor turbulento resolvido

C — constante do modelo dinâmico de Smagorinsky
 $f(t)$ — função no tempo
 $\tilde{f}(t)$ — função filtrada no tempo
 Δt — espaçamento temporal
 r — raio do tamanho do filtro temporal
 M_{ij} — tensor submalha modelado
 v_i — campo de velocidade obtido pela deconvolução primária
 C_m — coeficientes da deconvolução primária
 χ — parâmetro de amortecimento do termo de regularização
 w_i — campo de velocidade obtido pela deconvolução secundária
 D_m — coeficientes da deconvolução secundária
 $\bar{u}_1$ — componente do vetor velocidade filtrado na direção x
 $\bar{u}_2$ — componente do vetor velocidade filtrado na direção y
 $\bar{u}_3$ — componente do vetor velocidade filtrado na direção z
 Δx — espaçamento na direção x
 Δy — espaçamento na direção y
 Δz — espaçamento na direção z
 γ — parâmetro de subrelaxação do critério de estabilidade
 S — superfície do volume de controle
 $\vec{n}$ — vetor normal
 u_τ — velocidade de atrito
 h — metade da altura do canal
 u^+ — velocidade em função da distância normal à parede
 y^+ — distância normal à parede
 k — energia cinética turbulenta
 $E(f)$ — espectro de energia turbulento em função da frequência
 f — frequência
 q — critério q
 Ω — tensor vorticidade

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	29
1.1	Organização do texto	34
2	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	35
2.1	Equações de Navier-Stokes	35
2.2	Modelagem da turbulência	35
2.2.1	LES	36
2.2.1.1	<i>Filtragem Espacial</i>	37
2.2.1.2	<i>Equações filtradas espacialmente</i>	37
2.2.1.3	<i>Modelagem do tensor submalha</i>	38
2.3	TLES	41
2.3.1	<i>Filtragem Temporal</i>	41
2.3.2	<i>Equações filtradas temporalmente</i>	43
2.3.3	<i>Cálculo do tensor submalha e do termo de regularização</i>	45
2.4	Condições auxiliares	45
2.4.1	<i>Condições iniciais</i>	46
2.4.2	<i>Condições de contorno</i>	46
3	METODOLOGIA NUMÉRICA	49
3.1	Discretização temporal	49
3.2	Discretização espacial	51
3.3	Aproximação do tensor submalha	57
3.4	Aproximação do termo de regularização	60
3.5	Algoritmo do método numérico	61
4	VERIFICAÇÃO, VALIDAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS NUMÉRICOS	63
4.1	Escoamento em um canal turbulento	63
4.1.1	<i>Comparação TLES X DNS</i>	64
4.1.2	<i>Comparação TLES X LES de Tsang, Trujillo e Rutland (2014)</i> . . .	68
4.1.3	<i>Comparação TLES X LES em volumes finitos</i>	71
4.1.4	<i>Teste de refinamento de malha</i>	74
4.1.4.1	<i>Refinamento na direção x</i>	75
4.1.4.2	<i>Refinamento na direção z</i>	76

4.2	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante	79
4.2.1	$Re = 12000$	81
4.2.2	$Re = 18000$	83
4.2.3	<i>Comentários sobre a verificação</i>	86
5	CONCLUSÕES	89
Referências		91
APÊNDICE A	FILTRAGEM TEMPORAL	95
APÊNDICE B	CÁLCULO DO CRITÉRIO q	97

INTRODUÇÃO

A grande maioria das aplicações práticas na área de mecânica dos fluidos envolve escoamentos turbulentos, os quais são complexos e fascinantes. Definir um escoamento turbulento é algo considerado impossível e qualquer proposta de definição estaria incompleta. Não podendo então defini-la, resta aos pesquisadores estudar e entender suas características fundamentais. Dentre as mais importantes destacam-se: difusão, dissipação, vorticidade, tridimensionalidade, multiplicidade de escalas, altos números de Reynolds e largo espectro de energia.

Uma das características mais importantes apresentada por um escoamento turbulento é a multiplicidade de escalas (temporais e espaciais). Este fato remete à conclusão de que as grandes escalas da turbulência coexistem com as pequenas escalas. Essa ideia é representada pelo espectro turbulento de energia, o qual é dividido em três principais regiões, a saber: a região das grandes escalas, a região inercial e a região das escalas viscosas (pequenas escalas), como ilustrado na Fig. 1. Por esta figura, observa-se que a região formada pelas grandes escalas é aquela que apresenta maior energia cinética turbulenta; a região inercial é caracterizada pela transferência de energia, em que as grandes escalas sofrem um processo de estiramento ao longo do escoamento, levando à formação das menores escalas, fenômeno este conhecido por cascata de energia. A região das pequenas escalas é a região dissipativa, onde predominam os efeitos da viscosidade do fluido. De acordo com [Pope \(2000\)](#), a hipótese de Kolmogorov diz que a razão de transferência de energia na região inercial é de $-5/3$ (inclinação da curva apresentada na Fig. 1 na região inercial).

Uma das maiores dificuldades encontradas na simulação numérica de escoamentos turbulentos está no fato de que nenhuma solução exata foi encontrada até o momento e sua natureza física ainda não foi muito bem entendida. Além disso, este tipo de escoamento apresenta um alto grau de liberdade e é sensível às condições iniciais e de contorno, as quais devem ser impostas adequadamente, já que qualquer variação pode ser amplificada pela não-linearidade das equações que modelam este tipo de fenômeno.

Figura 1 – Divisão do espectro de energia cinética turbulento.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Antigamente, os escoamentos turbulentos eram analisados apenas por meio de experimentos, sendo que os primeiros deles foram realizados por [Reynolds \(1883\)](#). Através de seus experimentos, Reynolds observou que um escoamento no interior de um tubo pode apresentar os regimes laminar e turbulento. Ainda mais, determinou o parâmetro que identifica em qual desses dois regimes o escoamento se encontra, parâmetro este que foi definido levando seu nome:

$$Re = \frac{U_0 \cdot L_0}{\nu}, \quad (1.1)$$

em que U_0 e L_0 são as escalas de velocidade e comprimento característicos, respectivamente, e ν é a viscosidade cinemática do fluido. E foi por meio de suas experiências que Reynolds deu o primeiro passo na resolução de escoamentos turbulentos, desenvolvendo a decomposição de Reynolds. No entanto, essa decomposição levou ao famoso problema do “fechamento” da turbulência, já que novas incógnitas surgiram devido ao termo não linear introduzido, tornando o sistema de equações aberto.

Nesse sentido, diversas metodologias numéricas foram desenvolvidas em busca de simular numericamente escoamentos turbulentos. Dentre as mais conhecidas e utilizadas, destacam-se: simulação numérica direta (DNS - *Direct Numerical Simulation*), decomposição de Reynolds (RANS - *Reynolds Average Navier-Stokes*) e simulação de grandes escalas (LES - *Large Eddy Simulation*).

Em DNS, todo espectro da energia cinética turbulenta é resolvido, ou seja, obtêm-se todas as escalas do escoamento turbulento resolvendo as equações de Navier-Stokes em sua forma primitiva (a única modelagem é a discretização temporal e espacial das equações). Com isso, obtêm-se como solução os valores instantâneos dos campos de velocidade e pressão, esperando-

se assim mais exatidão nos resultados. No entanto, para que todas as escalas possam ser resolvidas são necessárias malhas muito refinadas, o que leva a técnica DNS a apresentar um alto custo computacional. Além do mais, como os escoamentos turbulentos ocorrem a altos valores do número de Reynolds, levando assim a um número de graus de liberdade elevado, a DNS é inviável do ponto de vista computacional, principalmente em problemas envolvendo geometrias complexas. Nesse sentido, a maioria dos problemas de interesse prático não podem ser resolvidos por esta técnica. No entanto, a prática de DNS em geometrias bem simples é considerada uma boa ferramenta de validação de modelos (inclusive do modelo LES).

A modelagem clássica RANS da turbulência é baseada na resolução das equações médias de Navier-Stokes. Nesta técnica, as variáveis instantâneas são decompostas em seu valor médio mais uma parte flutuante, sendo que apenas as variáveis médias são resolvidas. A parte flutuante, a qual carrega toda dinâmica do escoamento turbulento (todo espectro de energia), é modelada via técnicas de fechamento. A grande vantagem da metodologia RANS é que ela permite a utilização de malhas mais grossas, o que leva a resultados não muito precisos, inclusive pelo fato de que essa técnica resolve apenas a média das variáveis instantâneas. Devido a isso, a RANS não é recomendada para análise de estruturas mais finas, como o emparelhamento de vórtices e outras estruturas turbulentas.

Diante das limitações e dificuldades impostas pelas técnicas anteriores, [Smagorinsky \(1963\)](#) introduziu a técnica de simulação das grandes escalas, conhecida por LES, baseando-se na decomposição de Reynolds. De acordo com [Pope \(2000\)](#), os trabalhos pioneiros em LES foram feitos por [Smagorinsky \(1963\)](#), [Lilly \(1967\)](#) e [Deardorff \(1970\)](#), os quais foram motivados principalmente por aplicações meteorológicas. Basicamente, a metodologia consiste em dividir o espectro de energia turbulenta, separando as grandes das pequenas escalas. Essa separação é feita por meio do processo de filtragem espacial das equações de Navier-Stokes. A grande vantagem de LES é que as grandes escalas da turbulência são resolvidas diretamente, sendo as pequenas escalas modeladas por modelos sub-malha. Além disso, como apenas as pequenas escalas são modeladas, os erros obtidos são menores, já que a transferência da energia cinética turbulenta se dá das grandes escalas para as pequenas escalas.

É interessante observar que o conceito de LES encontra-se entre o conceito das técnicas DNS e RANS, uma vez que em DNS todas as escalas são resolvidas e em RANS apenas o campo médio é resolvido. Uma outra vantagem apresentada pela LES é que o seu uso torna possível resolver escoamentos a altos números de Reynolds com maior precisão, já que são menos dependentes de modelagem, não tão precisos quanto os obtidos em DNS, no entanto em LES são exigidos menos recursos computacionais. É devido a estas características que LES se tornou uma metodologia amplamente utilizada na simulação de escoamentos turbulentos. A Fig. 2 apresenta um gráfico que ilustra a relação entre o custo computacional e o grau de modelagem dos modelos RANS, LES e DNS, evidenciando o fato de que a modelagem LES encontra-se entre RANS e DNS, considerando que apresenta um custo computacional intermediário e

modela apenas as pequenas escalas.

Figura 2 – Relação entre o custo computacional e o grau de modelagem dos modelos RANS, LES e DNS.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No entanto, a filtragem espacial apresenta algumas deficiências, as quais não são encontradas quando utiliza-se uma filtragem temporal ([PRUETT, 2008](#)), a saber: a filtragem espacial é problemática para malhas altamente estiradas ou malhas não estruturadas, por outro lado, os filtros temporais operam independentemente da discretização espacial; a metodologia RANS explora a filtragem no domínio temporal, então a ligação entre LES e RANS é mais natural no contexto da filtragem temporal que da espacial; além disso, como observado por [Frisch \(1995\)](#), a maioria dos dados experimentais em turbulência é obtida no domínio temporal e então recai para o domínio espacial através das hipóteses de Taylor. Então, se a análise no domínio temporal é natural para experimentos, deve ser natural também para a simulação de escoamentos turbulentos. Nesse sentido, existem boas razões para se considerar uma filtragem temporal na simulação das grandes escalas.

Tendo como motivação estas e outras vantagens do filtro temporal, [Pruett et al. \(2003\)](#) introduziu a teoria de TLES (*Temporal Large Eddy Simulation*), o qual é um modelo LES que, ao invés de um filtro espacial, como nos demais modelos LES, utiliza as equações filtradas no domínio temporal.

TLES foi desenvolvido baseado em um modelo de deconvolução aproximado (ADM - *Approximate Deconvolution Model*) no domínio temporal, adaptado a partir do método de deconvolução espacial de [Stolz e Adams \(1999\)](#). Na aproximação ADM utiliza-se uma deconvolução aproximada de uma quantidade filtrada para obter uma solução não filtrada através de repetidas aplicações do processo de filtragem. Feita essa aproximação para a solução não fil-

trada, os termos não lineares das equações de Navier-Stokes podem ser calculados diretamente, em que os efeitos das escalas não representadas são modelados por uma regularização que envolve um segundo processo de filtragem (denominado deconvolução secundária). Esta técnica foi então aplicada por [Stolz, Adams e Kleiser \(2001\)](#) para a simulação do canal turbulento para os números de Reynolds $Re_\tau = 180$ e $Re_\tau = 590$, utilizando a modelagem LES com modelo submalha Dinâmico. Os resultados obtidos mostraram boa concordância com os dados de comparação DNS, além de apresentarem uma significativa melhora com relação ao modelo submalha Dinâmico clássico. Para mais detalhes sobre o método de deconvolução, ver os trabalhos de [Stolz e Adams \(1999\)](#) e [Stolz, Adams e Kleiser \(2001\)](#).

Dando sequência ao trabalho de [Pruett et al. \(2003\)](#), [Pruett et al. \(2006\)](#) formalizou o modelo de deconvolução aproximado temporal denominado TADM (*Temporal Approximate Deconvolution Model*), o qual combina uma filtragem no domínio temporal com uma deconvolução linear. As diferenças entre o ADM e o TADM, basicamente, são: no TADM utiliza-se uma filtragem temporal, enquanto no ADM aplica-se uma filtragem espacial. Além disso, no TADM as quantidades filtradas utilizadas no processo de deconvolução são multiplicadas por um peso, cujos valores ótimos foram calculados por [Pruett et al. \(2006\)](#). A metodologia foi então testada com sucesso no problema do canal turbulento para $Re_\tau = 590$. De acordo com [Pruett et al. \(2006\)](#), a ideia de TLES repousa sobre a premissa de que a remoção das altas frequências do espectro de frequências deve remover efetivamente os altos números de onda do espectro de número de onda, de modo que TLES possa ser aplicado com uma resolução temporal e espacial mais grosseira que os demais modelos.

Em 2007, [Tejada-Martínez, Grosch e Gatski \(2007\)](#) apresentou uma análise mais aprofundada de cada termo da modelagem TLES, comparando os resultados obtidos para o canal turbulento com diferentes modelagens LES. Um ano depois, [Pruett \(2008\)](#) apresentou a teoria e os passos para a implementação do modelo TLES, fornecendo uma demonstração do conceito através de simulações do escoamento de *Burgers* viscoso e do canal incompressível.

A modelagem TLES também já foi aplicada para a simulação de fluidos não-newtonianos por [Thais et al. \(2010\)](#), em que simulou-se o escoamento num canal turbulento de uma solução polimérica com a equação constitutiva FENE-P. Os resultados obtidos apresentaram excelente concordância com as simulações DNS para a porcentagem da redução de arrasto.

Dando continuidade aos trabalhos com a modelagem TLES, propõe-se neste trabalho sua combinação com o método dos volumes finitos. Esta metodologia é então utilizada na simulação do escoamento do canal turbulento para número de Reynolds $Re_\tau = 395$ e na simulação do escoamento da cavidade com tampa deslizante para números de Reynolds $Re = 12000$ e $Re = 18000$, apresentando resultados em boa concordância com dados experimentais, DNS e LES.

1.1 Organização do texto

As demais seções deste trabalho estão organizadas da seguinte forma:

- Capítulo 2: descreve-se a formulação matemática utilizada no desenvolvimento deste trabalho, em que apresentam-se as equações de Navier-Stokes filtradas temporalmente (equações do modelo TLES), bem como a modelagem do tensor submalha e do termo de regularização deste modelo;
- Capítulo 3: apresenta-se a metodologia numérica proposta, a qual combina a modelagem TLES com o método dos volumes finitos. Nesse sentido, é apresentada a discretização das equações que compõem o modelo;
- Capítulo 4: apresentam-se a verificação, validação e discussão dos resultados numéricos utilizando a simulação do escoamento em um canal turbulento e do escoamento em uma cavidade com tampa deslizante;
- Capítulo 5: apresentam-se as conclusões obtidas neste trabalho.

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Neste capítulo é descrita a formulação matemática utilizada neste trabalho. Primeiramente, apresentam-se as equações de Navier-Stokes (equações da conservação da quantidade de movimento e equação da conservação da massa). Em seguida, apresenta-se uma breve descrição sobre modelagem da turbulência, destacando a modelagem LES com modelo submalha Dinâmico e sua formulação matemática. Por fim, apresenta-se a modelagem TLES, em que é descrito o processo de filtragem temporal, as equações de Navier-Stokes filtradas temporalmente e a modelagem do tensor submalha e do termo de regularização do TLES.

2.1 Equações de Navier-Stokes

As equações que modelam escoamentos incompressíveis são as equações de Navier-Stokes que são dadas, na notação de Einstein, por (FORTUNA, 2000):

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.1)$$

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

em que u_i são as componentes do campo de velocidade, t é o tempo e p é a pressão. O parâmetro ν é o coeficiente de viscosidade cinemática molecular e ρ_0 é a massa específica. O termo de força gravitacional foi negligenciado. As condições iniciais e de contorno utilizadas para resolver este sistema são descritas na Seção 2.4.

2.2 Modelagem da turbulência

Um grande desafio na área de Dinâmica dos Fluidos Computacional é a modelagem de escoamentos turbulentos devido à sua extrema complexidade. Uma ferramenta numérica para

a simulação de escoamentos turbulentos deve estar preparada para as diferentes condições que satisfaçam cada problema, em que é necessária “uma análise prévia do escoamento para se obter uma modelagem coerente” (BRADSHAW, 1997). Além disso, há uma grande diversidade de escalas envolvidas em um escoamento turbulento, a qual aumenta proporcionalmente ao número de Reynolds.

A simulação numérica direta veio com o objetivo de resolver as escalas de um escoamento turbulento sem um modelo de turbulência, ou seja, resolver as equações de Navier-Stokes (2.1)-(2.2) diretamente. No entanto, para isso, é necessária uma malha que capture todo o espectro de frequências, desde as menores frequências (grandes escalas) até as maiores frequências (Escala de Kolmogorov: pequenas estruturas com altas frequências), o que exige um grande custo computacional. Com o avanço dos computadores, atualmente, consegue-se simular através da técnica DNS escoamentos turbulentos a números de Reynolds em torno de $Re_\tau = 5200$ (simulação do canal turbulento).

Devido às dificuldades associadas à metodologia DNS, surgiram os modelos de turbulência, os quais são baseados na decomposição das escalas turbulentas. A metodologia RANS foi o primeiro modelo de fechamento de turbulência a ser desenvolvido, considerando que a decomposição das escalas, introduzida por Reynolds (1883), levou ao surgimento de novas incógnitas nas equações de Navier-Stokes. Conforme já descrito no Capítulo 1, a modelagem RANS trata-se de uma média temporal das equações de Navier-Stokes, em que as pequenas escalas são resolvidas diretamente e as grandes escalas são modeladas, ou seja, a dinâmica do escoamento turbulento é modelada.

Intermediariamente às metodologias DNS e RANS, surgiu a modelagem LES, a qual utiliza uma filtragem espacial nas equações de Navier-Stokes para a separação das escalas. Ao contrário de RANS, em LES as pequenas escalas são modeladas e as grandes escalas são resolvidas, o que torna LES mais precisa que RANS, considerando que a dinâmica do escoamento turbulento é resolvida diretamente e apenas as pequenas escalas são modeladas, levando em conta o fato de que estas apresentam um comportamento mais homogêneo que as grandes escalas. Na Subseção a seguir, apresenta-se a formulação matemática para a metodologia LES com modelo submalha Dinâmico.

2.2.1 LES

A modelagem LES também foi implementada ao longo deste trabalho no contexto de volumes finitos com o objetivo de comparar seus resultados com os resultados da metodologia proposta, a qual utiliza a modelagem TLES. Os resultados de LES com modelo submalha Dinâmico foram comparados com os resultados obtidos pelo modelo TLES, para justificar o fato de que este modelo apresenta melhores resultados em malhas mais grosseiras do que o LES.

2.2.1.1 Filtragem Espacial

Considerando $\bar{u}(x, t)$ como sendo a componente filtrada (ou componente das grandes escalas ou escalas resolvidas) de uma variável u , e $u'(x, t)$ a componente submalha (ou componente das pequenas escalas ou escalas modeladas), a decomposição do campo u em componentes de grandes e pequenas escalas é definida por (ver, por exemplo, Pope (2000)):

$$u(x, t) = \bar{u}(x, t) + u'(x, t). \quad (2.3)$$

De acordo com Leonard (1974), a componente filtrada $\bar{u}$ é definida pela integral de convolução entre a função a ser filtrada (velocidade, pressão, etc.) e uma função filtro, da forma:

$$\bar{u}(x, t) = \int_V u(x', t) G(x - x') dx', \quad (2.4)$$

em que $u(x', t)$ é a variável a ser filtrada, $G(x - x')$ é a função filtro, V representa o volume da célula da malha computacional e x' é a posição do elemento de volume dx' .

A função filtro G pode ser definida de diversas formas, em que a mais simples e utilizada na literatura é a função filtro por volume (CLARK; FERZIGER; REYNOLDS, 1979):

$$G(x - x') = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3}, & \text{se } |x - x'| \leq \frac{\Delta}{2}, \\ 0, & \text{se } |x - x'| > \frac{\Delta}{2}, \end{cases} \quad (2.5)$$

em que Δ é a espessura do filtro, a qual é determinada pelo tamanho da malha (discretização espacial do domínio). Para o método dos volumes finitos, tem-se que (NETO *et al.*, 1993):

$$\Delta = \left[\prod_{i=1}^3 \Delta x_i \right]^{1/3}, \quad (2.6)$$

em que Δx_i representa o tamanho da célula computacional na direção i .

A grande questão em LES é como determinar a espessura desse filtro de tal modo a escolher quais escalas serão resolvidas e quais serão modeladas. A importância desta escolha está no fato de que corre-se o risco de o filtro não capturar as grandes escalas, apenas reter as pequenas escalas, podendo levar a resultados imprecisos, ou até à divergência.

É importante notar que, quanto mais refinado for o filtro, mais estruturas turbulentas serão resolvidas, já que mais estruturas serão capturadas, levando a um resultado mais preciso, ou seja, mais próximo de DNS. No entanto, isso requer um alto custo computacional, uma das maiores dificuldades em Dinâmica dos Fluidos Computacional.

2.2.1.2 Equações filtradas espacialmente

Para a aplicação do filtro espacial, considera-se inicialmente as equações de Navier-Stokes em coordenadas cartesianas, dadas pelas Eqs. (2.1)-(2.2). Aplicando-se o filtro espacial

no sistema de equações (2.1)-(2.2), obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2}, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.8)$$

Pode-se observar pela Eq. (2.7) que o termo não linear se apresenta na forma de um produto filtrado. No sentido de resolver isso, [Lesieur e Métais \(1996\)](#) introduziram o tensor submalha τ_{ij} , o qual é dado por:

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (2.9)$$

A partir da Eq. (2.9) pode-se escrever o termo não linear da seguinte forma:

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

Substituindo o termo não linear dado por (2.10) na equação da quantidade de movimento dada pela Eq (2.7), o sistema formado pelas equações de Navier-Stokes filtradas espacialmente (equações de LES) torna-se:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \right), \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.12)$$

Para o fechamento do sistema de equações (2.11)-(2.12), utiliza-se a hipótese de Boussinesq ([LESIEUR; MÉTAIS, 1996](#)), em que o tensor submalha τ_{ij} pode ser aproximado em função da viscosidade turbulenta por:

$$\tau_{ij} = -2\nu_t \bar{S}_{ij} + \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}, \quad (2.13)$$

em que ν_t é a viscosidade turbulenta e $\bar{S}_{ij}$ o tensor de deformação do campo filtrado, dado por:

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

Ainda, δ_{ij} é o delta de Kronecker, dado por:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (2.15)$$

2.2.1.3 Modelagem do tensor submalha

A modelagem submalha tem a função de acrescentar o efeito das pequenas escalas turbulentas nas equações filtradas. Como mostra a Eq. (2.13), Boussinesq escreveu o tensor submalha em função da viscosidade turbulenta, a qual pode ser calculada através de diferentes modelos.

De acordo com Smagorinsky (1963), a viscosidade turbulenta é calculada por:

$$\nu_t = (C_S \cdot \Delta)^2 \cdot |\bar{S}|, \quad (2.16)$$

em que $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$ e C_S é a constante de Smagorinsky, obtida analiticamente por Lilly (1967) como sendo $C_S = 0.18$. No entanto, esse valor tem sido objeto de questionamentos. Deardorff (1970) considerou $C_S = 0.1$ em suas simulações do problema do canal, já que o valor determinado por Lilly causava o amortecimento das grandes escalas da turbulência.

Várias modificações do modelo submalha de Smagorinsky têm sido apresentadas na literatura, afinal não é possível modelar efetivamente uma variedade de fenômenos com uma única constante. Ainda, o modelo de Smagorinsky não é capaz de capturar o fenômeno *backscatter* (fluxo de energia das pequenas para as grandes escalas). Sendo assim, apresenta-se a seguir a modelagem submalha de Smagorinsky Dinâmica de Germano *et al.* (1991), modelo este que veio para tentar suprir as deficiências apresentadas pelo modelo de Smagorinsky. Neste trabalho, este modelo foi utilizado para as simulações de LES.

Considera-se o processo de filtragem definido por:

$$\bar{u}(x, t) = \int_V u(x', t) \bar{G}(x - x') dx', \quad (2.17)$$

em que $\bar{G}$ é a função filtro de malha. Define-se ainda o filtro teste $\tilde{G}$, o qual representa um segundo processo de filtragem, dado por:

$$\tilde{u}(x) = \int_V u(x', t) \tilde{G}(x - x') dx'. \quad (2.18)$$

Conforme visto anteriormente, aplicando o filtro $\bar{G}$ na equação de conservação da quantidade de movimento (2.11), obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \right). \quad (2.19)$$

Aplicando-se o filtro teste $\tilde{G}$ na Eq. (2.19), a equação da quantidade de movimento filtrada torna-se:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - T_{ij} \right), \quad (2.20)$$

em que agora o tensor submalha do campo $\tilde{u}$ é dado por:

$$T_{ij} = \widetilde{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j. \quad (2.21)$$

O tensor turbulento resolvido L_{ij} , o qual corresponde ao filtro teste aplicado ao campo $\bar{u}$, é dado por:

$$L_{ij} = \widetilde{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (2.22)$$

Os três tensores τ_{ij} , T_{ij} e L_{ij} definidos, respectivamente, nas Eqs. (2.9), (2.21) e (2.22), se relacionam algebricamente por (GERMANO *et al.*, 1991):

$$L_{ij} = T_{ij} - \widetilde{\tau}_{ij}, \quad (2.23)$$

em que $\widetilde{\tau}_{ij}$ é obtido aplicando-se o filtro teste na Eq. (2.9).

A partir da hipótese de Boussinesq, pode-se escrever:

$$\widetilde{\tau}_{ij} - \frac{1}{3} \widetilde{\tau}_{kk} \delta_{ij} = -2C \Delta^2 \widetilde{A}_{ij}, \quad (2.24)$$

com $A_{ij} = |\overline{S}| \overline{S}_{ij}$. De maneira análoga, o tensor T_{ij} pode ser determinado por:

$$T_{ij} - \frac{1}{3} T_{kk} \delta_{ij} = -2C \widetilde{\Delta}^2 B_{ij}, \quad (2.25)$$

sendo $B_{ij} = |\widetilde{S}| \widetilde{S}_{ij}$, $C = C_S^2$ e $\widetilde{\Delta}$ o tamanho do filtro teste (geralmente adotado como 2Δ , de acordo com Lesieur e Métais (1996)). Os termos $|\widetilde{S}|$ e $\widetilde{S}_{ij}$ são análogos às quantidades $|\overline{S}|$ e $\overline{S}_{ij}$ obtidos a partir do campo filtrado $\widetilde{u}$. Subtraindo $\widetilde{\tau}_{ij}$ de T_{ij} , tem-se:

$$L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} = -2C M_{ij}, \quad (2.26)$$

em que

$$M_{ij} = \widetilde{\Delta}^2 B_{ij} - \Delta^2 \widetilde{A}_{ij}. \quad (2.27)$$

Para determinar o valor de C , apresenta-se aqui duas das alternativas mais difundidas na literatura. A primeira delas, proposta por Germano *et al.* (1991), é obtida multiplicando ambos os membros da Eq. (2.26) por $\overline{S}_{ij}$. Considerando que para o caso de escoamentos incompressíveis $\overline{S}_{ii} = 0$, a constante C pode ser calculada da seguinte forma:

$$C = -\frac{1}{2} \cdot \frac{L_{ij} \overline{S}_{ij}}{M_{ij} \overline{S}_{ij}}. \quad (2.28)$$

Isso nos permite determinar dinamicamente C , e consequentemente C_S , como função do espaço e do tempo. No entanto, em testes DNS para o problema do canal, Germano *et al.* (1991) mostrou que o denominador da Eq. (2.28) pode se tornar muito pequeno, levando à instabilidades numéricas. Com o objetivo de remover essas instabilidades, Lilly (1992) determinou C através do método de mínimos quadrados, com o objetivo de minimizar o erro cometido em (2.26), obtendo:

$$C = -\frac{1}{2} \cdot \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij}^2}. \quad (2.29)$$

Para o cálculo do filtro teste, diversas estratégias são apresentadas na literatura, como os filtros baseados na regra trapezoidal, na média aritmética e na média ponderada. Nos resultados de LES apresentados neste trabalho, optou-se por calcular o filtro teste a partir da regra trapezoidal, da seguinte forma:

$$\widetilde{u}_i = \frac{1}{8} (\overline{u}_{i-1,j,k} + \overline{u}_{i+1,j,k} + 2\overline{u}_{i,j,k} + \overline{u}_{i,j-1,k} + \overline{u}_{i,j+1,k} + \overline{u}_{i,j,k-1} + \overline{u}_{i,j,k+1}). \quad (2.30)$$

Os resultados de simulação de LES apresentados no Capítulo 4 foram obtidos com a modelagem submalha Dinâmica seguindo os procedimentos descritos aqui e os trabalhos de [Germano *et al.* \(1991\)](#) e [Lilly \(1992\)](#). Mais detalhes sobre a modelagem LES podem ser encontrados em [Lesieur e Métais \(1996\)](#) e [Pope \(2000\)](#).

2.3 TLES

Os modelos LES e RANS utilizam a hipótese de Boussinesq no fechamento das equações de Navier-Stokes, para modelar o tensor de Reynolds que surge com a decomposição das escalas. Já na modelagem TLES, o tensor de Reynolds é aproximado por um tensor submalha modelado, o qual é obtido a partir de um campo de velocidade filtrado temporalmente. Há inúmeras vantagens em se considerar um filtro temporal para a simulação das grandes escalas (TLES) do que um filtro espacial (LES), as quais já foram elencadas no Capítulo 1 e compõem a motivação do presente trabalho.

Em TLES, no entanto, a separação das escalas é feita diferentemente de LES. A teoria de TLES baseia-se na divisão das escalas temporais em três componentes (ver [Tejada-Martínez, Grosch e Gatski \(2007\)](#)): escalas filtradas resolvidas (*resolved filter-scale*, RFS), escalas submalha resolvidas (*resolved subfilter-scale*, RSFS) e escalas submalha não-resolvidas (*unresolved subfilter-scale*, USFS). Essa divisão será descrita na Subseção 2.3.2.

2.3.1 Filtragem Temporal

A filtragem temporal, assim como a espacial, tem por objetivo separar as grandes das pequenas escalas turbulentas, sendo bem mais natural que a filtragem espacial para a modelagem de escoamentos turbulentos. Dentre as justificativas, destaca-se um fato observado por [Frisch \(1995\)](#): a maioria dos dados experimentais em turbulência são obtidos no domínio temporal. Então, se esta é uma escolha natural para experimentos, espera-se que também seja natural para simulações de escoamentos turbulentos (ver [Pruett \(2008\)](#)).

Sejam $f(t)$ e $\bar{f}(t)$ funções não-filtrada e filtrada no tempo, respectivamente. Um filtro que relaciona ambas é construído a partir de um operador integral, da forma ([PRUETT *et al.*, 2003](#)):

$$\bar{f}(t; \Delta) = \int_{-\infty}^t G(T - t; \Delta) f(T) dT, \quad (2.31)$$

em que Δ é o tamanho do filtro temporal e G representa a função filtro, a qual é dada por:

$$G(t; \Delta) = \frac{1}{\Delta} g\left(\frac{t}{\Delta}\right), \quad (2.32)$$

em que g é uma função qualquer integrável, tal que:

$$g(t) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^0 g(t)dt = 1 \quad \text{e} \quad g(0) = 1. \quad (2.33)$$

De acordo com [Vreman, Geurts e Huerten \(1994\)](#), para aplicações em simulações de grandes escalas, a não-negatividade de $g(t)$ é necessária para satisfazer as condições físicas do tensor submalha. Assim, tomando ambas, a não-negatividade e a normalização das condições impostas em (2.33), implicam que:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} g(t) = 0, \quad (2.34)$$

sendo suficiente para G ser uma distribuição delta de Dirac com seu parâmetro $\Delta \rightarrow 0$, ou seja,

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \bar{f}(t; \Delta) &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^t G(T-t; \Delta) f(T) dT, \\ &= \int_{-\infty}^t \delta(T-t) f(T) dT, \\ &= f(t). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Os exemplos de filtros mais simples e usuais são obtidos utilizando a função exponencial e a função *Heaviside* ([PRUETT, 2008](#)). Para o caso em que a função exponencial é escolhida, tem-se:

$$g(t) = \exp(t), \quad (2.36)$$

o que implica em:

$$G(t; \Delta) = \frac{\exp(t/\Delta)}{\Delta}. \quad (2.37)$$

A partir da Eq. (2.37), o operador integral definido pela Eq. (2.31) torna-se:

$$\bar{f}(t; \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) dT. \quad (2.38)$$

A diferenciação de (2.38) em t utilizando a regra de Leibiniz (ver contas no Apêndice A) leva a uma equação diferencial ordinária linear que define a forma diferencial do filtro exponencial ([PRUETT, 2008](#)), dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t; \Delta) = \frac{f(t) - \bar{f}(t; \Delta)}{\Delta}. \quad (2.39)$$

Quando um filtro é aplicado a um problema discretizado temporalmente com um incremento de tempo Δt , a ação do filtro é naturalmente parametrizada pelo raio do tamanho do filtro r , definido por:

$$r = \frac{\Delta}{\Delta t}, \quad r > 0. \quad (2.40)$$

O raio do tamanho do filtro é o único parâmetro do filtro diferencial. O método é viável para todo valor de r , com $r > 0$. Em geral, quanto maior o valor de r , mais dissipativo o filtro, pois mais energia será removida das altas frequências. Para $r \approx 0$, a evolução da equação torna-se mais rígida e pequenos passos de tempo são necessários.

2.3.2 Equações filtradas temporalmente

De acordo com [Tejada-Martínez, Grosch e Gatski \(2007\)](#), a decomposição das escalas temporais nas componentes RFS, RSFS e USFS levam as equações de Navier-Stokes filtradas temporalmente (equações de TLES) a governarem o movimento da componente RFS. No entanto, estas equações contêm o tensor submalha, refletindo o efeito das componentes RSFS e USFS na componente RFS. A componente RSFS está associada ao tensor submalha e é aproximada através de uma deconvolução temporal, enquanto que a componente USFS é aproximada através de uma viscosidade artificial na forma de uma regularização temporal.

Conclusões obtidas por [Tejada-Martínez, Grosch e Gatski \(2007\)](#) a partir de suas simulações numéricas com TLES mostram que o tensor RSFS pode potencialmente levar em conta os efeitos do fenômeno *backscatter* na maioria dos escoamentos complexos. Assim, interpreta-se TLES com regularização e o tensor RSFS como análogos ao modelo misto dinâmico em LES. Por exemplo, similar ao termo de Smagorinsky no modelo misto dinâmico, a regularização pode fornecer suficiente dissipação da energia cinética turbulenta.

Analogamente ao que é feito na filtragem espacial, aplicando-se o filtro no domínio temporal (ver [Pruett et al. \(2006\)](#) e [Pruett \(2008\)](#)) nas Eqs. (2.1)-(2.2), obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2}, \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.42)$$

em que novamente define-se o tensor submalha τ_{ij} por ([LESIEUR; MÉTAIS, 1996](#)):

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j, \quad (2.43)$$

com o objetivo de eliminar o termo não linear filtrado da Eq. (2.41), o qual pode ser escrito por:

$$\overline{u_i u_j} = \tau_{ij} + \bar{u}_i \bar{u}_j. \quad (2.44)$$

Substituindo (2.44) em (2.41) obtém-se as seguintes equações de Navier-Stokes filtradas temporalmente:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.46)$$

Na modelagem TLES, diferentemente do que ocorre em LES, o tensor residual τ_{ij} é aproximado por um tensor submalha modelado M_{ij} , em que seus termos são calculados através de uma deconvolução temporal de alta ordem dos campos de velocidade $\bar{u}_i$. De acordo com [Pruett et al. \(2006\)](#), o tensor submalha modelado é calculado por:

$$M_{ij} = \overline{v_i v_j} - \bar{v}_i \bar{v}_j, \quad (2.47)$$

em que as velocidades v_i são calculadas por:

$$v_i = \sum_{m=0}^p C_m \bar{u}_i^{(m+1)}, \quad (2.48)$$

sendo $\bar{u}_i^{(1)} = \bar{u}_i$. A velocidade deconvoluída v_i aproxima a velocidade não-filtrada u_i através de uma combinação linear de múltiplos campos de $\bar{u}_i^{(m)}$ filtrados m vezes. Ainda, na Eq. (2.48), p representa o grau desta deconvolução, denominada deconvolução primária, e C_m são os coeficientes desta deconvolução, cujos valores para $p = 3$ são dados pela Tabela 1.

No entanto, de acordo com [Pruett et al. \(2006\)](#), o método de deconvolução ADM mostrou-se instável devido à insuficiente dissipação do modelo. Nesse sentido, [Pruett et al. \(2006\)](#) acoplou estabilidade ao ADM adicionando um termo dissipativo do lado direito da equação da quantidade de movimento, dado por $\chi(\bar{w}_i - \bar{u}_i)$, em que χ é um parâmetro de amortecimento arbitrário e w_i é um novo campo de velocidades, calculado analogamente a v_i através de uma deconvolução temporal das velocidades filtradas $\bar{u}_i$, da forma:

$$w_i = \sum_{m=0}^q D_m \bar{u}_i^{(m+1)}, \quad (2.49)$$

sendo q o grau desta deconvolução, denominada deconvolução secundária, e D_m seus coeficientes, os quais são dados pela Tabela 1 para $q = 3$.

Tabela 1 – Valores para as constantes C_m e D_m utilizadas no processo de deconvolução.

m	0	1	2	3
C_m	0	$\sqrt{6}$	$\sqrt{4+2\sqrt{6}} - 2\sqrt{6}$	$1 - \sqrt{4+2\sqrt{6}} + 2\sqrt{6}$
D_m	35/16	-29/16	12/16	-2/16

Fonte: Elaborada pelo autor.

Finalmente, as equações de Navier-Stokes para a modelagem TLES são dadas por:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - M_{ij} \right) + \chi(\bar{w}_i - \bar{u}_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (2.51)$$

Dessa forma, a aplicação da deconvolução temporal tem duas propostas: (a) modelar o tensor residual (Eqs. (2.47) e (2.48)), e (b) gerar dissipação artificial de alta ordem através do termo de regularização).

2.3.3 Cálculo do tensor submalha e do termo de regularização

Como já descrito na Subseção 2.3.2, o tensor submalha modelado M_{ij} , o qual representa as escalas submalhas resolvidas (RSFS), é calculado pela Eq. (2.47), em que as novas velocidades v_i são obtidas a partir da Eq. (2.48). Os campos de velocidade filtrados $\bar{u}_i$, a partir dos quais calcula-se o campo v_i , são obtidos a partir do seguinte sistema de equações diferenciais (PRUETT, 2008):

$$\frac{\partial \bar{u}_i^{(m+1)}}{\partial t} = \frac{\bar{u}_i^{(m)} - \bar{u}_i^{(m+1)}}{\Delta}, \quad 1 \leq m \leq p. \quad (2.52)$$

Para o cálculo dos termos $\bar{v}_i$, $\bar{v}_j$ e $\overline{v_i v_j}$, utiliza-se novamente a filtragem temporal, da forma:

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} = \frac{v_i - \bar{v}_i}{\Delta}, \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial \overline{v_i v_j}}{\partial t} = \frac{v_i v_j - \overline{v_i v_j}}{\Delta}. \quad (2.54)$$

De maneira análoga, calcula-se o termo de regularização $\chi(\bar{w}_i - \bar{u}_i)$, em que o campo de velocidades w_i é dado pela Eq. (2.49). Sua filtragem temporal é obtida por meio de:

$$\frac{\partial \bar{w}_i}{\partial t} = \frac{w_i - \bar{w}_i}{\Delta}. \quad (2.55)$$

Neste trabalho, considerou-se $p = q = 3$, seguindo o que foi feito por Pruet *et al.* (2006). No entanto, diferentes valores para os graus p e q já foram testados e investigados na literatura, como, por exemplo, nos trabalhos de Pruet (2008) e Thais *et al.* (2010). Além disso, de acordo com Tejada-Martínez, Grosch e Gatski (2007), os coeficientes da deconvolução primária apresentados na Tabela 1 foram obtidos por Pruet *et al.* (2006), o qual afirma serem estes os valores ótimos para minimizar os efeitos dos erros associados ao filtro temporal. Com relação à deconvolução secundária, Pruet *et al.* (2006) afirma que os coeficientes D_m apresentados na Tabela 1 são os valores ótimos, considerando que o termo de regularização é de natureza estritamente dissipativa. O coeficiente constante χ é um valor arbitrário e foi assumido igual a 1, seguindo Pruet *et al.* (2006). Pretende-se testar numericamente a influência destes parâmetros futuramente.

2.4 Condições auxiliares

Assim como os demais modelos de turbulência, a modelagem TLES também requer condições para se obter um problema matematicamente bem-posto. Primeiramente, são apresentadas as condições iniciais. Em seguida, descreve-se as condições aplicadas na entrada e na saída do domínio. Por fim, são discutidas as condições utilizadas quando o contorno é dado por uma superfície rígida (parede).

2.4.1 Condições iniciais

Para inicializar os campos de velocidade, utilizou-se os campos de velocidade DNS para o escoamento do canal turbulento, disponibilizados pelo grupo de pesquisa ER1 do Laboratoire de Mécanique de Lille (LML) da Université de Lille 1. Estes dados estão disponíveis no site desenvolvido por [Thais \(2011\)](#), para diferentes valores de Re_τ , a saber, 180, 395, 590, 1000 e 3000, para fluidos newtonianos e não-newtonianos. Além dos campos de velocidade e pressão, estão disponíveis também as estatísticas turbulentas em unidades de parede, as quais foram utilizadas para a validação da metodologia numérica apresentada neste trabalho. Como referência das fontes destes dados DNS, pode-se citar [Thais et al. \(2010\)](#) e [Thais, Mompean e Gatski \(2013\)](#).

2.4.2 Condições de contorno

Nos escoamentos incompressíveis turbulentos de interesse neste trabalho, adotaram-se as seguintes condições de contorno:

(1) Condições na entrada do domínio:

Para a condição na entrada de fluido do domínio (*Inflow*), as seguintes estratégias foram utilizadas:

- Condição de periodicidade: esta estratégia foi imposta na simulação do problema do canal, para o campo de velocidades na direção *streamwise*, com o objetivo de se obter um canal “infinito”;
- Imposição do perfil DNS: nesta condição, os perfis das velocidades DNS das simulações do escoamento do canal turbulento de [Thais \(2011\)](#) foram impostos na região do *inflow*, com o objetivo de “alimentá-lo” com dados turbulentos.

(2) Condições na saída do domínio:

Na saída do domínio (*Outflow*) foram adotadas diferentes condições, as quais são descritas a seguir:

- Condição de contorno convectiva (ver [Sagaut \(1998\)](#) e [Le, Moin e Kim \(1997\)](#)): esta condição, como o próprio nome define, tem por objetivo convectar para fora do domínio qualquer estrutura vortical que possa voltar para o interior do domínio, trazendo problemas de instabilidades numéricas. Esta condição é dada pela seguinte equação de advecção:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + U_c \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x} = 0, \quad (2.56)$$

a qual é resolvida na região de *outflow*, em que U_c é uma velocidade convectiva, a qual foi calculada neste trabalho através da interpolação *Upwind*;

- Imposição de pressão nula: considerou-se esta condição no *outflow*.

$$\bar{p} = 0. \quad (2.57)$$

(3) Condições sobre uma superfície rígida:

Para o contorno rígido (parede), considerou-se diferentes condições de contorno, as quais foram aplicadas adequadamente de acordo com as condições de cada problema simulado:

- *No-slip*: a condição de não-escorregamento impõe que o fluido deve ser fixado à parede, ou seja, o fluido adjacente à superfície da parede está em repouso com relação a mesma, da forma:

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_2 = \bar{u}_3 = 0; \quad (2.58)$$

- *Free-slip* (ou condição de simetria ou *no-stress*): não há perda friccional no contorno, de forma que o fluido adjacente à superfície da parede “escorrega sobre a mesma. Esta condição é definida por:

- Para a direção normal ao escoamento, tem-se:

$$\bar{u}_2 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} = \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} = 0; \quad (2.59)$$

- Para a direção *streamwise*, tem-se:

$$\bar{u}_3 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} = \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} = 0. \quad (2.60)$$

METODOLOGIA NUMÉRICA

Neste Capítulo descreve-se a metodologia numérica proposta para resolver as equações de transporte apresentadas no Capítulo 2. Esta metodologia combina um método de projeção de segunda ordem para a segregação da pressão (discretização temporal), o método dos volumes finitos para a discretização espacial e o modelo de turbulência TLES, combinação esta apresentada ineditamente neste trabalho.

Inicialmente, apresenta-se a discretização temporal das equações de transporte, em que utilizou-se o método de Adams-Bashforth para a discretização da derivada temporal e um método de projeção de segunda ordem para a segregação da pressão. Em seguida, apresenta-se a discretização espacial via método de volumes finitos. A aproximação das derivadas espaciais foi feita utilizando um esquema de diferenças finitas de ordem 2 e para a aproximação dos termos advectivos utilizou-se o esquema QUICK de terceira ordem de [Leonard \(1979\)](#). Apresenta-se também neste Capítulo a discretização do tensor submalha e do termo de regularização do modelo TLES, em que as EDOs da filtragem temporal são aproximadas pelo método de Runge-Kutta de segunda ordem. E, por fim, descreve-se os passos do algoritmo computacional para a aplicação da metodologia numérica proposta.

3.1 Discretização temporal

Por simplicidade, os termos advectivos, difusivos, o divergente do tensor submalha e o termo de regularização presentes na equação da quantidade de movimento (2.50) são acoplados em uma função H_i , da forma:

$$H_i(\bar{\mathbf{u}}) = -\frac{\partial(\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - M_{ij} \right) + \chi(\bar{w}_i - \bar{u}_i), \quad (3.1)$$

em que $\bar{\mathbf{u}}$ representa o campo de velocidades $(\bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3)$.

Assim, a equação de quantidade de movimento pode ser escrita de maneira compacta como:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} = H_i(\bar{\mathbf{u}}) - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}. \quad (3.2)$$

ou ainda, em notação vetorial:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} = \mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}) - \frac{1}{\rho_0} \nabla \bar{p}, \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{H} = (H_1, H_2, H_3)$. A equação de quantidade de movimento é então discretizada temporalmente pelo método de Adams-Bashforth, resultando em:

$$\frac{\bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} \mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}^n) - \frac{1}{2} \mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}^{n-1}) - \frac{1}{\rho_0} \nabla \bar{p}^{n+1}, \quad (3.4)$$

em que o sobrescrito n refere-se ao passo de tempo atual e Δt é o passo temporal.

Na equação (3.4), o termo de pressão é mantido no tempo t_{n+1} , pois seu cálculo depende também da velocidade neste mesmo tempo. Isso gera um sistema acoplado, cujo cálculo será segregado por uma estratégia denominada comumente por “método de projeção” ou “método de passo fracionário” (CHORIN, 1968). O processo de segregação começa por substituindo $\bar{p}^{n+1}$ por $\bar{p}^n$ na Eq. (3.4), resultando em:

$$\frac{\bar{\mathbf{u}}^* - \bar{\mathbf{u}}^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} \mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}^n) - \frac{1}{2} \mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}^{n-1}) - \frac{1}{\rho_0} \nabla \bar{p}^n, \quad (3.5)$$

o que não gera um campo com divergente nulo, sendo $\bar{\mathbf{u}}^*$ uma velocidade intermediária não solenoidal. Assim, subtraindo a Eq. (3.5) da Eq. (3.4), tem-se:

$$\frac{\bar{\mathbf{u}}^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla (\bar{p}^{n+1} - \bar{p}^n). \quad (3.6)$$

Definindo $\delta \bar{p} = \bar{p}^{n+1} - \bar{p}^n$, aplicando o operador divergente na Eq. (3.6) e utilizando o fato de que a velocidade procurada $\bar{\mathbf{u}}^{n+1}$ seja solenoidal, i.e., $\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}^{n+1} = 0$, tem-se:

$$\frac{1}{\rho_0} \nabla^2 (\delta \bar{p}) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}^*, \quad (3.7)$$

a qual é uma equação de Poisson para $\delta \bar{p}$. Após o cálculo de $\delta \bar{p}$, corrige-se o campo de velocidades a partir da Eq. (3.6):

$$\bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \bar{\mathbf{u}}^* - \Delta t \frac{1}{\rho_0} \nabla (\delta \bar{p}). \quad (3.8)$$

Por fim, a pressão no tempo t_{n+1} é obtida por meio de:

$$\bar{p}^{n+1} = \bar{p}^n + \delta \bar{p}. \quad (3.9)$$

É importante observar que esta estratégia numérica apresenta ordem de segregação $O(\Delta t^2)$, independente da discretização temporal utilizada. Como o método de Adams-Bashforth apresenta $O(\Delta t^2)$, a composição das duas discretizações também apresenta esta precisão.

Como na discretização temporal foi utilizado um método explícito, sabe-se que este tipo de esquema não converge quando a condição de CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*) (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1967) não é satisfeita. Esta condição demanda que o domínio de dependência físico da solução esteja contido no domínio de dependência numérico, o que é garantido para esta discretização, quando Δt é escolhido menor que Δt_{adv} , definido por:

$$\Delta t_{adv} = \left(\frac{\Delta x}{|\bar{u}_{1_{max}}|} + \frac{\Delta y}{|\bar{u}_{2_{max}}|} + \frac{\Delta z}{|\bar{u}_{3_{max}}|} \right), \quad (3.10)$$

em que Δx , Δy e Δz representam os espaçamentos de malha nas direções x , y e z , respectivamente, e $|\bar{u}_{1_{max}}|$, $|\bar{u}_{2_{max}}|$ e $|\bar{u}_{3_{max}}|$ representam os valores máximos em módulo das velocidades filtradas $\bar{u}_1$, $\bar{u}_2$ e $\bar{u}_3$, respectivamente, em cada ciclo computacional.

Os efeitos viscosos também introduzem uma limitação no Δt para que haja estabilidade, dada pelo parâmetro Δt_{dif} , o qual é definido, para o método de Adams-Bashforth, por:

$$\Delta t_{dif} = \frac{1}{3\nu} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-1}. \quad (3.11)$$

Estas restrições são obtidas da análise de estabilidade de casos lineares, mas é de praxe sua utilização também em problemas não lineares, reforçando-as através da escolha de um parâmetro de subrelaxação γ . Nesse sentido, considerou-se a seguinte restrição para o cálculo do Δt :

$$\Delta t = \gamma \min \{ \Delta t_{dif}, \Delta t_{adv} \}, \quad (3.12)$$

em que o parâmetro γ é escolhido entre 0 e 1.

3.2 Discretização espacial

A discretização espacial das equações de transporte utilizadas neste trabalho é feita através do método dos volumes finitos aplicado a uma malha deslocada. As equações são integradas no volume e o teorema de Gauss é utilizado para transformar as integrais volumétricas em fluxos transversais nas faces dos volumes de controle. A Fig. 3 apresenta uma molécula de cálculo centrada em P . As letras minúsculas e , w , n , s , t e b representam as faces do volume de controle nas direções leste (*east*), oeste (*west*), norte (*north*), sul (*south*), em cima (*top*) e embaixo (*bottom*), respectivamente. As letras maiúsculas P , E , W , N , S , T e B representam o volume P e seus vizinhos adjacentes E (*east*), W (*west*), N (*north*), S (*south*), T (*top*) e B (*bottom*).

Em uma malha deslocada, o campo de velocidades é deslocado para o centro da face do volume de controle (representadas pelas letras minúsculas na Fig. 3), enquanto a pressão

Figura 3 – Posição dos elementos no volume de controle de uma malha deslocada 3D para a discretização das equações de transporte.

Fonte: Elaborada pelo autor.

é calculada no centro (posição representada pelas letras maiúsculas na Fig. 3). Cada equação da quantidade de movimento é resolvida na molécula de cálculo centrada na componente de velocidade correspondente.

Considerou-se também para a discretização espacial uma malha não uniforme, com o objetivo de obter uma boa resolução próximo às paredes. Para isto, aplicou-se a estratégia de estiramento de malha (conhecida como *stretching*), cuja ideia é agrupar os pontos de malha próximos à parede. Neste trabalho, a malha estirada foi utilizada na direção normal à parede (para o problema do canal), e também na direção *streamwise* (para o problema da cavidade). Para aplicar esta estratégia, considerou-se uma função dada por uma progressão geométrica para calcular os pontos de malha, da seguinte forma:

$$x_i(m+1) = x_i(m) + \Delta x_i(m), \quad (3.13)$$

em que

$$\Delta x_i(m) = \Delta x_i(m-1)r, \quad (3.14)$$

sendo r a razão da progressão geométrica, a qual determina a porcentagem de *stretching*.

Para a discretização espacial via volumes finitos, considerou-se a equação da quantidade de movimento (3.5) em função de uma variável ϕ :

$$\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} = \frac{3}{2}H(\phi^n) - \frac{1}{2}H(\phi^{n-1}) - \frac{1}{\rho_0}G(\bar{p}^n), \quad (3.15)$$

em que definiu-se $H(\phi) = \nabla \cdot \mathbf{F}(\phi) + B(\phi)$, em que $\mathbf{F}(\phi)$ representa o fluxo da variável ϕ (termo convectivo, termo difusivo e tensor submalha), $B(\phi)$ representa o termo de regularização do modelo TLES e $G(\bar{p})$ representa o gradiente de pressão. Substituindo-se $H(\phi)$ na Eq. (3.15), obtém-se:

$$\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} = \frac{3}{2} [\nabla \cdot \mathbf{F}(\phi^n) + B(\phi^n)] - \frac{1}{2} [\nabla \cdot \mathbf{F}(\phi^{n-1}) + B(\phi^{n-1})] - \frac{1}{\rho_0} G(\bar{p}^n). \quad (3.16)$$

A Tabela 2 apresenta a expressão para os diferentes termos da Eq. (3.16) no caso de um sistema cartesiano (x, y, z) (para facilitar a notação, considerou-se $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$).

Tabela 2 – Expressões para os diferentes termos da equação da quantidade de movimento (3.16) nas direções x , y e z .

Direção	ϕ	$F_j(\phi)$	$B(\phi)$	$G(\bar{p})$
x	$\bar{u}_1$	$-\bar{u}_1 \bar{u}_j + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_j} - M_{1j}$	$\chi(\bar{w}_1 - \bar{u}_1)$	$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x}$
y	$\bar{u}_2$	$-\bar{u}_2 \bar{u}_j + \nu \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x_j} - M_{2j}$	$\chi(\bar{w}_2 - \bar{u}_2)$	$\frac{\partial \bar{p}}{\partial y}$
z	$\bar{u}_3$	$-\bar{u}_3 \bar{u}_j + \nu \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x_j} - M_{3j}$	$\chi(\bar{w}_3 - \bar{u}_3)$	$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z}$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Considerando um volume de controle V , a integração da Eq. (3.16) sobre V é dada por:

$$\begin{aligned} \int_V \left(\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} \right) dV &= \frac{3}{2} \left[\int_V \nabla \cdot \mathbf{F}(\phi^n) dV + \int_V B(\phi^n) dV \right] \\ &- \frac{1}{2} \left[\int_V \nabla \cdot \mathbf{F}(\phi^{n-1}) dV + \int_V B(\phi^{n-1}) dV \right] \\ &- \frac{1}{\rho_0} \int_V G(\bar{p}^n) dV. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Primeiramente, calcula-se a aproximação para a integral de volume do termo à esquerda da Eq. (3.17), a qual é feita utilizando o teorema do valor médio para integrais, da seguinte forma:

$$\int_V \left(\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} \right) dV \simeq V \left(\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} \right). \quad (3.18)$$

Considerando que as integrais dos termos $B(\phi^n)$ e $B(\phi^{n-1})$ são calculadas de maneira análoga, apresenta-se a aproximação da integral de volume do termo de regularização $B(\phi)$ utilizando, novamente, o teorema do valor médio para integrais, da forma:

$$\int_V B(\phi) dV \simeq VB(\phi). \quad (3.19)$$

Seja S uma superfície (fronteira) do volume de controle V e $\vec{n}$ a normal exterior em um ponto de S . Se $\mathbf{A}$ é um campo vetorial contínuo e diferenciável definido na vizinhança de V , então o teorema de Gauss para o campo vetorial $\mathbf{A}$ é dado por:

$$\int_V (\nabla \cdot \mathbf{A}) dV = \int_S (\mathbf{A} \cdot \vec{n}) dS. \quad (3.20)$$

Assim, aplicando o teorema de Gauss para a integral de volume de uma componente do gradiente de pressão, tem-se:

$$-\frac{1}{\rho_0} \int_V G(\bar{p}^n) dV = -\frac{1}{\rho_0} \int_S \bar{p}^n \vec{n}_i dS, \quad (3.21)$$

em que $\vec{n}_i$ representa o vetor normal na direção x , y ou z . Considerando que as integrais dos termos $\mathbf{F}(\phi^n)$ e $\mathbf{F}(\phi^{n-1})$ são calculadas de maneira análoga (assim como para os termos $B(\phi^n)$ e $B(\phi^{n-1})$), por simplicidade, apresenta-se o cálculo da integral de volume do fluxo $\mathbf{F}(\phi)$, dado por:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{F}(\phi) dV = \int_S \mathbf{F}(\phi) \cdot \vec{n} dS. \quad (3.22)$$

Como as velocidades são localizadas nas faces do volume de controle, o que constitui o princípio de uma malha deslocada, a Fig. 4 apresenta a projeção no plano z de um volume de controle em uma malha deslocada, destacando o volume de controle associado a equação da quantidade de movimento na direção x , ou seja, associado à velocidade $\bar{u}_1|_e$ (ver Fig. 4).

A partir do volume de controle destacado na Fig. 4, considerando que os fluxos são constantes nas faces do volume de controle, tem-se que a integral de volume do fluxo $F_j(\bar{u}_1)$ dada pela Eq. (3.22) é aproximada por:

$$\int_S \mathbf{F}(\bar{u}_1) \cdot \vec{n} dS \simeq \sum_{f=1}^6 \mathbf{F}(\bar{u}_1)|_f \cdot \vec{n}|_f S|_f, \quad (3.23)$$

em que f representa as faces do volume de controle e $S|_f$ representa a área das faces do volume de controle. Substituindo o somatório dado em (3.23) pelo fluxo em cada face do volume de controle, tem-se:

$$\begin{aligned} \int_S \mathbf{F}(\bar{u}_1) \cdot \vec{n} dS \simeq & [F_1(\bar{u}_1)|_E - F_1(\bar{u}_1)|_P] \Delta y \Delta z + [F_2(\bar{u}_1)|_{NE} - F_2(\bar{u}_1)|_{SE}] \Delta x \Delta z \\ & + [F_3(\bar{u}_1)|_{TE} - F_3(\bar{u}_1)|_{BE}] \Delta x \Delta y, \end{aligned} \quad (3.24)$$

Figura 4 – Projeção no plano z de um volume de controle para uma malha deslocada associado à velocidade $\bar{u}_1|_e$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

em que

$$F_1(\bar{u}_1)|_E = -\bar{u}_1\bar{u}_1|_E + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1}|_E - M_{11}|_E, \quad (3.25)$$

$$F_1(\bar{u}_1)|_P = -\bar{u}_1\bar{u}_1|_P + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1}|_P - M_{11}|_P, \quad (3.26)$$

$$F_2(\bar{u}_1)|_{NE} = -\bar{u}_1\bar{u}_2|_{NE} + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2}|_{NE} - M_{12}|_{NE}, \quad (3.27)$$

$$F_2(\bar{u}_1)|_{SE} = -\bar{u}_1\bar{u}_2|_{SE} + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2}|_{SE} - M_{12}|_{SE}, \quad (3.28)$$

$$F_3(\bar{u}_1)|_{TE} = -\bar{u}_1\bar{u}_3|_{TE} + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3}|_{TE} - M_{13}|_{TE}, \quad (3.29)$$

$$F_3(\bar{u}_1)|_{BE} = -\bar{u}_1\bar{u}_3|_{BE} + \nu \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3}|_{BE} - M_{13}|_{BE}. \quad (3.30)$$

Para a aproximação dos termos convectivos foi utilizado o esquema QUICK de terceira ordem de [Leonard \(1979\)](#). Para ilustrar o uso deste esquema, apresenta-se aqui apenas a discre-

tização do termo $(\bar{u}_1 \bar{u}_1)|_E$ da Eq. (3.25), a qual é dada por:

$$(\bar{u}_1 \bar{u}_1)|_E = \frac{1}{2} (\bar{u}_{ee} + \bar{u}_e) \bar{u}_1|_E, \quad (3.31)$$

em que a velocidade convectada $\bar{u}_1|_E$ é aproximada pelo esquema convectivo QUICK, da seguinte forma:

$$\bar{u}_1|_E \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_1|_{ee} - \bar{u}_1|_e) - \frac{1}{8} (\bar{u}_1|_{ee} - 2\bar{u}_1|_e - \bar{u}_1|_w).$$

Para a aproximação das derivadas espaciais utilizou-se o esquema de diferenças centrais de segunda ordem. Dessa forma, as derivadas presentes nos termos difusivos dos fluxos $F(\bar{u}_1)$ são aproximadas por:

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1}|_E = \frac{\bar{u}_1|_{ee} - \bar{u}_1|_e}{\Delta x_E},$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_1}|_P = \frac{\bar{u}_1|_e - \bar{u}_1|_w}{\Delta x_P},$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2}|_{NE} = \frac{\bar{u}_1|_n - \bar{u}_1|_e}{\Delta y_N},$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_2}|_{SE} = \frac{\bar{u}_1|_e - \bar{u}_1|_s}{\Delta y_S},$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3}|_{TE} = \frac{\bar{u}_1|_t - \bar{u}_1|_e}{\Delta z_T},$$

$$\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x_3}|_{BE} = \frac{\bar{u}_1|_e - \bar{u}_1|_b}{\Delta z_B}.$$

A discretização das componentes do tensor submalha modelado M_{ij} é apresentada na Seção 3.3. Da mesma forma, a discretização do termo de regularização é apresentada na Seção 3.4.

O termo que envolve a pressão, dado pela Eq. (3.21), é discretizado diferentemente, considerando que a pressão é calculada no volume de controle centrado em P . Assim, a aproximação do termo da pressão para a equação da quantidade de movimento na direção x é dada por:

$$-\frac{1}{\rho_0} \int_S \bar{p} \vec{n}_i dS \simeq -\frac{1}{\rho_0} (\bar{p}_E - \bar{p}_P) \Delta y \Delta z. \quad (3.32)$$

E por fim, apresenta-se a discretização por volumes finitos da equação de Poisson para a pressão, dada pela Eq. (3.7). Esta equação é discretizada no volume de controle centrado na posição P da malha deslocada. Integrando a Eq. (3.7) sobre o volume V , tem-se:

$$\frac{1}{\rho_0} \int_V \nabla^2(\delta \bar{p}) dV = \frac{1}{\Delta t} \int_V \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}^* dV. \quad (3.33)$$

Primeiramente calcula-se o termo à esquerda da Eq. (3.33) utilizando, novamente, o teorema de Gauss, da forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_0} \int_V \nabla^2(\delta \bar{p}) dV &= \frac{1}{\rho_0} \int_V \nabla \cdot (\nabla \delta \bar{p}) dV = \frac{1}{\rho_0} \int_S \nabla(\delta \bar{p}) \cdot \vec{n} dS \simeq \frac{1}{\rho_0} \sum_{f=1}^6 \nabla(\delta \bar{p})|_f \cdot \vec{n}|_f S|_f \\ &\simeq \frac{1}{\rho_0} \left\{ \left[\left. \frac{\partial(\delta \bar{p})}{\partial x} \right|_e - \left. \frac{\partial(\delta \bar{p})}{\partial x} \right|_w \right] \Delta y \Delta z + \left[\left. \frac{\partial(\delta \bar{p})}{\partial y} \right|_n - \left. \frac{\partial(\delta \bar{p})}{\partial y} \right|_s \right] \Delta x \Delta z \right. \\ &\quad \left. + \left[\left. \frac{\partial(\delta \bar{p})}{\partial z} \right|_t - \left. \frac{\partial(\delta \bar{p})}{\partial z} \right|_b \right] \Delta x \Delta y \right\}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Aplicando o método de diferenças finitas para aproximar as derivadas de $\delta \bar{p}$ nas faces do volume de controle, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_0} \int_V \nabla^2(\delta \bar{p}) dV &\simeq \frac{1}{\rho_0} \left\{ \left[\frac{\delta \bar{p}|_E - \delta \bar{p}|_P}{\Delta x} - \frac{\delta \bar{p}|_P - \delta \bar{p}|_W}{\Delta x_w} \right] \Delta y \Delta z \right. \\ &\quad + \left[\frac{\delta \bar{p}|_N - \delta \bar{p}|_P}{\Delta y_N} - \frac{\delta \bar{p}|_P - \delta \bar{p}|_S}{\Delta y_S} \right] \Delta x \Delta z \\ &\quad \left. + \left[\frac{\delta \bar{p}|_T - \delta \bar{p}|_P}{\Delta z_T} - \frac{\delta \bar{p}|_P - \delta \bar{p}|_B}{\Delta z_B} \right] \Delta x \Delta y \right\} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Para a aproximação do termo à direita da Eq. (3.33) utiliza-se novamente o teorema de Gauss, da forma:

$$\frac{1}{\Delta t} \int_V \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}^* dV = \frac{1}{\Delta t} \int_S \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \vec{n} dS \simeq \frac{1}{\Delta t} \sum_{f=1}^6 \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \vec{n} S \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\Delta t} \left[(\bar{u}^*|_e - \bar{u}^*|_w) \Delta y \Delta z + (\bar{u}^*|_n - \bar{u}^*|_s) \Delta x \Delta z \right. \\ &\quad \left. + (\bar{u}^*|_t - \bar{u}^*|_b) \Delta x \Delta y \right]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

3.3 Aproximação do tensor submalha

Para a discretização das componentes do tensor submalha M_{ij} presentes nos fluxos F , é necessário discretizar o conjunto de equações apresentadas na Seção 2.3.3. O tensor M_{ij} numa

face qualquer S de um volume de controle é dado por:

$$M_{ij}|_S = \overline{v_i v_j}|_S - \bar{v}_i|_S \bar{v}_j|_S, \quad (3.38)$$

em que a velocidade $v_i|_S$ é calculada através de uma deconvolução temporal como a combinação linear das velocidades filtradas, da forma:

$$v_i|_S = \sum_{m=0}^p C_m \bar{u}_i^{(m+1)}|_S. \quad (3.39)$$

O termo $\bar{u}_i^{(m+1)}|_S$ representa a velocidade $\bar{u}_i|_S$ filtrada temporalmente $(m+1)$ vezes, da forma:

$$\frac{\partial \bar{u}_i^{(m+1)}}{\partial t} \Big|_S = \frac{\bar{u}_i^{(m)}|_S - \bar{u}_i^{(m+1)}|_S}{\Delta}, \quad (3.40)$$

em que, para $m = 1$, considera-se $\bar{u}_i^{(1)}|_S = \bar{u}_i|_S$, que é a velocidade filtrada obtida a partir da resolução das equações de Navier-Stokes filtradas. Como a velocidade $\bar{u}_i$ é calculada na face do volume de controle, a velocidade $\bar{u}_i|_S$ calculada no centro do volume de controle é aproximada pela média dos pontos vizinhos. Por exemplo:

$$\bar{u}_1|_E \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_1|_e + \bar{u}_1|_{ee}),$$

$$\bar{u}_1|_P \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_1|_w + \bar{u}_1|_e),$$

$$\bar{u}_1|_{NE} \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_1|_e + \bar{u}_1|_{ne}),$$

$$\bar{u}_2|_{NE} \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_2|_n + \bar{u}_2|_{ne}),$$

$$\bar{u}_1|_{SE} \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_1|_{se} + \bar{u}_1|_e),$$

$$\bar{u}_2|_{SE} \simeq \frac{1}{2} (\bar{u}_2|_s + \bar{u}_2|_{se}).$$

Retomando o cálculo do termo $\bar{u}_i^{(m+1)}$, a Eq. (3.40) é aproximada pelo método de Runge-Kutta de segunda ordem, da seguinte forma:

$$\bar{u}_i^{(m+1)}|_S^{n+1} = \bar{u}_i^{(m+1)}|_S^n + \frac{\Delta t}{2} (K_1 + K_2), \quad (3.41)$$

em que K_1 e K_2 representam os passos intermediários do método de Runge-Kutta de segunda ordem. Dessa forma, para $p = 3$, a filtragem temporal do campo de velocidades é feita da seguinte forma:

- Para $m = 1$:

$$K_1 = \frac{\bar{u}_i^{(1)}|_S^n - \bar{u}_i^{(2)}|_S^n}{\Delta}, \quad (3.42)$$

$$K_2 = \frac{\bar{u}_i^{(1)}|_S^{n+1} - \left(\bar{u}_i^{(2)}|_S^n + \Delta t K_1\right)}{\Delta}, \quad (3.43)$$

$$\bar{u}_i^{(2)}|_S^{n+1} = \bar{u}_i^{(2)}|_S^n + \frac{\Delta t}{2} (K_1 + K_2). \quad (3.44)$$

- Para $m = 2$:

$$K_1 = \frac{\bar{u}_i^{(2)}|_S^n - \bar{u}_i^{(3)}|_S^n}{\Delta}, \quad (3.45)$$

$$K_2 = \frac{\bar{u}_i^{(2)}|_S^{n+1} - \left(\bar{u}_i^{(3)}|_S^n + \Delta t K_1\right)}{\Delta}, \quad (3.46)$$

$$\bar{u}_i^{(3)}|_S^{n+1} = \bar{u}_i^{(3)}|_S^n + \frac{\Delta t}{2} (K_1 + K_2). \quad (3.47)$$

- Para $m = 3$:

$$K_1 = \frac{\bar{u}_i^{(3)}|_S^n - \bar{u}_i^{(4)}|_S^n}{\Delta}, \quad (3.48)$$

$$K_2 = \frac{\bar{u}_i^{(3)}|_S^{n+1} - \left(\bar{u}_i^{(4)}|_S^n + \Delta t K_1\right)}{\Delta}, \quad (3.49)$$

$$\bar{u}_i^{(4)}|_S^{n+1} = \bar{u}_i^{(4)}|_S^n + \frac{\Delta t}{2} (K_1 + K_2). \quad (3.50)$$

E com isso, calcula-se a velocidade $v_i|_S$ como combinação linear das velocidades filtradas, da forma:

$$v_i|_S^{n+1} = \sum_{m=0}^3 C_m \bar{u}_i^{(m+1)}|_S^{n+1} \quad (3.51)$$

$$= C_0 \bar{u}_i^{(1)}|_S^{n+1} + C_1 \bar{u}_i^{(2)}|_S^{n+1} + C_2 \bar{u}_i^{(3)}|_S^{n+1} + C_3 \bar{u}_i^{(4)}|_S^{n+1}, \quad (3.52)$$

em que os valores das constantes C_m são dados na Tabela 1.

E a partir de $v_i|_S$, calcula-se a nova velocidade filtrada $\bar{v}_i|_S$ através da filtragem temporal:

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} \Big|_S = \frac{v_i|_S - \bar{v}_i|_S}{\Delta}. \quad (3.53)$$

Utilizando novamente o método de Runge-Kutta de 2ª ordem, aproxima-se a Eq. (3.53) por:

$$\bar{v}_i|_S^{n+1} = \bar{v}_i|_S^n + \frac{\Delta t}{2}(K_1 + K_2), \quad (3.54)$$

em que

$$K_1 = \frac{v_i|_S^n - \bar{v}_i|_S^n}{\Delta}, \quad (3.55)$$

$$K_2 = \frac{v_i|_S^{n+1} - (\bar{v}_i|_S^n + \Delta t K_1)}{\Delta}. \quad (3.56)$$

Analogamente, calcula-se o produto não linear filtrado $\overline{v_i v_j}|_S$, dado pela seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial(\overline{v_i v_j})}{\partial t} \Big|_S = \frac{v_i|_S v_j|_S - \bar{v}_i \bar{v}_j|_S}{\Delta}. \quad (3.57)$$

Novamente, aplicando o método de Runge-Kutta de segunda ordem, tem-se:

$$\overline{v_i v_j}|_S^{n+1} = \overline{v_i v_j}|_S^n + \frac{\Delta t}{2}(K_1 + K_2), \quad (3.58)$$

em que

$$K_1 = \frac{v_i|_S^n v_j|_S^n - \overline{v_i v_j}|_S^n}{\Delta}, \quad (3.59)$$

$$K_2 = \frac{v_i|_S^{n+1} v_j|_S^{n+1} - (\overline{v_i v_j}|_S^n + \Delta t K_1)}{\Delta}. \quad (3.60)$$

E, finalmente, calcula-se o tensor submalha, da forma:

$$M_{ij}|_S^{n+1} = \overline{v_i v_j}|_S^{n+1} + \bar{v}_i|_S^{n+1} \bar{v}_j|_S^{n+1}. \quad (3.61)$$

3.4 Aproximação do termo de regularização

Analogamente ao cálculo feito para o tensor submalha, calcula-se o termo de regularização $\chi(\bar{w}_i|_S - \bar{u}_i|_S)$.

Assim como $v_i|_S$, a velocidade $w_i|_S$ é calculada a partir de uma combinação linear das velocidades filtradas $\bar{u}_i^{(m+1)}|_S$. Neste caso, utiliza-se uma deconvolução secundária, dada por:

$$w_i|_S^{n+1} = \sum_{m=0}^q D_m \bar{u}_i^{(m+1)}|_S^{n+1} \quad (3.62)$$

$$= D_0 \bar{u}_i^{(1)}|_S^{n+1} + D_1 \bar{u}_i^{(2)}|_S^{n+1} + D_2 \bar{u}_i^{(3)}|_S^{n+1} + D_3 \bar{u}_i^{(4)}|_S^{n+1}, \quad (3.63)$$

em que os coeficientes da deconvolução secundária são dados pela Tabela 1.

Em seguida, calcula-se a nova velocidade filtrada $\bar{w}_i|_S$ pelo método de Runge-Kutta de segunda ordem:

$$\bar{w}_i|_S^{n+1} = \bar{w}_i|_S^n + \frac{\Delta t}{2} (K_1 + K_2), \quad (3.64)$$

em que

$$K_1 = \frac{w_i|_S^n - \bar{w}_i|_S^n}{\Delta}, \quad (3.65)$$

$$K_2 = \frac{w_i|_S^{n+1} - (\bar{w}_i|_S^n + \Delta t K_1)}{\Delta}. \quad (3.66)$$

E, finalmente, calcula-se o termo de regularização, da forma:

$$\chi \left(\bar{w}_i|_S^{n+1} - \bar{u}_i|_S^{n+1} \right), \quad (3.67)$$

em que χ é considerado igual a 1, conforme descrito no Capítulo 2.

3.5 Algoritmo do método numérico

Admite-se que, em um dado instante de tempo t_n , as variáveis independentes são conhecidas e que as condições de contorno associadas estão especificadas. As equações de Navier-Stokes são resolvidas de maneira segregada. Especificamente, cada ciclo computacional consiste em atualizar as variáveis discretas no tempo t_{n+1} a partir do tempo anterior t_n (ou, no caso do primeiro ciclo, o tempo inicial), utilizando uma série de passos interrelacionados. Em resumo, a sequência dos passos do algoritmo computacional é descrita a seguir:

- **Passo 1:** calcula-se os termos $\mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}^n)$ e $\mathbf{H}(\bar{\mathbf{u}}^{n-1})$ da Eq. (3.5);
- **Passo 2:** calcula-se a velocidade intermediária $\bar{\mathbf{u}}^*$ a partir da discretização da Eq. (3.5);
- **Passo 3:** resolve-se o sistema linear resultante da discretização da equação de Poisson (3.7) pelo método dos Gradientes Conjugados;
- **Passo 4:** atualiza-se o campo de velocidades a partir da discretização da Eq. (3.8);
- **Passo 5:** corrige-se a pressão a partir da discretização da Eq.(3.9);
- **Passo 6:** avança-se o passo de tempo para cada velocidade filtrada pelo método de Runge-Kutta de segunda ordem através das Eqs. (3.41), (3.54) e (3.64);
- **Passo 7:** calcula-se o tensor submalha a partir da Eq. (3.61);
- **Passo 8:** calcula-se o termo de regularização a partir da Eq. (3.67);

- **Passo 9:** atualiza-se as condições de contorno necessárias e retorna-se ao **Passo 1**, iniciando um novo ciclo computacional.

Dessa maneira, a partir de um tempo t_n , os passos acima formam um ciclo computacional para o cálculo das variáveis primitivas $\bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{u}_3$, do tensor submalha e do termo de regularização num tempo posterior $t_{n+1} = t_n + \Delta t$.

VERIFICAÇÃO, VALIDAÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS NUMÉRICOS

4.1 Escoamento em um canal turbulento

A simulação do escoamento num canal totalmente desenvolvido é muito utilizada para a verificação de modelos turbulentos, em que a simplicidade de sua geometria é muito atrativa para a investigação da turbulência. Diversos trabalhos com resultados experimentais e DNS para este problema já foram apresentados por vários pesquisadores. [Nikuradse \(1929\)](#) e [Reichardt \(1938\)](#) foram os primeiros a investigar o escoamento num canal turbulento completamente desenvolvido. [Laufer \(1951\)](#) apresentou os primeiros relatos sobre turbulência estatística para escoamentos a número de Reynolds até $Re = 61600$, entre muitos outros trabalhos relacionados à investigação deste problema. Em 1987, [Kim, Moin e Moser \(1987\)](#) apresentaram os primeiros resultados DNS para a simulação do problema do canal turbulento para $Re_\tau = 180$. Destaca-se também o trabalho de [Moser, Kim e Mansour \(1999\)](#), os quais obtiveram os primeiros resultados para a simulação do canal turbulento a $Re_\tau = 590$. Devido ao avanço computacional, a literatura já apresenta dados de simulações utilizando DNS para o canal turbulento até o número de Reynolds $Re = 10000$, fornecendo uma ampla base de dados para a validação de modelos de turbulência, como RANS e LES. Exemplos do uso destes dados para a verificação de modelos de turbulência, pode-se citar os trabalhos de [Tsang, Trujillo e Rutland \(2014\)](#), [Kremer e Bogey \(2015\)](#) e [Thais *et al.* \(2010\)](#).

Nesse sentido, a metodologia numérica proposta neste trabalho, que combina a modelagem TLES e o método de volumes finitos foi verificada na simulação do escoamento do canal turbulento. Para tanto, considerou-se $Re_\tau = u_\tau h/\nu = 395$, em que u_τ representa a velocidade de atrito e h representa a metade da altura do canal. O passo temporal considerado foi $\Delta t = 0,001h/U_0$, em que o raio do tamanho do filtro temporal utilizado foi $r = \Delta/\Delta t = 8$. Considerou-se também um termo forçante g_x acoplado às equações de Navier-Stokes filtradas

na direção *streamwise*, com o objetivo de garantir que a energia não se dissipe e o escoamento pare. Este termo foi considerado como sendo:

$$g_x = \left(\frac{Re_\tau}{Re_b} \right)^2 = \left(\frac{395}{6800} \right)^2 = 0,00337424. \quad (4.1)$$

Como condição inicial utilizou-se os dados DNS disponíveis em [Thais \(2011\)](#) para os campos de velocidade instantâneo e também para as componentes do tensor de Reynolds. A condição de contorno *no-slip* foi aplicada na direção normal à parede e a condição de simetria foi aplicada na direção *spanwise*, enquanto que na direção *streamwise* considerou-se condição de periodicidade. Para obter um refinamento da malha na região da parede, foi utilizada a estratégia de estiramento de malha na direção normal à parede, conforme ilustra a Fig. 5.

Figura 5 – Malha não uniforme utilizada na simulação do canal turbulento no plano $x - y$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para a verificação da metodologia numérica, diferentes simulações e comparações foram apresentadas, a saber: primeiramente, comparou-se os resultados obtidos pelo TLES com os resultados DNS disponíveis em [Thais \(2011\)](#) ([THAIS](#); [MOMPEAN](#); [GATSKI, 2013](#)); em seguida, comparou-se os resultados TLES com os resultados obtidos pela modelagem LES apresentados por [Tsang, Trujillo e Rutland \(2014\)](#) para os modelos submalha de Smagorinsky e Estrutura Dinâmica, os quais também são comparados com resultados DNS; apresentou-se também uma comparação do modelo TLES com o modelo LES, o qual foi implementado no mesmo código de volumes finitos que o TLES, utilizando-se para esta comparação uma malha grossa, com o objetivo de evidenciar a propriedade de que o modelo TLES pode ser simulado em malhas mais grosseiras. Por fim, apresenta-se um teste de refinamento de malha para a modelagem TLES nas direções x e z , seguindo o que foi feito por [Davidson \(2009\)](#).

4.1.1 Comparação TLES X DNS

Neste teste, os resultados obtidos pela modelagem TLES foram comparados com os resultados DNS de [Thais \(2011\)](#). Para a simulação considerou-se o domínio computacional $2\pi h \times 2h \times \pi h$ em uma malha com $301 \times 97 \times 65$ células computacionais, o que fornece, para a

distância normal à parede, o intervalo $1,05 \leq y^+ \leq 21,2$, de acordo com o estiramento de malha utilizado.

A Fig. 6 apresenta o perfil da velocidade $u^+ = \bar{u}/u_\tau$ em função da distância normal à parede $y^+ = yu_\tau/\nu$. A partir desta figura, pode-se observar que os resultados numéricos utilizando a modelagem TLES estão em adequada concordância com os dados numéricos DNS de [Thais \(2011\)](#).

As Figs. 7 - 10 apresentam, respectivamente, os resultados numéricos para as componentes do tensor de Reynolds τ_{xy} , τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{zz} , normalizadas por u_τ , em função da distância normal à parede y^+ . Analisando estas figuras, pode-se concluir que os resultados numéricos de TLES para as 4 componentes do tensor submalha estão em boa concordância com os dados DNS.

Figura 6 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 7 – Tensor de Reynolds cruzado (*shear stress*) para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig. 11 apresenta-se o perfil da energia cinética turbulenta, a qual é calculada por $k = 0,5(u_i' u_i')$, $i = 1, 2, 3$ e normalizada por u_τ , sendo apresentada em função da distância

Figura 8 – Tensor de Reynolds na direção *streamwise* para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 9 – Tensor de Reynolds na direção normal à parede para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 10 – Tensor de Reynolds na direção *spanwise* para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

normal à parede y^+ . Pode-se observar a partir desta uma boa concordância entre os resultados TLES e DNS, o que era esperado, considerando os resultados apresentados pelo TLES para os tensores submalha.

Calculou-se também o espectro de energia turbulento $E(f)$ em função da frequência (f), o qual é apresentado na Fig. 12. A partir desta figura, observa-se que a transferência de energia das grandes escalas (estruturas de baixas frequências) para as pequenas escalas (estruturas de altas frequências) obedece a regra dos $-5/3$ de Kolmogorov (POPE, 2000).

A Fig. 13 apresenta a evolução temporal da velocidade longitudinal no centro do ca-

Figura 11 – Energia cinética k em função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 12 – Espectro de energia turbulento em função da frequência apresentado pelo modelo TLES para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

nal (posição dada pela célula (150,48,32)). Esta figura ilustra o comportamento turbulento, altamente oscilatório, da velocidade $\bar{u}$ obtida pela modelagem TLES, mostrando que este se mantém ao longo de toda a simulação.

Por fim, apresentam-se nas Figs. 14 ilustrações dos contornos das componentes (a) u e (b) v da velocidade no plano $z = \pi h/2$, ou seja, no centro do canal. A partir destas figuras, pode-se visualizar o comportamento característico das estruturas em um canal turbulento, em especial o surgimento de vórtices, principalmente nas regiões próximas à parede.

Figura 13 – Evolução temporal da velocidade longitudinal no centro do canal para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 14 – Contornos das componentes (a) u e (b) v da velocidade no plano $z = \pi h/2$ para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.1.2 Comparação TLES X LES de Tsang, Trujillo e Rutland (2014)

Neste teste, apresenta-se uma comparação entre os resultados obtidos pela modelagem TLES para a simulação do canal turbulento e os resultados apresentados por Tsang, Trujillo e Rutland (2014) com a modelagem LES, em que os modelos submalha de Smagorinsky e Estrutura Dinâmica foram utilizados. Para a simulação do canal turbulento com o modelo TLES considerou-se o domínio computacional $2\pi h \times 2h \times \pi h$, em uma malha com $301 \times 97 \times 65$ células computacionais, sendo $1,05 \leq y^+ \leq 21,2$ o intervalo obtido para a distância normal à parede. É importante observar que Tsang, Trujillo e Rutland (2014) utilizou uma malha com $0,935 \leq y^+ \leq 20$, sendo esta muito semelhante a malha utilizada para a simulação com o TLES.

A Fig. 15 apresenta a velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ . Os resultados obtidos pela modelagem TLES foram comparados com resultados LES (TSANG; TRUJILLO; RUTLAND, 2014) e DNS (THAIS, 2011). A partir desta figura, pode-se concluir que os resultados obtidos com o TLES estão mais próximos da solução DNS que os resultados apresentados pelos modelos LES.

Figura 15 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ : uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

As Figs. 16 - 19 apresentam, respectivamente, os resultados para as seguintes componentes do tensor de Reynolds selecionadas: τ_{xy} , τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{zz} , as quais foram normalizadas por u_τ e são dadas em função da distância normal à parede y^+ .

A partir da Fig. 16 observa-se boa concordância dos resultados de TLES com a solução DNS para o tensor τ_{xy} , enquanto que os resultados obtidos pelos modelos LES encontram-se mais distantes da solução DNS. Os resultados obtidos pelo modelo de Estrutura Dinâmica mostraram-se mais próximos da solução DNS na região próxima à parede que os resultados obtidos pelo TLES, no entanto, no restante do domínio, subestimaram a solução DNS.

A Fig. 17 apresenta os resultados para a primeira componente do tensor de Reynolds, τ_{xx} . A partir desta figura pode-se concluir que a solução obtida pelo modelo TLES superestima os resultados DNS, assim como os resultados apresentados por *Thais et al. (2010)* e *Pruett et al. (2006)* para os números de Reynolds $Re_\tau = 180$ e $Re_\tau = 590$, respectivamente. O mesmo comportamento é apresentado pelo modelo LES com Estrutura Dinâmica na região próxima à parede, subestimando novamente a solução DNS no restante do domínio. Já os resultados obtidos pelo modelo Smagorinsky apresentam-se deslocados em relação aos dados DNS.

Os resultados da Fig. 18 mostram a componente τ_{yy} do tensor de Reynolds. A partir desta figura pode-se concluir que o modelo TLES apresentou melhor concordância com os

dados DNS que os modelos LES, em que a solução obtida pelo modelo Estrutura Dinâmico mostrou-se bem distante da solução DNS.

Finalmente, a Fig. 19 mostra os resultados para a componente τ_{zz} do tensor de Reynolds, em que, novamente, o modelo TLES apresentou os resultados mais próximos dos dados DNS que os modelos LES.

De modo geral, pode-se concluir que, neste teste de comparação, a modelagem TLES apresentou melhores resultados que os modelos LES de Smagorinsky e Estrutura Dinâmico obtidos por Tsang, Trujillo e Rutland (2014) para o problema do canal turbulento para $Re_\tau = 395$.

Figura 16 – Tensor de Reynolds cruzado (*shear stress*): uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 17 – Tensor de Reynolds na direção *streamwise*: uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 18 – Tensor de Reynolds na direção normal à parede: uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 19 – Tensor de Reynolds na direção *spanwise*: uma comparação entre LES, TLES e DNS para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.1.3 Comparação TLES X LES em volumes finitos

Neste teste, comparou-se a modelagem TLES com a LES utilizando o modelo submalha Dinâmico de [Germano *et al.* \(1991\)](#), modelo este que também foi implementado no código computacional utilizado neste trabalho via método de volumes finitos. O objetivo desta comparação é evidenciar uma das propriedades apresentadas pelo TLES, a qual afirma que, pelo fato de o modelo remover as altas frequências do espectro de frequências, ele pode ser aplicado com uma resolução mais grosseira ([PRUETT *et al.*, 2006](#)). Para esta simulação considerou-se o domínio $4\pi h \times 2h \times \pi h$ em uma malha com $151 \times 65 \times 65$ células computacionais, sendo $5,24 \leq y^+ \leq 23,81$ o intervalo para a distância normal à parede.

A Fig. 20 apresenta a velocidade u^+ em função da distância normal à parede y^+ . Pode-se concluir a partir desta figura que os resultados obtidos pela modelagem TLES estão mais próximos da solução DNS que os resultados obtidos por LES, principalmente na região da subcamada inercial turbulenta.

Figura 20 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ : comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

As Figs. 21 - 24 apresentam, respectivamente, os resultados numéricos para as componentes do tensor de Reynolds τ_{xy} , τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{zz} normalizadas por u_τ e dadas em função de y^+ .

A partir da Fig. 21, a qual apresenta o perfil para a componente τ_{xy} do tensor submalha, observa-se claramente que os resultados obtidos pela modelagem TLES encontram-se bem mais próximos da solução DNS do que os resultados de LES.

Os resultados numéricos para a componente τ_{xx} do tensor são apresentadas na Fig. 22. A partir desta figura, observa-se que, apesar de ambos os modelos, TLES e LES, superestimarem a solução DNS (como era esperado para esta componente do tensor de Reynolds), a solução obtida pelo TLES está mais próxima da DNS que os resultados de LES.

A Fig. 23 apresenta os resultados para a componente τ_{yy} do tensor, a partir da qual pode-se concluir, novamente, que o modelo TLES apresenta melhor concordância com os dados DNS que os resultados de LES.

E por fim, a Fig. 24 apresenta a solução numérica para a componente τ_{zz} do tensor submalha, a qual mostra que os modelos TLES e LES subestimam os dados DNS, no entanto os resultados de TLES encontram-se mais próximos dos DNS do que os resultados de LES.

A Fig. 25 representa a evolução temporal da velocidade $\bar{u}$ no centro do canal na posição (75,32,32) do domínio computacional. A partir dessa figura é possível notar uma propriedade interessante: nos primeiros passos de tempo, os dois modelos, TLES e LES, apresentam o mesmo comportamento, já que ambos são inicializados com dados DNS. No entanto, a partir de um certo tempo de simulação, os resultados obtidos com o modelo TLES apresentam um comportamento bem mais oscilatório que os de LES, comportamento este que é mantido no

Figura 21 – Tensor de Reynolds cruzado (*shear stress*): comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 22 – Tensor de Reynolds na direção *streamwise*: comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 23 – Tensor de Reynolds na direção normal à parede: comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

decorrer da simulação.

Figura 24 – Tensor de Reynolds na direção *spanwise*: comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 25 – Evolução temporal da velocidade longitudinal no centro do canal: comparação dos modelos TLES e LES em volumes finitos para $Re_\tau = 395$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.1.4 Teste de refinamento de malha

Nesta Seção é apresentado um teste de refinamento de malha para o modelo TLES, com o objetivo de mostrar a dependência de malha deste modelo para a simulação do problema do canal turbulento. O refinamento de malha foi considerado nas direções x e z , seguindo o que foi feito por Davidson (2009).

Considerar um refinamento de malha na direção normal à parede y não é um processo tão natural quanto considerar o refinamento nas direções *streamwise* e *spanwise*. Isso se deve ao fato de que existe um consenso geral na literatura que diz que, para a simulação das grandes escalas, deve-se respeitar a condição $y^+ < 5$ para o primeiro ponto de malha. Devido a esse fato, o refinamento foi apresentado apenas para as direções x e z .

4.1.4.1 Refinamento na direção x

Para esta simulação considerou-se o domínio $4\pi h \times 2h \times \pi h$ em três diferentes malhas, M1, M2 e M3, as quais são apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3 – Malhas utilizadas no teste de refinamento na direção x .

Malhas	Nx	Ny	Nz
M1	75	65	65
M2	151	65	65
M3	301	65	65

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig. 26 apresenta-se o perfil da velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ . Pode-se concluir a partir desta figura que, conforme a malha vai sendo refinada, os resultados obtidos com o modelo TLES vão convergindo para os resultados DNS, como era esperado.

Figura 26 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

As Figs. 27 - 30 apresentam os resultados numéricos para as componentes do tensor de Reynolds τ_{xy} , τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{zz} , respectivamente, normalizadas por u_τ , e dadas em função da distância normal à parede y^+ . A partir destas figuras, observa-se claramente que conforme refina-se a malha, os resultados para as componentes do tensor submalha convergem para os resultados DNS. Nota-se que, para as componentes τ_{xy} e τ_{yy} , os resultados obtidos com a malha M3 subestimaram e superestimaram, respectivamente, os resultados DNS para a região distante da parede.

Figura 27 – Tensor normal cruzado (*shear stress*) para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 28 – Tensor normal *streamwise* para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 29 – Tensor normal *wall-normal* para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.1.4.2 Refinamento na direção z

Diferentemente do que acontece com o refinamento de malha na direção *streamwise*, o refinamento na direção *spanwise*, apesar de também mostrar que os resultados convergem para a solução DNS conforme a malha é refinada, não deixam isso tão evidente, considerando que a malha mais fina converge para uma solução bem próxima à solução obtida pela malha intermediária. Para esta simulação considerou-se o domínio $4\pi h \times 2h \times \pi h$ em três diferentes malha, M1, M2 e M3, as quais são apresentadas na Tabela 4.

Na Fig. 31 apresenta-se o perfil da velocidade u^+ como função da distância normal

Figura 30 – Tensor normal *wall-normal* para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 4 – Malhas utilizadas no teste de refinamento na direção z .

Malhas	Nx	Ny	Nz
M1	151	65	33
M2	151	65	65
M3	151	65	131

Fonte: Elaborada pelo autor.

à parede y^+ . A partir desta figura conclui-se que, conforme a malha vai sendo refinada, os resultados vão convergindo para os resultados DNS, como esperado, apesar de as soluções obtidas com a malha M3 estarem muito próximas das obtidas com a malha M2.

Figura 31 – Velocidade u^+ como função da distância normal à parede y^+ para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z .

Fonte: Elaborada pelo autor.

As Figs. 32 - 35 apresentam, respectivamente, os resultados numéricos para as componentes do tensor de Reynolds τ_{xy} , τ_{xx} , τ_{yy} e τ_{zz} , normalizadas por u_τ e dadas em função de y^+ . A partir destas figuras, observa-se que conforme refina-se a malha, os resultados para as

componentes do tensor submalha convergem para a solução DNS. Assim como observado para a velocidade u^+ , os resultados apresentados pela malha M3 estão bem próximos dos resultados obtidos pela malha M2, evidenciando o fato de que o refinamento de malha na direção z apresenta menos efeito na solução numérica do que o teste de refinamento na direção do escoamento.

Figura 32 – Tensor normal cruzado (*shear stress*) para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 33 – Tensor normal *streamwise* para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 34 – Tensor normal *wall-normal* para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 35 – Tensor normal *wall-normal* para $Re_\tau = 395$: teste de refinamento de malha na direção z .

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2 Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante

Este problema é um dos mais estudados na área de DFC pelo fato de ser um importante teste para a verificação de métodos numéricos em termos de precisão, condições de contorno e eficiência numérica. Na literatura é possível encontrar inúmeros trabalhos que descrevem a física deste fenômeno, como, por exemplo, Koseff e Street (1984), Jordan e Ragab (1994), Leriche e Gavrilakis (2000), Shankar e Desphande (2000), Kawaguti (1961), Burggraf (1966), Ghia, Ghia e Shin (1982). No entanto, nenhum resultado deste escoamento utilizando a modelagem TLES pôde ser encontrado na literatura, sendo portanto inéditos os resultados reportados aqui para este escoamento.

Embora a geometria deste problema seja relativamente simples, o escoamento representa um fenômeno físico complexo, em que múltiplos vórtices contra-rotativos surgem nas regiões próximas aos cantos e bordas da cavidade. De acordo com Bouffanais *et al.* (2006), o escoamento é laminar na maior parte do domínio e a turbulência se desenvolve próximo as paredes da cavidade, sendo sua principal característica o surgimento de recirculações de grande escala.

Para as simulações aqui apresentadas considerou-se uma cavidade cúbica, de lado $L = 2m$ preenchida totalmente com fluido, em que a parede superior (tampa) movimenta-se com uma velocidade constante $U_0 = 1m/s$. A geometria deste problema é apresentada na Fig. 36. Considerou-se também dois valores para o número de Reynolds, $Re = 12000$ e $Re = 18000$, na qual foram utilizadas, respectivamente, malhas de 97^3 e 113^3 células computacionais no domínio $[0, 2] \times [0, 2] \times [0, 2]$. Como parâmetros de escala, considerou-se $U_0 = 1m/s$ e $L = 2h$ como escalas de velocidade e comprimento, respectivamente, em que $h = 1m$ representa metade do comprimento das faces da cavidade. Utilizou-se $\Delta t = 0,001h/U_0$ como passo temporal e tempo final de simulação $t = 200h/U_0$. Em ambos os casos, aplicou-se a estratégia de estiramento de malha nas direções *streamwise* e normal à parede, como mostra a Fig. 37.

De acordo com Leriche e Gavrilakis (2000) a imposição da velocidade $U_0 = 1m/s$ na tampa induz severas descontinuidades ao longo das arestas superiores. Para evitar estas descon-

Figura 36 – Geometria para o problema da cavidade com tampa deslizante.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 37 – Malha computacional não uniforme nas direções x e y .

Fonte: Elaborada pelo autor.

tinuidades utiliza-se um polinômio de alto grau obtido por [Leriche e Gavrilakis \(2000\)](#), dado por:

$$u(x, 2h, z) = U_0(1 - (x/h - 1)^{18})^2(1 - (z/h - 1)^{18})^2, \quad (4.2)$$

$$v = w = 0. \quad (4.3)$$

Nas demais paredes, considerou-se condição de contorno *no-slip* e condição de impermeabilidade, assim como feito por [Leriche e Gavrilakis \(2000\)](#).

Os resultados numéricos obtidos com a modelagem TLES foram comparados com os dados experimentais de Koseff e Street (1984), com os dados DNS de Leriche e Gavrilakis (2000) em uma malha com 129^3 células computacionais e com os dados LES de Shetty *et al.* (2010) para o modelo submalha de Vreman (2004), o qual representa uma recente alternativa para os modelos submalha de Smagorinsky e Smagorinsky Dinâmico. Neste caso, considerou-se uma malha com 64^3 células computacionais para as simulações com $Re = 12000$ e uma malha com 80^3 células computacionais para $Re = 18000$.

4.2.1 $Re = 12000$

As Figs. 38 (a) e (b) apresentam, respectivamente, a comparação dos perfis das velocidades médias u e v nas direções y e x , respectivamente, para $Re = 12000$. Os resultados obtidos pelo modelo TLES apresentam boa concordância com os dados experimentais, DNS e LES, especialmente quando comparados com os dados experimentais.

Figura 38 – Comparação dos perfis das velocidades médias (a) u e (b) v com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os valores RMS das velocidades u e v , dados, respectivamente, por u' e v' , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $y = 1$, são apresentados nas Figs. 39 (a) e (b), respectivamente. Os resultados apresentados pelo modelo TLES estão em boa concordância com os demais resultados de comparação. Já os valores RMS u' e v' no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $x = 1$, são apresentados nas Figs. 40 (a) e (b), respectivamente. Novamente, o modelo TLES mostra boa concordância com os dados experimentais, DNS e LES.

A componente $\langle \tau_{xy} \rangle$ do tensor de Reynolds para $Re = 12000$ é apresentada na Fig. 41 nas direções (a) x e (b) y . Os resultados obtidos pelo modelo TLES concordaram muito bem com os dados comparados, em especial, no caso (a), com os dados experimentais.

A Fig. 42 apresenta os vetores de velocidade no plano $z = 1$, evidenciando o vórtice principal e os grandes vórtices que surgem nas quinas da cavidade (vórtices secundários). A

Figura 39 – Comparação dos valores *RMS* das velocidades (a) u e (b) v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $y = 1$, com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 40 – Comparação dos valores *RMS* das velocidades (a) u e (b) v no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $x = 1$, com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Fig. 43 apresenta o contorno das velocidades instantâneas (a) u e (b) v no plano $z = 1$ para $Re = 12000$. A partir desta figura pode-se observar que o modelo TLES captura as recirculações que surgem nas quinas da cavidade.

E por fim, a Fig. 44 apresenta as isosurfaces do critério q (cuja equação foi obtida no Apêndice B) para $Re = 12000$, para o valor de $q = 0,5$, ilustrando as estruturas vorticais do fenômeno da cavidade, as quais foram capturadas pelo modelo TLES.

Figura 41 – Comparação dos tensores de Reynolds τ_{xy} (*shear stress*) nas direções (a) x e (b) y com dados experimental, DNS e LES para $Re = 12000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 42 – Vetores de velocidade no plano $z = 1$ para $Re = 12000$ no tempo $t = 100s$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.2 $Re = 18000$

As Figs. 45 (a) e (b) mostram a comparação dos perfis das velocidades médias u e v nas direções y e x , respectivamente, para $Re = 18000$. Os resultados obtidos pelo modelo TLES apresentaram adequada concordância com os dados DNS e LES.

Os valores RMS das velocidades u e v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $y = 1$, para $Re = 18000$ são apresentados nas Figs. 46 (a) e (b), respectivamente. Os resultados apresentados pelo modelo TLES estão em boa concordância com os resultados DNS e LES. Já os valores $RMS u'$ e v' no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $x = 1$, são apresentados nas Figs. 47 (a) e (b),

Figura 43 – Contorno das velocidades instantâneas (a) u e (b) v no plano $z = 1$ para $Re = 12000$ no tempo $t = 100s$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 44 – Isosurfaces do critério q para o problema da cavidade, com $q = 0,5$, para $Re = 12000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

respectivamente. Novamente, o modelo TLES mostra boa concordância com os dados DNS e LES. A discrepância que existe próximo à parede pode ser atribuída as aproximações utilizadas na condição de contorno.

A componente $\langle \tau_{xy} \rangle$ do tensor de Reynolds para $Re = 18000$ é apresentada na Fig. 48 nas direções (a) x e (b) y . Mais uma vez, os resultados obtidos pelo modelo TLES concordaram muito bem com os dados DNS e LES.

Figura 45 – Comparação dos perfis das velocidades médias u e v com dados DNS e LES para $Re = 18000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 46 – Comparação dos valores RMS das velocidades (a) u e (b) v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $y = 1$, com dados DNS e LES para $Re = 18000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig. 49 apresenta os vetores de velocidade no plano $z = 1$ para $Re = 18000$, a partir da qual pode-se observar que o modelo TLES captura as recirculações que formam nas regiões da quina da cavidade (vórtices secundários). A Fig. 50 apresenta os contornos das velocidades instantâneas (a) u e (b) v no plano $z = 1$ para $Re = 18000$. A partir desta figura pode-se observar que o modelo TLES reproduz bem as recirculações formadas pelo fenômeno da cavidade com tampa deslizante.

E por fim, a Fig. 51 apresenta as isosurfaces do critério q para $Re = 18000$, para $q = 0,5$, ilustrando as estruturas vorticiais capturadas pelo modelo TLES para a simulação deste fenômeno.

Figura 47 – Comparação dos valores *RMS* das velocidades (a) u e (b) v , no plano médio $z = 1$ ao longo da reta $x = 1$, com dados DNS e LES para $Re = 18000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 48 – Comparação dos tensores de Reynolds τ_{xy} (*shear stress*) nas direções (a) x e (b) y com dados DNS e LES para $Re = 18000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.3 Comentários sobre a verificação

A metodologia numérica proposta foi utilizada na simulação de diferentes testes dos escoamentos em um canal turbulento e em uma cavidade com tampa deslizante, os quais foram apresentados neste Capítulo. A partir dos resultados obtidos, pode-se concluir que a metodologia que combina a modelagem TLES e o método de volumes finitos é capaz de simular escoamentos turbulentos, considerando que apresentou bons resultados na simulação do canal turbulento, principalmente quando utiliza-se uma malha refinada. Além disso, o método mostrou convergência para a solução DNS nos testes de refinamento de malha. Na simulação do escoamento em uma cavidade, a metodologia TLES também apresentou resultados em boa concordância com os dados experimentais, DNS e LES utilizados para comparação, mostrando novamente sua capacidade na simulação das grandes escalas da turbulência.

Figura 49 – Vetores de velocidade no plano $z = 1$ para $Re = 18000$ no tempo $t = 100s$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 50 – Contorno das velocidades instantâneas (a) u e (b) v no plano $z = 1$ para $Re = 18000$ no tempo $t = 100s$.

(a)

(b)

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 51 – Isosurfaces do critério Q para o problema da cavidade, com $q = 0,5$, para $Re = 18000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

CONCLUSÕES

O presente projeto de doutorado teve como objetivo a simulação das grandes escalas de escoamentos turbulentos com filtragem temporal via método de volumes finitos. A principal contribuição deste trabalho está na análise numérica do escoamento em uma cavidade com tampa deslizando tridimensional utilizando a modelagem TLES em volumes finitos

Para tanto, apresentou-se a formulação matemática para a modelagem TLES, em que as equações de Navier-Stokes foram filtradas temporalmente. Apresentou-se também a formulação numérica para as equações de TLES, em que utilizou-se um método de projeção para a segregação da pressão combinado com o método de Adams-Bashforth para a discretização temporal, e o método de volumes finitos em uma malha deslocada para a discretização espacial.

A metodologia numérica proposta foi verificada na simulação de dois problemas *benchmarks*, a saber: o escoamento em um canal turbulento e o escoamento em uma cavidade com tampa deslizando, problema este até então nunca simulado com a metodologia TLES.

Para a verificação na simulação do canal turbulento a número de Reynolds $Re_\tau = 395$, considerou-se 4 diferentes testes, em que comparou-se os resultados obtidos com dados numéricos de DNS e LES. A partir destas comparações, pôde-se concluir que a modelagem TLES obteve uma solução em boa concordância com os dados DNS. Ainda mais, os resultados das simulações TLES mostraram-se consistentes com os resultados obtidos por LES em todas as comparações apresentadas. Nos testes de refinamento de malha, os resultados de TLES mostraram convergência para a solução DNS.

Fez-se também uma validação da metodologia numérica na simulação do escoamento da cavidade com tampa deslizando, para números de Reynolds $Re = 12000$ e $Re = 18000$. Os resultados numéricos obtidos com a modelagem TLES foram comparados com dados experimentais, DNS e LES, mostrando boa concordância com os dados de comparação para ambos números de Reynolds.

Com relação à metodologia numérica, há um consenso na literatura de que códigos com modelagem de turbulência para a simulação das grandes escalas devem ser de alta ordem (GEORGIADIS; RIZZETTA; FUREBY, 2010). No entanto, o método descrito nesta tese tem ordem formal 2 (ambos espacial e temporal), e os resultados numéricos obtidos mostraram-se muito próximos aos resultados experimentais, DNS e LES publicados recentemente (TSANG; TRUJILLO; RUTLAND, 2014).

A partir dos resultados numéricos obtidos e das discussões apresentadas, pode-se concluir que a metodologia numérica que combina a modelagem TLES com o método de volumes finitos é capaz de simular as grandes escalas da turbulência, sendo uma nova alternativa/ferramenta numérica em Dinâmica dos Fluidos Computacional.

É importante notar que há um potencial muito grande na modelagem TLES que ainda não foi explorado na literatura, como a influência dos parâmetros desta metodologia. Além disso, diferentes métodos numéricos podem ser utilizados tanto na resolução das equações de Navier-Stokes quanto no processo de filtragem temporal. Outras aplicações também devem ser exploradas utilizando a modelagem TLES, como por exemplo, a simulação do *open channel flow* e do escoamento ao redor de um obstáculo (fluido-estrutura).

REFERÊNCIAS

BOUFFANAIS, R.; DEVILLE, M.; FISCHER, M.; LERICHE, E.; WEILL, D. Large-eddy simulation of the lid-driven cubic cavity flow by the spectral element method. **J. Sci. Comput.**, v. 27, p. 151–162, 2006. Citado na página 79.

BRADSHAW, P. Understanding and prediction of turbulent flow. **Int. J. of Heat and Fluid Flow**, v. 18, p. 45–54, 1997. Citado na página 36.

BURGGRAPH, O. Analytical and numerical studies of the structure of steady separated flows. **J. of Fluid Mech.**, v. 24, p. 113–151, 1966. Citado na página 79.

CHORIN, A. Numerical solution of the navier-stokes equations. **Math. Comp.**, v. 22, p. 745–762, 1968. Citado na página 50.

CLARK, R. A.; FERZIGER, J. H.; REYNOLDS, W. C. Evaluation of subgrid model using an accurately simulated turbulent flow. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 91, p. 1–16, 1979. Citado na página 37.

COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial differential equations of mathematical physics. **IBM Journal Research and Development**, v. 11, p. 215–234, 1967. Citado na página 51.

DAVIDSON, L. Large eddy simulations: how to evaluate resolution. **Int. J. of Heat and Fluid Flow**, v. 30, n. 5, p. 1016–1025, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 64 e 74.

DEARDORFF, J. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 41, p. 453–480, 1970. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 39.

FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos - Conceitos Básicos e Aplicações**. [S.l.: s.n.], 2000. Citado na página 35.

FRISCH, U. **Turbulence**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 41.

GEORGIADIS, N.; RIZZETTA, D.; FUREBY, C. Large-eddy simulation: Current capabilities, recommended practices, and future research. **AIAA Journal**, v. 48, n. 8, 2010. Citado na página 90.

GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. **Physics of Fluids**, v. 3, n. 7, p. 1760, 1991. Citado 4 vezes nas páginas 39, 40, 41 e 71.

GHIA, U.; GHIA, K.; SHIN, C. High-resolutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. **J. of Comp. Phys.**, v. 48, p. 387–411, 1982. Citado na página 79.

- JEONG, J.; HUSSAIN, F. On the identification of a vortex. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 285, p. 69–94, 1995. Citado na página 97.
- JORDAN, S.; RAGAB, S. On the unsteady and turbulent characteristics of the three-dimensional shear-driven cavity flow. **J. Fluids Eng.**, v. 116, p. 439–449, 1994. Citado na página 79.
- KAWAGUTI, M. Numerical solution of the navier-stokes equations for the flow in a two dimensional cavity. **J. Phys. Soc. Japan**, v. 16, p. 2307–2327, 1961. Citado na página 79.
- KIM, J.; MOIN, P.; MOSER, R. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low reynolds number. **J. Fluid Mech.**, v. 177, p. 133–166, 1987. Citado na página 63.
- KOSEFF, J.; STREET, R. The lid-driven cavity flow: a synthesis of qualitative and quantitative observations. **J. Fluids Eng.**, v. 106, p. 390–398, 1984. Citado 2 vezes nas páginas 79 e 81.
- KREMER, F.; BOGEY, C. Large-eddy simulation of turbulent channel flow using relaxation filtering: Resolution requirement and reynolds number effects. **Computers & Fluids**, v. 116, p. 17–28, 2015. Citado na página 63.
- LAUFER, J. Investigation of turbulent flow in a two-dimensional channel. **NACA Rep.**, v. 1053, 1951. Citado na página 63.
- LE, H.; MOIN, P.; KIM, J. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 330, p. 349–374, 1997. Citado na página 46.
- LEONARD, A. On the energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. **Adv. Geophys.**, v. 18A, p. 237–248, 1974. Citado na página 37.
- LEONARD, B. P. A stable and accurate convective modelling procedure base and quadratic upstream interpolation. **Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.**, v. 19, p. 59–98, 1979. Citado 2 vezes nas páginas 49 e 55.
- LERICHE, E.; GAVRILAKIS, S. Direct numerical simulation of the flow in a lid-driven cubical cavity. **Physics of Fluids**, v. 12, n. 6, p. 1363–1376, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 79, 80 e 81.
- LESIEUR, M.; MÉTAIS, O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. **Annu. Rev. Fluid. Mech.**, v. 28, p. 45–82, 1996. Citado 4 vezes nas páginas 38, 40, 41 e 43.
- LILLY, D. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In: **Proc. IBM Scientific Computing Symp. on Environmental Sciences**. [S.l.: s.n.], 1967. Yorktown Heights, NY. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 39.
- _____. A proposed modification of the germano sub-grid scale closure method. **Physics of Fluids**, v. 4, p. 633–635, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 41.
- MOSER, R.; KIM, J.; MANSOUR, N. Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re=590$. **Physics of Fluids**, v. 11, n. 4, p. 943–945, 1999. Citado na página 63.
- NETO, A. S.; GRAND, D.; MÉTAIS, O.; LESIEUR, M. A numerical investigation of coherent vortices in turbulence behind a backward-facing step. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 256, p. 1–25, 1993. Citado na página 37.

- NIKURADSE, J. Untersuchungen iiber die stromungen des wassers in konvergenten und divergenten kaniilen. **Forsch. Geb. Ing. Wes.**, 1929. Citado na página 63.
- POPE, S. **Turbulent Flows**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. Citado 5 vezes nas páginas 29, 31, 37, 41 e 66.
- PRUETT, C. Temporal large-eddy simulation: theory and implementation. **Theor. Comput. Fluid Dyn.**, 2008. Citado 6 vezes nas páginas 32, 33, 41, 42, 43 e 45.
- PRUETT, C.; GATSKI, T.; GROSCHE, C.; THACKER, W. The temporally filtered navier-stokes equations: Properties of the residual stress. **Physics of Fluids**, v. 15, p. 2127, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 32, 33 e 41.
- PRUETT, C.; THOMAS, B.; GROSCHE, C.; GATSKI, T. A temporal approximate deconvolution model for large-eddy simulation. **Physics of Fluids**, v. 18, n. 028104, 2006. Citado 6 vezes nas páginas 33, 43, 44, 45, 69 e 71.
- REICHARDT, H. Messungen turbulenter schwankungen. **Naturwissenschaften**, v. 26, p. 404, 1938. Citado na página 63.
- REYNOLDS, O. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels. **Proc. R. Soc.**, v. 35, p. 84–99, 1883. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 36.
- SAGAUT, P. **Large Eddy Simulation for Incompressible Flows**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 1998. Citado na página 46.
- SHANKAR, P.; DESPHANDE, M. Fluid mechanics in the driven cavity. **Annu. Rev. Fluid Mech.**, v. 32, p. 93–136, 2000. Citado na página 79.
- SHETTY, D.; FISHER, T.; CHUNKEAR, A.; FRANKEL, S. High-order incompressible large-eddy simulation of fully inhomogeneous turbulent flows. **J. Comp. Phys.**, v. 229, p. 8802–8822, 2010. Citado na página 81.
- SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with primitive equations. **Mon. Weather Rev.**, v. 91, n. 99-164, 1963. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 39.
- STOLZ, S.; ADAMS, . N. A.; KLEISER, . L. An approximate deconvolution model for large-eddy simulation with application to incompressible wall-bounded flows. **Physics of Fluids**, v. 13, n. 4, p. 997:1015, 2001. Citado na página 33.
- STOLZ, S.; ADAMS, N. A. An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation. **Physics of Fluids**, v. 11, n. 7, p. 1699:1701, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 33.
- TEJADA-MARTÍNEZ, A.; GROSCHE, C.; GATSKI, T. Temporal large-eddy simulation of unstratified and stably stratified turbulent channel flows. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 28, p. 1244–1261, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 33, 41, 43 e 45.
- THAIS, L. **DNS of Newtonian and Non-Newtonian Turbulent Channel Flows up to $Re=3000$** . França: [s.n.], 2011. Disponível em: <http://lthais.plil.fr/channeldata/>. Citado 4 vezes nas páginas 46, 64, 65 e 69.
- THAIS, L.; MOMPEAN, G.; GATSKI, T. Spectral analysis of turbulent viscoelastic and newtonian channel flows. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, v. 200, p. 165–176, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 64.

THAIS, L.; TEJADA-MARTÍNEZ, A.; GATSKI, T.; MOMPEAN, G. Temporal large eddy simulations of turbulent viscoelastic drag reduction flows. **Physics of Fluids**, v. 22, n. 013103, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 33, 45, 46, 63 e 69.

TSANG, C.; TRUJILLO, M.; RUTLAND, C. Large-eddy simulation of shear flows and high-speed vaporizing liquid fuel sprays. **Computers & Fluids**, v. 105, p. 262–279, 2014. Citado 7 vezes nas páginas 27, 63, 64, 68, 69, 70 e 90.

VREMAN, A. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: algebraic theory and applications. **Phys. Fluids**, v. 16, p. 3670–3681, 2004. Citado na página 81.

VREMAN, B.; GEURTS, B.; HUERTEN, H. Realizability conditions for the turbulent stress tensor in large-eddy simulation. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 278, p. 351, 1994. Citado na página 42.

FILTRAGEM TEMPORAL

Na Subseção 2.3.1 foi apresentada a filtragem temporal, em que o filtro exponencial foi utilizado. Em sua forma diferencial, a filtragem temporal é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t; \Delta) = \frac{f(t) - \bar{f}(t; \Delta)}{\Delta}. \quad (\text{A.1})$$

Neste apêndice será mostrado como se obtém a forma diferencial da filtragem temporal utilizando o filtro exponencial dada pela Eq. (A.1).

O operador integral que define o filtro exponencial é dado por:

$$\bar{f}(t; \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) dT. \quad (\text{A.2})$$

Diferenciando a Eq. (A.2) em t e utilizando a regra de Leibniz, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t; \Delta) &= \frac{1}{\Delta} \left\{ \lim_{N \rightarrow -\infty} \int_N^t \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) \right] dT \right. \\ &\quad \left. + \lim_{N \rightarrow -\infty} \int_N^t \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\partial t}{\partial T} \exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) \right] dT \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\Delta} \left\{ -\frac{1}{\Delta} \lim_{N \rightarrow -\infty} \int_N^t \left[\exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) \right] dT \right. \\ &\quad \left. + \lim_{N \rightarrow -\infty} \left[\exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) \right] \Big|_N^t \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Utilizando a definição de $\bar{f}(t; \Delta)$ dada pela Eq. (A.2), pode-se escrever:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t; \Delta) = \frac{1}{\Delta} \left\{ -\bar{f}(t; \Delta) + \lim_{N \rightarrow -\infty} \left[\exp\left(\frac{T-t}{\Delta}\right) f(T) \right] \Big|_N^t \right\}.$$

Aplicando os limites de integração, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t; \Delta) = \frac{1}{\Delta} [-\bar{f}(t; \Delta) + f(t)]. \quad (\text{A.5})$$

Finalmente, a forma diferencial da filtragem temporal com filtro exponencial é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{f}(t; \Delta) = \frac{f(t) - \bar{f}(t; \Delta)}{\Delta}. \quad (\text{A.6})$$

CÁLCULO DO CRITÉRIO q

O critério q é muito utilizado para a visualização de estruturas em escoamentos turbulentos. Foi definido por [Jeong e Hussain \(1995\)](#) da seguinte forma:

$$q = \frac{1}{2} (\|\Omega\|^2 - \|S\|^2), \quad (\text{B.1})$$

em que Ω representa o tensor vorticidade e S representa o tensor deformação, os quais são dados, respectivamente, por:

$$\Omega = \frac{1}{2} (\nabla \bar{u} - (\nabla \bar{u})^T), \quad (\text{B.2})$$

e

$$S = \frac{1}{2} (\nabla \bar{u} + (\nabla \bar{u})^T). \quad (\text{B.3})$$

Na notação Euleriana, tem-se que os tensores vorticidade e deformação são dados, respectivamente, por:

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (\text{B.4})$$

e

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (\text{B.5})$$

Considerando a norma matricial de Frobenius, tem-se que:

$$\|\Omega\|^2 = tr(\Omega_{ij}\Omega_{ji}) \quad (\text{B.6})$$

e

$$\|S\|^2 = tr(S_{ij}S_{ji}). \quad (\text{B.7})$$

Calculando os produtos em (B.6) e (B.7), obtém-se:

$$\Omega_{ij}\Omega_{ji} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} - \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} - \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y}\right) & 0 & \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} - \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} - \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z}\right) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} - \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} - \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y}\right) & 0 & \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} - \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} - \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z}\right) & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_{ij}S_{ji} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \left(2\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y}\right) & \left(2\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial y}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z}\right) & \left(2\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial z}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(2\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y}\right) & \left(2\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial y}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}\right) & \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z}\right) & \left(2\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial z}\right) \end{pmatrix}$$

Calculando o traço da matriz resultante dos produtos acima, obtém-se:

$$\begin{aligned} tr(\Omega_{ij}\Omega_{ji}) &= \frac{1}{4} \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} - \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} - \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x}\right)^2 \right. \\ &\quad + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} - \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y}\right)^2 \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} - \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} - \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z}\right)^2 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} tr(S_{ij}S_{ji}) &= \frac{1}{4} \left[\left(2\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x}\right)^2 \right. \\ &\quad + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y}\right)^2 + \left(2\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y}\right)^2 \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} + \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z}\right)^2 + \left(2\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial z}\right)^2 \right] \end{aligned}$$

Substituindo $\|\Omega\|^2$ e $\|S\|^2$ na Eq. (B.1), obtém-se:

$$\begin{aligned}
 q &= \frac{1}{2} [tr(\Omega_{ij}\Omega_{ji}) - tr(S_{ij}S_{ji})] \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{4} \left[-2 \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} \right) - 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} \right) - 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. - 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} \right) - 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \right) - 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} \right) \right] \\
 &\quad - \frac{1}{4} \left[4 \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x} \right)^2 + 4 \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial y} \right)^2 + 4 \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial z} \right)^2 \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} \right) + 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} \right) + 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} \right) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} \right) + 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \right) + 2 \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} \frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Rearranjando os termos, finalmente, obtém-se a expressão para o critério q , dada por:

$$\begin{aligned}
 q = & - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}_3}{\partial z} \right)^2 \right] \\
 & - \left[\left(\frac{\partial \bar{u}_1}{\partial z} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}_1}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \bar{u}_2}{\partial z} \frac{\partial \bar{u}_3}{\partial y} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{B.8}$$