RICARDO TADEU OLIVEIRA CATTA PRETA

IMPLEMENTAÇÃO, COMPARAÇÃO E AVALIAÇÃO DE MODELOS SUBMALHAS NÃO LINEARES

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA 2018

RICARDO TADEU OLIVEIRA CATTA PRETA

IMPLEMENTAÇÃO, COMPARAÇÃO E AVALIAÇÃO DE MODELOS SUBMALHAS NÃO LINEARES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Uberlândia - MG 2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

C368i 2018	Catta Preta, Ricardo Tadeu Oliveira, 1989- Implementação, comparação e avaliação de modelos submalhas não lineares [recurso eletrônico] / Ricardo Tadeu Oliveira Catta Preta 2018.
	Orientador: Aristeu da Silveira Neto. Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.1199 Inclui bibliografia. Inclui ilustrações.
	1. Engenharia mecânica. 2. Escoamento turbulento. 3. Dinâmica dos fluidos - Modelos matemáticos. I. Silveira Neto, Aristeu da, 1955- (Orient.) II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós- Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902 Telefone: (34) 3239-4282 - www.posgrad.mecanica.ufu.br



TERMO

 ALUNO: Ricardo Tadeu Oliveira Catta Preta
 MATRÍCULA: 11622EMC018

 ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos
 LINHA DE PESQUISA: Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor

 PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA: NÍVEL MESTRADO
 TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "Implementação, comparação e avaliação de modelos submalhas não lineares"

 ORIENTADOR: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

A Dissertação foi <u>APROVADA</u> em reunião pública, realizada no auditório do Laboratório de Mecânica dos Fluidos - bloco 5P, Campus Santa Mônica, em 08 de agosto de 2018, às 13:30 horas, com a seguinte Banca Examinadora:

Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto (orientador) - UFU Prof. Dr. Francisco José de Souza - UFU Prof. Dr. João Marcelo Vedovoto - UFU Prof. Dr. Roney Leon Thompson - UFRJ Dr. Ricardo Serfaty - Petrobrás

Uberlândia, 08 de agosto de 2018



Referência: 08/08/2018 - Processo nº 23117.053456/2018-06

SEI nº 0629858

"Em ciência, devemos acreditar na lógica e em argumentos deduzidos

cuidadosamente, não em autoridades."

Richard P. Feynman

"Não é importante a rapidez com que se aprende, mas que se aprenda."

Mestre dos Magos

CATTA PRETA, R.T.O., Implementação, comparação e avaliação de modelos submalhas não lineares. 2018. 91 f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

No presente trabalho, o problema de fechamento da turbulencia é analisado modelando o tensor de Reynolds submalha de forma não linear, supondo que sua dependência seja com os tensores taxa de deformação e rotação. Compreender como é estabelecida essa dependência, além de avaliar e comparar os diferentes tipos de modelos não lineares presentes na literatura com a tradicional modelagem linear do tensor de Reynolds, é o escopo do presente trabalho. A inclusão de termos não lineares, feita no presente trabalho, teve como objetivo o aprendizado sobre essa complexa forma de modelar o problema de fechamento da turbulência. O trabalho teve ainda como objetivo a formação no uso do código MFSim, desenvolvido no MFLab e a formação na programação de rotinas inseridas nessa plataforma de modelagem computacional de escoamentos turbulentos. Para estabelecer a comparação e avaliação entre os modelos implementados com resultados experimentais encontrados na literatura, foi realizada uma implementação computacional utilizando a metodologia da Simulação das Grandes Escalas, para um problema simples de escoamento turbulento envolvendo uma cavidade com tampa deslizante. Os resultados obtidos com os modelos não lineares, de uma forma geral, coincidiram mais com resultados do experimento material nas regiões próximas às paredes. Já o modelo linear, se aproximou mais dos resultados do experimento material na região central da cavidade. Como esperado, os resultados obtidos com a modelagem linear e não linear não diferiram significativamente, uma vez que a natureza física desse problema não incorpora efeitos como altos níveis de anisotropia, gradientes adversos de pressão e mesmo efeitos de fortes curvaturas nas linhas de corrente.

Palavras chave: Tensor de Reynolds submalha, simulação das grandes escalas, modelagem não linear, problema de fechamento da turbulência.

CATTA PRETA, R.T.O., Implementation, comparison and evaluation of nonlinear subgrid-scale models. 2018. 91 f. Master Dissertation, Federal University of Uberlandia, Uberlandia.

ABSTRACT

In the present work, the turbulence closure problem is analyzed by using a nonlinear subgrid-scale stress model, supposing a dependence on both the rate-of-strain and rate-of-rotation tensors. To understand how this dependence is established, in addition to analyzing different types of nonlinear models existing in the literature, is the scope of the current work. The inclusion of nonlinear terms, made in the present work, has the objective of learning about this complex way of modeling the turbulence closure problem. The work also has the objective of human resources training in the use of the MFSim code, developed on MFLab, and code development of computational models of turbulent flows on the same platform. To benchmark and evaluate the models, a computational implementation was conducted using the Large Eddy Simulation methodology for a simple problem of turbulent flow involving lid-driven cavity problem, which enabled a comparison between models implemented with experimental results found in the literature. The results obtained with the nonlinear models are in good agreement with the results of the physical experiments for flows that occurs near the walls. In contrast, the linear model better matches the results for flows in the central region of the cavity. As expected, the results obtained with the linear and nonlinear modeling did not differ significantly, since the physical nature of this problem does not incorporate effects such as high levels of anisotropy, pressure adverse gradients and even strong curvature effects on streamlines.

Keywords: Subgrid-scale, large eddy simulation, nonlinear models, turbulence closure problem.

Lista de Figuras

1.1	Espectro da energia cinética turbulenta em função do número de onda	2
2.1	Espectro e distribuição de energia nas grandes e pequenas escalas (SILVEIRA-	
	NETO, 2017)	13
2.2	Efeito das filtragens no espectro de energia (FRÖHLICH; RODI, 2002)	14
3.1	Volume de controle para o filtro malha e o filtro teste. Adaptado de Davidson	
	(2011)	26
3.2	Representação gráfica do tensor submalha, tensor submalha teste e o tensor de	
	Leonard no espectro de energia cinética. Adaptado de Poinsot e Veynante (2005).	28
4.1	Domínio espacial discretizado com malha uniforme e igual a uma unidade	36
4.2	Variáveis utilizadas para o volume de controle, com as velocidades calculadas nas	-
	faces; pressão e escalares no centro do volume (ϕ) (XIE, 2015)	39
4.3	Definição das variáveis locais e sistema de coordenadas (ALVES; OLIVEIRA; PI-	
	NHO, 2003)	4I
6.1	Cavidade com tampa deslizante	67
6.2	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Modelo de Hongrui modi-	
	ficado	68
6.3	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Modelo de Hongrui modi-	
	ficado	69
6.4	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Velocidade média em x. $% \left({{{\mathbf{x}}_{i}}} \right)$.	70
6.5	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção x	71
6.6	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Velocidade média em y	71

6.7	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y	72
6.8	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y	73
6.9	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y	74
6.10	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades médias nas	
	direções x e y	76
6.11	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades RMS nas di-	
	reções x e y	77
6.12	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y	79
6.13	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y	80
6.14	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades médias nas	
	direções x e y	81
6.15	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades RMS nas di-	
	reções x e y	82
6.16	Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades RMS nas di-	
	reções x e y	84

Lista de Símbolos

Siglas

RHS_u	Right Hand Side (Lado direito) na direção x
RHS_v	Right Hand Side (Lado direito) na direção y
RHS_w	Right Hand Side (Lado direito) na direção z
DNS	Direct Numerical Simulation
LES	Large Eddy Simulation
MVF	Método dos Volumes Finitos
URANS	Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes
Operadores	
\iiint_V	Integral de volume
∇	Nabla
\oint_{S}	Integral de de área sobre uma superfície fechada
Letras gregas	
$ar{ au_c}$	Escala de corte no tempo
δ_{ij}	Delta de Kronecker
Δx	Dimensão da malha na direção x

Δz	Dimensão da malha na direção z
ν	Viscosidade cinemática
$ u_T$	Viscosidade turbulenta
$\overline{\Omega}_{ij}$	Tensor taxa de rotação filtrado
ρ	Massa específica
$ au_{ij}$	Tensor de Reynolds
$ au_{ij}^d$	Tensor de Reynolds deviatórico
ε	Taxa de transformação viscosa

<u>Letras latinas</u>

$\overline{\mathbf{V}}$	Velocidade média no centro da célula
\overline{p}	Campo de pressão filtrado
\overline{u}	Campo de velocidade filtrada na direção \boldsymbol{x}
$\overline{u}_i(x,y,z,t)$	Campo de velocidade filtrada
\overline{v}	Campo de velocidade filtrada na direção \boldsymbol{y}
\overline{w}	Campo de velocidade filtrada na direção z
C_{ij}	Tensor cruzado
E(f)	Energia cinética turbulenta
f	Frequência do número de onda
f_c	Frequência de corte
L^d_{ij}	Tensor de Leonard deviatórico
l_d	Escala de comprimento de Kolmogorov

ix

L_{ij}	Tensor de Leonard
l_I	Escala integral de comprimento da turbulência
R_{ij}	Operador de Reynolds
S_{ij}	Tensor taxa de deformação
T^d_{ij}	Tensor submalha teste deviatórico
T_{ij}	Tensor submalha teste
u_{ee}	Velocidade na face ee da célula
u_E	Velocidade no ponto E da célula
u_e	Velocidade na face e da célula
u_P	Velocidade no ponto P da célula
u_{ww}	Velocidade na face ww da célula
u_W	Velocidade no ponto W da célula
u_w	Velocidade na face w da célula
$u_i^\prime(x,y,z,t)$	Campo de velocidade flutuante ou submalha
E	Energia cinética turbulenta
k	Número de onda
Re	Numero de Reynolds

х

SUMÁRIO

LI	STA	DE FI	GURAS	vii
1	ΙΝΤ	RODU	ÇÃO	1
	1.1	A mod	delagem da turbulência e o problema do fechamento	I
	1.2	A mod	lelagem não linear para o problema do fechamento	3
	1.3	Objeti	VOS	4
2	RE\	/ISÃO	BIBLIOGRÁFICA	7
	2.1	Model	agem e simulação da turbulência	7
		2.1.1	Simulação Numérica Direta - DNS	8
		2.1.2	Equações Médias de Reynolds Transiente - URANS	IO
		2.1.3	Simulação das Grandes Escalas - LES	12
	2.2	Model	agem linear do tensor submalha	15
		2.2.1	Aplicação correta dos modelos lineares	16
	2.3	3 Modelagem não linear para o tensor submalha		
	2.4	O teor	ema de Cayley-Hamilton	18
3	мо	DELO	MATEMÁTICO DIFERENCIAL	21
3.1 Formulação diferencial para escoamentos incompressíveis		lação diferencial para escoamentos incompressíveis	21	
	3.2	 3.2 Equações diferenciais filtradas		22
	3.3			23
		3.3.1	Modelo de Smagorinsky	24
		3.3.2	Modelo dinâmico de Germano - Lilly	25
	3.4	Model	os não lineares para o fechamento da turbulência	28

		3.4.1 Mode	elo não linear proposto por S.B. Pope	28
		3.4.2 Mode	elo não linear de Lund e Novikov	30
		3.4.3 Mode	elo dinâmico de segunda ordem das tensões sub-malhas de Hongrui	30
		3.4.4 Mode	elo dinâmico não linear das tensões submalhas de Bergstrom	32
4	мо	DELAGEM I	NUMÉRICA	34
	4.1	Formulação d	livergente e não divergente	34
	4.2	Discretização	espacial das equações de Navier-Stokes e da Continuidade	38
	4.3	Esquema nur	nérico para o termo advectivo	40
	4.4	Integração te	mporal	42
	4.5	Acoplamento	Pressão - Velocidade	43
	4.6	Método Mult	igrid	45
5	мо	DELAGEM [DE FECHAMENTO NAO LINEAR	47
	5.1	Modelo não l	inear de Wang e Bergstrom	47
		5.1.1 Mode	elo não linear de Hongrui - modificado	47
	5.2	Modelo de S	.B. Pope	50
	5.3	Modelo não I	linear de Serrin	52
	5.4	Nova propost	ta do cálculo dos coeficientes	54
	5.5	Modelo linea	r dependente dos tensores taxa de deformação e rotação	55
	5.6	Modelo não	linear dependente do gradiente de velocidade	56
6	RES	ULTADOS E	E DISCUSSÕES	59
	6.1	Uma escolha	precisa dos componentes tensoriais	60
		6.1.1 A esc	olha dos componentes tensoriais	62
	6.2	Cavidade cor	n tampa deslizante	66
		6.2.1 Mode	elo não linear de Hongrui - modificado	67
		6.2.2 Comp	paração do modelo de Hongrui com Germano	69
		6.2.3 Mode	elo não linear de S. B. Pope	72
		6.2.4 Mode	los de Serrin	75
		6.2.5 Mode	elo de Hongrui com coeficiente simplificado	77

	6.2.6	Modelo linear dependente de S_{ij} e Ω_{ij}	81
	6.2.7	Modelo não linear dependente do gradiente de velocidade	83
7	CONCLUS	ÕES E TRABALHOS FUTUROS	86
R	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		89

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1.1 A modelagem da turbulência e o problema do fechamento

Para o escoamento de um fluido newtoniano, incompressível, com propriedades físicas constantes e tridimensional, o sistema de equações composto pelas equações de Navier-Stokes juntamente com a equação da continuidade, é composto por 4 incógnitas e 4 equações. Para este caso dizemos que o problema está fechado, e com as devidas condições de contorno e condições iniciais é possível resolver numericamente o sistema composto pelas equações de Navier-Stokes juntamente com a equação da continuidade, podendo então modelar o escoamento dos fluidos do ponto de vista da mecânica do contínuo.

Um número adimensional que é extremamente importante na mecânica dos fluidos, o número de *Re*, relaciona as forças de inércia com forças viscosas que atuam no fluido. A partir deste adimensional é possível ter um indicativo se o escoamento está ocorrendo no regime turbulento.

Quando o escoamento atinge altos números de Reynolds e se torna turbulento a metodologia utilizada para resolver diretamente as equações de Navier-Stokes e da continuidade, que é conhecida como DNS (Direct Numerical Simulation), requer a solução de todo o espectro de estruturas turbilhonares que compõem o escoamento. Portanto todas as escalas de tempo e comprimento precisam ser resolvidas, e com um custo computacional que cresce proporcional a $Re^{\frac{9}{4}}$, o que torna o custo desse método computacionalmente muito elevado para escoamentos com altos valores do numero de Reynolds. (POPE, 2001).

Para evitar esse alto custo computacional e com o intuito de resolver problemas com aplicações práticas na indústria, surgiram formas mais simplificadas de atacar o problema. Assim, metodologias como LES (Large Eddy Simulation) e URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes), que não apresentam resultados tão precisos como o caso do DNS, mas que permitem resultados aproximados, são amplamente utilizados pela industria de acordo com o problema de interesse.

A metodologia utilizada na presente dissertação para tratar os escoamentos com altos números de Reynolds, será a Simulação das Grandes Escalas, que em inglês é amplamente conhecida como LES.

Esta metodologia consiste em filtrar as equações de Navier-Stokes e da continuidade e depois decompor o campo de velocidades que aparece nestas equações, em uma parte filtrada e uma parte flutuante. A parte filtrada dessa decomposição será realizada por meio de uma integral de convolução, e a parte flutuante irá resultar em uma contribuição com seis termos a mais nas equações de Navier-Stokes, que precisará ser modelada (τ_{ij}).

O escoamento turbulento quando analisado no espaço de Fourier, pode ser observado por meio de um gráfico da energia cinética turbulenta E, em função do número de onda k.



Figura 1.1: Espectro da energia cinética turbulenta em função do número de onda.

A região do espectro de energia que será calculada será apenas as grandes escalas da turbulência, sendo que este cálculo irá ocorrer em todas as frequências que estão à esquerda da frequência de corte que será determinada como f_c , e a parte modelada, que fica à direita da frequência de corte representa as pequenas escalas. Essa representação pode ser vista na figura (1.1).

A região que será modelada, onde está situada as pequenas escalas, representa a interação e a transferência de informações entres as pequenas escalas da turbulência com as grandes escalas da turbulência.

1.2 A modelagem não linear para o problema do fechamento

Como o processo de filtragem das equações de Navier-Stokes e da continuidade e o procedimento de decomposição do campo de velocidade em uma parte filtrada e outra flutuante, resultaram em seis variáveis a mais nas equações de Navier-Stokes, os componentes do tensor de Reynolds submalha τ_{ij} , que são os componentes resultantes desses procedimentos, precisa ser modelado para que o número de equações seja igual ao número de incógnitas. Desta maneira, a resolução do sistema de equações se torna possível.

A modelagem do τ_{ij} de forma linear, que é o mais divulgado na literatura, faz a suposição de que este tensor seja expandido em um polinômio tensorial de grau um. Essa suposição se apresenta como válida para muitos casos com escoamentos turbulentos que ocorrem sobre geometrias simples. Porém, em geometrias complexas esses modelos não tem apresentado bons resultados (POPE, 1975).

Portanto, formas alternativas de modelar o tensor de Reynolds submalha começaram a ser propostas. Supor que τ_{ij} dependa dos tensores taxa de deformação e taxa de rotação e avaliar como esse tensor pode ser representado, é a base para a construção dos modelos não lineares para o fechamento da turbulência.

Como o formato exato do tensor submalha não é conhecido, faz-se o uso de um teorema da álgebra, conhecido como Teorema de Cayley-Hamilton para a determinação mais geral possível de um tensor que dependa das duas variáveis consideradas, que no caso são os tensores taxa de deformação e rotação. Como já citado anteriormente, para geometrias simples, a suposição de que o tensor de Reynolds submalha dependa apenas do tensor taxa de deformação é aparentemente uma boa suposição quando se compara resultados dos campos de velocidade e pressão dos experimentos materiais com os resultados dos campos de velocidade e pressão dos experimentos computacionais dos modelos lineares. Mas para um estudo inicial, devido a facilidade de implementação de uma geometria simples, a cavidade com a tampa deslizante foi o problema escolhido. Essa escolha também possibilitou analisar as diferenças entre o modelo linear e os modelos não lineares, mesmo para situações mais simples.

1.3 Objetivos

Os modelos mais convencionais para tratar o problema de fechamento da turbulência com a metodologia LES, são advindos de modelos lineares baseados na hipótese de Boussinesq. No presente trabalho, o escopo é apresentar quais são as limitações desse tipo de modelo, e se ideias mais gerais, como é o caso de modelos não lineares para o fechamento da turbulência, podem proporcionar informações que os modelos lineares não podem fornecer.

Outro importante objetivo é analisar como são criados os modelos não lineares para o fechamento da turbulência, e qual é a importância de cada termo que constitui o modelo não linear, para que seja possível uma comparação entre os vários modelos apresentados na literatura.

Para que a comparação seja realizada, será feita uma implementação computacional de diferentes modelos não lineares, onde será avaliado por meio de gráficos se um modelo em questão apresenta vantagens ou desvantagens em relação ao modelo linear clássico baseado na hipótese de Boussinesq, que é o modelo de Germano.

Para tal propósito, algumas etapas foram seguidas:

- Uma revisão bibliográfica dos modelos não lineares mais comuns encontrados na literatura;
- Implementação e simulação dos modelos não lineares para um caso da cavidade com tampa deslizante no código MFSim, desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da UFU;
- Simulação do modelos linear de Germano para o mesmo caso da cavidade com tampa deslizante no código MFSim;

- Comparação dos resultados obtidos com os modelos não lineares, com resultados do campo de velocidade encontrados para o experimento material da cavidade e para o experimento computacional realizado com o modelo linear de Germano;
- Avaliar as vantagens e desvantagens entre cada um dos modelos não lineares, com relação ao modelo linear implementado e com experimento físico.

Número total de folhas: 91; O trabalho contém ilustração? Sim; O mestrado é acadêmico ou profissional? Acadêmico; Ano de nascimento do autor: 1989

Telefone de contato: (38) 99201-1821

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Modelagem e simulação da turbulência

Ao se comparar os resultados experimentais com a teoria formulada para o fenômeno da turbulência nos fluidos newtonianos, tem-se observado que modelar este problema do ponto de vista da mecânica do contínuo, utilizando as equações de Navier-Stokes e da continuidade, resultados satisfatórios tem sido obtidos.

Porém, do ponto de vista matemático, esse problema ainda está em aberto, sendo necessária a prova da existência e unicidade de sua solução. Alguns autores consideram a turbulência como o último problema da mecânica clássica que ainda não foi resolvido (DAVIDSON, 2015).

Portanto, devido à complexidade da solução destas equações, métodos computacionais foram desenvolvidos para a viabilização de suas soluções de forma aproximada. As metodologias abordadas neste capítulo serão a Simulação Numérica Direta, Simulação das Grandes Escalas e as Equações Médias de Reynolds Transiente, comumente conhecidas pelas siglas em inglês, DNS (Direct Numerical Simulation), LES (Large Eddy Simulation) e URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes).

A seguir será feita uma breve revisão de cada uma destas metodologias.

2.1.1 Simulação Numérica Direta - DNS

É uma metodologia para modelagem da turbulência mais precisa que existe, do ponto de vista do contínuo, pois ela consiste em resolver diretamente as equações de Navier-Stokes discretizadas (FERZIGER; PERIC, 2012). Esta metodologia consiste em resolver todas as escalas de movimento que compõe o espectro de estruturas turbilhonares, desde as grandes escalas (ou escalas integrais) até as escalas de Kolmogorov, com as devidas condições iniciais e de contorno (POPE, 2001). Como o sistema de equações contém quatro incógnitas, busca-se resolver o campo de velocidade nas três direções espaciais e o campo de pressão.

O começo do uso da metodologia DNS foi no Centro Nacional de Pesquisas Atmosféricas no Colorado, EUA, por volta de 1972. O início foi com Orszag e Jr (1972), onde simularam um domínio computacional de 32³ para turbulência isotrópica com número de Reynolds de 35. Embora a resolução empregada ser abaixo da capacidade atual, os cálculos serviram para demonstrar como os métodos espectrais (método de solução das equações de Navier-Stokes no espaço de Fourier) poderiam ser usados para casos mais complexos.

Em DNS, para capturar as estruturas turbilhonares de todas as escalas de movimento do escoamento, o domínio computacional tem que ser pelo menos do tamanho do domínio físico considerado da ordem da maior estrutura turbilhonar (FERZIGER; PERIC, 2012). Uma simulação válida, deve possibilitar capturar todo o transporte e transformação de energia cinética que ocorre no espectro. Esses processos ocorrem em todas as escalas do espectro.

Ao se empregar um esquema de discretização para as equações, sempre irão surgir erros decorrentes do truncamento da ordem das derivadas, e esse erro pode ser considerado como um modelo de fechamento da turbulência, porém sem incorporar as características físicas do problema (SILVEIRA-NETO, 2017). Por isso essa metodologia requer esquemas de discretização com alta taxa de convergência, além de uma malha espacial muito refinada e passos de tempo muito pequenos para que se represente bem a física do problema.

Os principais benefícios que DNS traz são listados por Lumley (1990) e por Moin e Mahesh (1998):

 Aumentar o entendimento dos mecanismos que levam ao surgimento da turbulência, ou seja, leva a entender melhor a transição que leva o escoamento de um regime laminar ao regime turbulento;

- Possibilita uma melhor compreensão de como ocorre a transformação da energia cinética em energia térmica nas pequenas escalas;
- Entender os efeitos da compressibilidade na turbulência;
- Compreender a relação existente entre combustão e turbulência com maior riqueza de detalhes;
- Controle e redução de arrasto em superfícies sólidas;
- É possível obter detalhes de todos os parâmetros do escoamento turbulento avaliado, e os valores dos campos de velocidade e pressão. Tais resultados servem para validar outros modelos de turbulência;
- É possível obter detalhes de escoamentos próximos à paredes, e para escoamentos cisalhantes com turbulência homogênea é mais fácil de se realizar o experimento com DNS do que com experimento físico;
- Os resultados do escoamento podem ser obtidos sem que ocorra a influência de uma instrumentação, como ocorre no caso do experimento físico. No experimento computacional, as medidas são feitas através de sondas numérica espalhadas por todo o domínio computacional.

Um lado negativo da metodologia DNS são as complicações advindas das escalas de comprimento e tempo necessárias para a simulação de todas as estruturas turbilhonares. A relação existente entre o comprimento das maiores estruturas e as menores é dada por:

$$\frac{l_I}{l_d} = Re^{\frac{9}{4}} \tag{2.1}$$

Onde l_I é conhecida como escala integral de comprimento da turbulência, que é a ordem de grandeza do comprimento das maiores e mais energizadas estruturas turbilhonares, e l_d é conhecida como a escala de comprimento de Kolmogorov, que representa a ordem de grandeza das menores estruturas turbilhonares do escoamento. Esse número de Reynolds é baseado na magnitude das flutuações da velocidade e na escala integral.

Os resultados obtidos com DNS apresentam um grande número de detalhes sobre o escoamento. Porém seu alto custo computacional acaba limitando o seu uso para escoamentos com altos números de Reynolds.

Por esse motivo, a utilização de DNS para escoamentos turbulentos com altos números de Reynolds se torna impraticável para problemas industriais que precisam de resultados mais imediatos.

Métodos numéricos de alta precisão tem sido desenvolvidos para resolver as equações de Navier-Stokes, e a utilização de DNS tem exigido padrões cada vez mais acurados (POPE, 2001).

É preciso ressaltar que nem toda simulação baseada nas equações de Navier-Stokes são "diretas", pois devido à modificações feitas na equação, resolução inadequada ou condições de contorno não físicas, a simulação pode não corresponder bem ao escoamento turbulento que se deseja (POPE, 2001).

2.1.2 Equações Médias de Reynolds Transiente - URANS

As Equações Médias de Reynolds Transiente, resultam da decomposição o campo de velocidade das equações de Navier-Stokes e da equação da continuidade em uma parte filtrada e outra flutuante. A velocidade flutuante dará origem ao tensor de Reynolds, que precisa ser modelado. Estas equações fornecerão resultados médios das informações do escoamento, como velocidade e pressão. Portanto, os componentes do tensor de Reynolds, $\tau_{ij} = -\overline{u'_i u'_j}$, tem a função de modelar as trocas de informações entre o campo de velocidade turbulento flutuante e o campo de velocidade filtrado.

A modelagem de τ_{ij} deve ser de tal forma que capture as flutuações do campo turbulento e a transforme para o comportamento médio.

Esse processo de decompor o campo de velocidade das equações de Navier-Stokes em uma parte filtrada e outra flutuante, faz com que surja mais seis incógnitas nas equações, que agora são chamadas de URANS. Podemos concluir que nosso sistema de equações depois disso, passa a ter dez incógnitas, \overline{u} , \overline{v} , \overline{w} , \overline{p} e τ_{ij} (seis incógnitas), e continua tendo as mesmas quatro equações, que são as três de Navier-Stokes e a da continuidade, lembrando que isso no caso de um escoamento isotérmico. É assim que surge o chamado, Problema de Fechamento da Turbulência, que requer modelos de fechamento.

A abordagem URANS é uma ferramenta utilizada em engenharia com amplas aplicações em problemas industriais. Ela é robusta e permite resolver escoamentos médios e momentos estatísticos com boa aproximação para a sua finalidade (GATSKI; RUMSEY, 2002).

Do ponto de vista físico, a tarefa desta modelagem é representar toda a turbulência. E uma caracterização condizente é uma que descreve adequadamente a evolução das escalas de velocidade e comprimento da turbulência.

Os modelos de fechamento para a metodologia URANS podem ser descritos de forma linear e não linear, dependendo de como o tensor de tensões esteja representado. Os modelos lineares são baseados na hipótese de Boussinesq, cuja dependência do tensor de Reynolds é diretamente proporcional ao tensor taxa de deformação; essa relação é dita de primeiro grau. Já na representação não linear do tensor de Reynolds, essa modelagem implica que o tensor tenha uma expansão de maior grau ou seja dependente não apenas do tensor taxa de deformação, como também do tensor taxa de rotação, podendo ter relações de primeiro, segundo, terceiro, quarto e quinto grau.

Segundo Alfonsi (2009), os modelos URANS são classificados da seguinte forma:

- (i) Modelos a zero equações: apenas as equações URANS são resolvidas. Após decompor o campo de velocidade em sua componente filtrada e a componente flutuante, propor a equação para o fechamento do tensor de Reynolds e substituir nas equações de Navier-Stokes e da continuidade. Esse sistema composto por dez equações e dez incógnitas terá de ser resolvido;
- (ii) Modelos a uma equação: essa classe envolve uma equação a mais que o item anterior, pois leva em consideração uma equação de transporte para o cálculo da escala da velocidade da turbulência. Normalmente essa equação adicional envolve a energia cinética turbulenta (k);
- (iii) Modelos a duas equações de transporte: é levada em conta uma equação de transporte a mais que a classe do item anterior para o cálculo das escalas de comprimento da turbulência. Geralmente essa equação adicional envolve a taxa de transformação viscosa (ε), que

representa a transformação de energia cinética turbulenta (k) da partícula de fluido, em energia térmica devido às tensões viscosas;

(iv) Modelo das tensões de Reynolds: com relação ao item (i), essa classe envolve um número adicional de equações de transporte para as componentes das tensões de Reynolds (τ_{ij}) e uma para a taxa de transformação viscosa (ε) . Por esse motivo, os modelos da classe (iv), são chamados de $(\tau_{ij} - \varepsilon)$. Esses modelos também são chamados de tensões médias de Reynolds (Mean Reynolds Stress) - MRS.

2.1.3 Simulação das Grandes Escalas - LES

A ideia básica da metodologia LES parte de seguinte princípio: suponha que alguém queira fazer uma modelagem da turbulência utilizando a metodologia DNS para escoamentos com altos números de Reynolds. Caso não se tenha recurso computacional suficiente para esta simulação, a metodologia se torna impraticável do ponto de vista computacional. Supõe-se uma malha suficientemente "fina"para que seja viável simular as grandes estruturas de um determinado escoamento, sabendo-se que do ponto de vista físico, ocorre uma interação envolvendo troca de informação entre a banda de grandes e a banda de pequenas estruturas turbilhonares. Portanto é nesse aspecto que entra a metodologia LES. Com ela resolve-se as grandes estruturas, e modela-se a interação física que ocorre entre as pequenas e grandes escalas da turbulência. Essa interação é dada pelos chamados modelos submalhas, que requer um modelo matemático para o tensor das tensões que surge após a filtragem das equações de Navier-Stokes.

Um importante ponto físico que também justifica o uso da metodologia LES, é devido ao fato que para altos números de Reynolds o laplaciano da velocidade, encontrado nas equações de Navier-Stokes, tende a diminuir. Isso leva à conclusão que as grandes estruturas turbilhonares são a base para qualquer escoamento dayturbulento(LANDAU; LIFSHITS, 1959). Outro grande ponto importante sobre as grandes estruturas turbilhonares é que elas estão mais ligadas ao processo de transporte de informação do que ao processo de transformação de energia cinética em energia térmica.

Pode-se dizer que essa metodologia seria uma intermediário entre o DNS e URANS, em termos de detalhes sobre o escoamento turbulento. Em LES, o campo de velocidade passa

por uma decomposição da velocidade em uma parte filtrada $\overline{u}_i(x, y, z, t)$ e a outra flutuante ou submalha $u'_i(x, y, z, t)$.

$$u_i(x, y, z, t) = \overline{u}_i(x, y, z, t) + u'_i(x, y, z, t).$$

A figura 2.1 representa a energia cinética turbulenta, (E(f)) em função da frequência (f). Ao se aplicar a filtragem nas equações de transporte, se estabelece um filtro de corte (f_c) , que separa o espectro de energia cinética em duas bandas:

- À esquerda de f_c se encontram as grandes estruturas turbilhonares, ou seja, são as escalas resolvidas do escoamento, que serão dadas em função do cálculo de $\overline{u}_i(x, y, z, t)$;
- À direita de f_c estão as escalas submalha, que representam as menores estruturas turbilhonares, onde são modeladas como função das flutuações das velocidades u_i(x, y, z, t);
- A interação entre essas duas bandas será objeto da modelagem de fechamento da turbulência.



Figura 2.1: Espectro e distribuição de energia nas grandes e pequenas escalas (SILVEIRA-NETO, 2017).

O processo de filtragem, que consiste em separar as grandes escalas das pequenas escalas, é representado matematicamente no espaço físico como um produto de convolução. A parte resolvida $\bar{u}_i(\mathbf{x}, t)$, de uma variável que depende do espaço e do tempo é definida formalmente pela relação:

$$\overline{u}_i(\mathbf{x},t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} u_i(\xi,t') G(\mathbf{x}-\xi,t-t') dt' d^3\xi,$$
(2.2)

onde a integração é realizada sobre todo o domínio de escoamento e G, é a função filtro, \mathbf{x} é o vetor posição, $\bar{\tau}_c$ e $\bar{\Delta}$ são as escala de corte no tempo e no espaço, respectivamente. Essa operação é dada por:

$$\overline{u}_i = G \star u_i. \tag{2.3}$$

A função G, tem que ser tal que satisfaça a condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x-\xi,t-t')dt'd^3\xi = 1$$

A equação (2.3) permite a definição de outro filtro, um filtro de corte com $G_F = 1$ se $|f| \le \pi/\overline{\triangle}$ e $G_F = 0$ se $|f| \ge \pi/\overline{\triangle}$ (FRÖHLICH; RODI, 2002).

A figura (2.2) ilustra a filtragem no espaço de Fourier. A linha vertical representa o filtro de corte no número de onda $\pi/\overline{\Delta}$, e é o corte do tamanho da malha base, que é a malha mais fina a ser utilizada na simulação computacional. O filtro de corte G_F permite o espectro de \overline{u} ser igual ao de u quando se está à esquerda da linha e zero quando se está à direita dela. A equação (2.3) e a figura (2.2) apresentam que quando um filtro geral é aplicado, não permite um corte nítido através do espectro de energia, mas um decaimento suave até zero (FRÖHLICH; RODI, 2002). Essa interpretação é importante na modelagem LES na qual o espectro de energia em que são resolvidas as escalas da turbulência, próximo à frequência de corte segue uma região inercial que é transferida energia das grandes escalas para as pequenas escalas.

Pode ser notado na figua (2.2) que u' e $\overline{u'}$, que são respectivamente, a flutuação da velocidade e a média da flutuação da velocidade, são ilustradas pela área compreendida pelas curvas de \overline{u} e $\overline{\overline{u}}$, e a linha vertical representa o filtro de corte no espaço de Fourier, que determina

o tamanho da menor malha utilizada.



Figura 2.2: Efeito das filtragens no espectro de energia (FRÖHLICH; RODI, 2002).

2.2 Modelagem linear do tensor submalha

Tanto para LES, quanto para URANS, utilizam-se a hipótese de Boussinesq para a modelagem do tensor de Reynolds submalha (LES) e do tensor de Reynolds (URANS). Quando se assume a hipótese de Boussinesq, a viscosidade turbulenta implica que as tensões de Reynods (τ_{ij}) devem depender unicamente do tensor taxa de deformação (S_{ij}) e de quantidades escalares locais (POPE, 1975).

A hipótese de Boussinesq tem como analogia o comportamento do transporte molecular e é uma hipótese utilizada na maioria dos modelos devido sua robustez e sua simplicidade de implementação, apesar de sofrer limitações por conta da proporcionalidade exigida entre o tensor submalha e o tensor taxa de deformação. Como o processo molecular é intrinsecamente diferente da física envolvida no movimento turbulento, flutuações de velocidade precisam ser modeladas (WANG; BERGSTROM, 2005).

A aplicabilidade de um modelo linear depende do tipo de escoamento, como constatado por (RUNCHAL; SPALDING, 1972). Resultados experimentais indicam que os modelos lineares apresentam boa coerência em escoamentos que apresentam recirculação.

O primeiro modelo LES, proposto por Smagorinsky (1963), foi desenvolvido com base na hipótese de Boussinesq, porém este modelo requer a imposição de constantes empíricas que são complicadas de serem obtidas experimentalmente, e necessitam de funções de amortecimento para que se possa captar o comportamento turbulento de camada limite próximo às paredes. Posteriormente, modelos mais elaborados foram desenvolvidos por Lilly (1992) que também são baseados na mesma hipótese, tiveram uma melhoria significativa, pois apresentaram uma forma de calcular os coeficientes que compõe o tensor submalha de forma dinâmica. Nesta nova metodologia, os coeficientes são calculados como funções das velocidades que já são conhecidas, ou seja, os coeficientes variam de acordo com a região do escoamento. Isso retira por exemplo a necessidade de funções de amortecimento no modelo, pois como os coeficientes são funções da velocidade, eles são zerados nas paredes, e para captar o comportamento da camada limite irá depender basicamente do tamanho da malha local.

Porém os modelos lineares apresentam um problema frequente, pois mesmo quando seus coeficientes são calculados de forma dinâmica, eles apresentam alguns inconvenientes (PIOMELLI, 1993), (PIOMELLI; LIU, 1995):

- Se o coeficiente for mantido como positivo, pode acarretar uma transformação de energia cinética turbulenta em energia térmica que não existe nas escalas submalhas;
- Caso o coeficiente fique muito negativo, podem surgir instabilidades numéricas e um excessivo "backscatter", que seria a transferência de energia das pequenas escalas (escalas submalhas) para as grandes escalas, que são as calculadas.
- Quando o denominador do coeficiente se torna muito pequeno, instabilidades numéricas surgem devido a incapacidade do modelo de lidar com singularidades.
- O modelo não apresenta resultados condizentes quando o escoamento é sujeito a superfícies com curvas acentuadas.

2.2.1 Aplicação correta dos modelos lineares

Como já foi constatado na literatura que os modelos lineares não apresentam resultados coerentes para qualquer tipo de escoamento, faz-se necessária a apresentação das situações em que este tipo de modelagem oferece resultados satisfatórios:

- A homogeneidade do tensor taxa de deformação é uma condição necessária para a utilização da hipótese de Boussinesq (POPE, 1975);
- Quando o escoamento ocorre a altos números de Reynolds e é quase homogêneo, o tensor de tensões modelado depende unicamente do tensor taxa de deformação e de parâmetros escalares, e as condições de contorno afetam apenas os parâmetros escalares (POPE, 1975);
- Escoamentos que ocorrem em superfícies sem mudanças abruptas de direção.

2.3 Modelagem não linear para o tensor submalha

Os modelos não lineares para o fechamento da turbulência surgiram com o propósito de suprir as deficiências que os modelos lineares apresentam em alguns tipos de escoamentos turbulentos devido às hipóteses decorrentes de sua formulação.

Como foi visto na seção anterior, os modelos lineares que são baseados na hipótese de Boussinesq, implicam basicamente que o tensor das tensões modelado dependa proporcionalmente do tensor taxa de deformação.

Entretanto, Bradshaw (1973), observou que essa hipótese falha para camadas limites sobre superfícies curvas e indica que esta falha é devida à relação estabelecida entre o tensor das tensões modelado e o tensor taxa de deformação (POPE, 1975).

Segundo Champagne, Harris e Corrsin (1970), as consequências que essa hipótese de proporcionalidade do tensor de Reynolds (URANS) e generalizando para o tensor sub-malha (LES), com o tensor taxa de deformação, mostram que para escoamentos incompressíveis, turbulentos, isotrópicos, cisalhantes e quase homogêneos, estabelecer o tensor sub-malha dependente apenas de (S_{ij}) , não oferece resultados condizentes com a prática experimental apresentada anteriormente.

Quando foi testado experimentalmente a relação proporcional de τ_{ij} com (S_{ij}) , advinda da hipótese de Boussinesq, Champagne, Harris e Corrsin (1970), encontraram:

 $S_{11} = 0, 3; \quad S_{22} = -0, 18; \quad S_{33} = -0, 12; \quad S_{12} = 0, 33,$

enquanto a melhor previsão que a teoria fornece para o caso de escoamentos nessas condições é

(POPE, 1975):

 $S_{11} = S_{22} = S_{33} = 0; \quad S_{12} = 0, 33.$

Isso indica que as tensões normais não são bem modeladas pela hipótese de Boussinesq quando se trata de escoamentos com as características descritas (POPE, 1975).

Segundo Pope (1975), a diferença entre os resultados das tensões normais medidas no experimento e o resultado das tensões normais previstas na teoria, ocorrem devido a inaplicabilidade da hipótese da viscosidade isotrópica proposta por Boussinesq. Quando a hipótese é aplicada para as situações que realmente ocorrem a viscosidade isotrópica, bons resultados são encontrados, mas aplicar a ideia para qualquer tipo de escoamento eventualmente trará resultados inconsistentes.

Foi justamente para suprir as limitações dos modelos lineares, que Pope (1975), propôs com base em análise dimensional, invariância sobre transformação de coordenadas, e no gradiente de velocidade, uma forma geral de modelar o tensor das tensões de Reynolds.

A ideia principal seria propor o tensor não apenas dependente do tensor taxa de deformação e de parâmetros escalares, mas também colocar esse tensor dependente também do tensor taxa de rotação. Ou seja:

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}(S_{kl}, \Omega_{kl}).$$

Para explorar as possibilidades de como determinar esse tensor, a forma mais geral de expandi-lo é através de um polinômio tensorial infinito, que com ajuda do teorema de Cayley-Hamilton, pode ser reduzido para uma forma finita com dez termos (POPE, 1975).

Quando se encontra o tensor com os dez componentes da base tensorial, logo se nota a presença do termo linear, o que indica a generalidade da proposta apresentada.

A maior limitação dos modelos lineares, está em sua incapacidade de prever as tensões normais do escoamento. Assim, ele consegue captar bem as tensões cisalhantes, mas as anisotropias causadas pelas tensões normais não são percebidas. Pope (1975), demonstrou que a introdução de mais um componente tensorial fez com que o tensor de Reynolds possibilitasse captar tanto as tensões cisalhantes quanto as tensões normais do escoamento, mostrando que para captar as tensões normais, apareciam apenas os componentes tensoriais não lineares, e já na captura das tensões cisalhantes aparecia somente o componente tensorial do modelo linear. O modelo não linear para a tensor de tensões de Reynolds permite suprir as limitações do modelo linear.

2.4 O teorema de Cayley-Hamilton

Ao supor que o tensor submalha dependa do tensor taxa de deformação e do tensor taxa de rotação, tem-se:

$$\tau_{ij}^d = F_{ij}\left(\overline{S}_{kl}, \overline{\Omega}_{kl}\right) \tag{2.4}$$

onde:

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

Agora, seja **a**, **b** e **c**, matrizes 3 × 3, que podem ser simétricas ou não, que satisfazem a seguinte relação (SPENCER; RIVLIN, 1958):

$$abc + bca + cab + bac + acb + cba = (bc + cb) tra + (ab + ba) trc +$$
$$+ (ca + ac) trb + a (trbc - trbtrc) + b (trca - trctra) + c (trab - tratrb) +$$
$$+ l (tratrbtrc - tratrbc - trbtrca - trctrab + trabc + trcab) (2.5)$$

Quando $\mathbf{a}=\mathbf{b}=\mathbf{c}$ na equação (2.5), é obtido o Teorema de Cayley-Hamilton.

$$\mathbf{a}^{3} - \mathbf{a}^{2} \operatorname{tr} \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{a} \left[(\operatorname{tr} \mathbf{a})^{2} - \operatorname{tr} \mathbf{a}^{2} \right] - \mathbf{I} \det \mathbf{a} = 0$$
(2.6)

Porém, caso for escolhido c=a+b, e substituir na equação (2.5), temos como resultado:

$$G(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}\mathbf{b}\mathbf{a} + \mathbf{b}\mathbf{a}\mathbf{b}$$

= $\alpha_1 \mathbf{a} + \alpha_2 \mathbf{b} + \alpha_3 \mathbf{a}^2 + \alpha_4 \mathbf{b}^2 + \alpha_5 (\mathbf{a}\mathbf{b} + \mathbf{b}\mathbf{a}) + \alpha_6 \mathbf{I}$ (2.7)

Sendo os coeficientes funções dos traços de a e b:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1}{2} \left[tr \mathbf{ba} + tr \mathbf{ab} + tr \mathbf{b}^2 - (tr \mathbf{b})^2 - 2(tr \mathbf{b} tr \mathbf{a}) \right] \\ \alpha_2 &= \frac{1}{2} \left[tr \mathbf{ba} + tr \mathbf{ab} + tr \mathbf{a}^2 - (tr \mathbf{a})^2 - 2(tr \mathbf{b} tr \mathbf{a}) \right] \\ \alpha_3 &= \left[tr \mathbf{b} \right] \\ \alpha_4 &= \left[tr \mathbf{a} \right] \\ \alpha_5 &= \left[tr \mathbf{a} + tr \mathbf{b} \right] \\ \alpha_6 &= \frac{1}{2} \left[tr \mathbf{a} tr \mathbf{b} tr (\mathbf{a} + \mathbf{b}) - tr \mathbf{a} tr (\mathbf{ba} + \mathbf{b}^2) - tr \mathbf{b} tr (\mathbf{ba} + \mathbf{a}^2) - (tr \mathbf{b} + tr \mathbf{a}) tr \mathbf{ab} \\ &+ tr (\mathbf{aba} + \mathbf{ab}^2) + tr (\mathbf{aba} + \mathbf{b}^2 \mathbf{a}) \right] \end{aligned}$$

Assim, pode-se observar que a equação (2.7) é representada por um somatório de um produtório que irá determinar o grau do polinômio gerado pelas matrizes **a** e **b**. Multiplicando a equação (2.7) pela esquerda e pela direita por **a** e utilizando a equação (2.6), é possível encontrar o polinômio com o grau polinomial que se desejar. Generalizando, tem-se que o teorema de Cayley-Hamilton na forma mais geral é um polinômio tensorial infinito, dado pela seguinte forma (POPE, 1975):

$$G(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{\gamma_i=0}^{\infty} \prod_{j=1}^{\infty} \sum_{\beta_j=0}^{\infty} \alpha_{\beta_1, \beta_2 \dots}^{\gamma_1, \gamma_2 \dots} \mathbf{a}^{\gamma_1} \mathbf{b}^{\beta_1} \mathbf{a}^{\gamma_2} \mathbf{b}^{\beta_2} \dots$$
(2.8)

Onde os coeficientes α são funções dos invariantes tr $(\mathbf{a}^{\gamma_1}\mathbf{b}^{\beta_1}\mathbf{a}^{\gamma_2}\mathbf{b}^{\beta_2}...)$.

Realizando a substituição $\mathbf{a} = \overline{S}_{ij}$ e $\mathbf{b} = \overline{\Omega}_{ij}$ na equação (2.7), tendo em vista que \overline{S}_{kl} e $\overline{\Omega}_{kl}$ são deviatóricos, e utilizando as propriedades de matrizes transpostas ($\overline{S}_{jk}\overline{\Omega}_{ki} = -\overline{\Omega}_{ik}\overline{S}_{kj}$), tem-se:

$$\tau_{ij} = G_{ij} \left(\overline{S}_{kl}, \overline{\Omega}_{kl} \right) = \alpha_1 \overline{S}_{ij} + \alpha_2 \overline{\Omega}_{ij} + \alpha_3 (\overline{S}_{ik} \overline{S}_{kj})^d + \alpha_4 (\overline{\Omega}_{ik} \overline{\Omega}_{kj})^d + \alpha_5 (\overline{S}_{ik} \overline{\Omega}_{kj} + \overline{S}_{jk} \overline{\Omega}_{ki}) + \alpha_6 \delta_{ij} = \alpha_1 \overline{S}_{ij} + \alpha_2 \overline{\Omega}_{ij} + \alpha_3 (\overline{S}_{ik} \overline{S}_{kj})^d + \alpha_4 (\overline{\Omega}_{ik} \overline{\Omega}_{kj})^d + \alpha_5 (\overline{S}_{ik} \overline{\Omega}_{kj} - \overline{\Omega}_{ik} \overline{S}_{kj}) + \alpha_6 \delta_{ij}$$

$$(2.9)$$

Segundo Serrin (1959), (α_l) com (l = 1, 2, ...6), são funções arbitrárias que dependem das variáveis de estado termodinâmico e dos invariantes $\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ji}$ e $\overline{\Omega}_{ij}\overline{\Omega}_{ji}$.

Como apresentado em Lamb (1932) e Serrin (1959), (α_6) pode ser escolhido como : $\frac{1}{3}\tau_{kk}$. E multiplicando cada coeficiente por $\widetilde{\Delta}^2$ para dar a dimensão desejada, temos:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij} = \tau_{ij}^{d}$$

$$= \alpha_{1}\widetilde{\Delta}^{2}\overline{S}_{ij} + \alpha_{2}\widetilde{\Delta}^{2}\overline{\Omega}_{ij} + \alpha_{3}\widetilde{\Delta}^{2}(\overline{S}_{ik}\overline{S}_{kj})^{d} + \alpha_{4}\widetilde{\Delta}^{2}(\overline{\Omega}_{ik}\overline{\Omega}_{kj})^{d} + \alpha_{5}\widetilde{\Delta}^{2}(\overline{S}_{ik}\overline{\Omega}_{kj} - \overline{\Omega}_{ik}\overline{S}_{kj})$$
(2.10)

Que é a expansão de segundo grau mais geral possível do tensor τ_{ij}^d dependente dos tensores taxa de deformação e rotação. Onde $()^d$ representa o traço do tensor igual a zero.
CAPÍTULO III

MODELO MATEMÁTICO DIFERENCIAL

3.1 Formulação diferencial para escoamentos incompressíveis

Para escoamentos incompressíveis, fluidos newtonianos, isotérmico, com propriedades físicas constantes e tridimensional, o sistema de equações composto pelas equações de Navier-Stokes (3.1) juntamente com a equação da continuidade (3.2), contempla 4 incógnitas (u, v, w, p) e 4 equações. Por praticidade essas equações são apresentadas na notação tensorial e será utilizada a convenção de soma de Einstein:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + g_i$$
(3.1)

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.2}$$

Lembrando que *i* e *j*, variam de 1 até 3, e que u_1 corresponde à velocidade *u*, u_2 à velocidade *v*, u_3 à velocidade *w*, x_1 à coordenada *x*, x_2 à coordenada *y* e x_3 à coordenada *z*, ρ é a massa específica, g_i a gravidade e ν , a viscosidade cinemática. Portanto, (3.1) são as equações de Navier-Stokes nas 3 direções espaciais, e a equação (3.2) se trata da equação da continuidade, contabilizando assim, 4 equações e 4 incógnitas.

Para este caso dizemos que o problema está fechado, e com as devidas condições de contorno e condições iniciais é possível resolver numericamente o sistema composto pelas equações de Navier-Stokes juntamente com a equação da continuidade, podendo então modelar o fenômeno da turbulência nos fluidos.

Porém, para escoamentos turbulentos, essa metodologia de resolver diretamente as equações (3.1) e (3.2), que é conhecida como DNS, requer a solução de todo o espectro de energia cinética turbulenta. Portanto, todas as escalas de tempo e comprimento precisam ser resolvidas, e com um custo computacional que cresce proporcional a $Re^{9/4}$, o que torna o custo desse método computacionalmente muito elevado para escoamentos a altos valores de Reynolds (POPE, 2001).

Para evitar esse alto custo computacional e com o intuito de resolver problemas com aplicações práticas na indústria, surgiram formas mais práticas de se resolver o problema. Desta forma, a metodologias LES será abordada neste capítulo.

3.2 Equações diferenciais filtradas

Ao assumirmos que a velocidade instantânea pode ser decomposta em uma componente filtrada e outra flutuante, temos:

$$u_i = \overline{u_i} + u'_i$$

Escrevendo as equações (3.1) já na forma divergente, filtrando as equações de Navier-Stokes e da continuidade e incorporando o termo gravitacional na pressão, temos:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j u_i})}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j}$$
(3.3)

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.4}$$

O termo não linear é expresso como:

$$\overline{u_j u_i} = \overline{(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{u}_j + u'_j)} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{\bar{u}_j u'_i} + \overline{\bar{u}'_i u'_j},$$

E tendo em vista as seguintes definições:

$$L_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j; \quad C_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_j \bar{u}_i}; \quad R_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j},$$

onde L_{ij} é o tensor de Leonard, C_{ij} é o tensor cruzado e R_{ij} é o operador de Reynolds.

Após alguns algebrismos pode ser demonstrado que o tensor submalha é dado por:

$$\tau_{ij} = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u}_i \overline{u}_j$$

De forma geral, os tensores L_{ij} e C_{ij} são desprezíveis quando se analisa a ordem de grandeza em relação ao tensor R_{ij} (SILVEIRA-NETO, 1991). O que resulta no tensor de Reynolds submalha:

$$\tau_{ij} = \overline{u'_i u'_j},$$

O divergente desse tensor surge como uma incógnita a mais nas equações de Navier-Stokes. Portanto, o problema de fechamento da turbulência consiste em propor modelos lineares ou não lineares como alternativas para a descrição desse tensor. Como se trata da média das flutuações, a ideia é modelar as flutuações que ocorrem nas escalas submalhas para um comportamento médio que dependa linearmente do tensor taxa de deformação (modelos lineares) ou não linearmente do tensor taxa de deformação e rotação (modelos não lineares).

3.3 Modelos lineares para o fechamento da turbulência

Tanto para LES, quanto para URANS, utiliza-se a hipótese de Boussinesq para a modelagem no tensor submalha (LES) e do tensor de Reynolds (URANS).

Ao se aplicar o filtro nas equações de Navier-Stokes já em sua forma divergente, e atendendo às devidas propriedades do processo de filtragem, as equações se tornam:

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$$
(3.5)

Vale lembrar que a forma divergente que será demonstrada no capítulo seguinte, se carac-

teriza pela seguinte operação:

$$\bar{u_j}\frac{\partial \bar{u_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial(\bar{u_i}\bar{u_j})}{\partial x_j}$$

Os modelos lineares tratados nesse estudo, serão especificamente da classe LES, e neles, o tensor submalha au_{ij} é proposto como função linear do tensor taxa de deformação, que é dado por:

$$\overline{u_i'u_j'} = \tau_{ij}$$

$$\overline{u_i'u_j'} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk} = \tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk}$$

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk} = -\nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i}\right)$$

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk} = -2\nu_T \overline{S}_{ij} \qquad (3.6)$$

lado esquerdo da equação (3.6) é a parte anisotrópica do tensor
$$(au_{ij})$$
, também conhecida como

0 a parte deviatórica, representada por (au_{ij}^d) . Podemos então reescrever a equação de forma mais simplificada, como:

$$\tau_{ij}^d = -2\nu_T \overline{S}_{ij}$$
, onde: $\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right).$

Sendo que $\nu_T = C\bar{\bigtriangleup}^2 |\bar{S}|$, é a viscosidade turbulenta e $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}$.

Modelo de Smagorinsky 3.3.I

O modelo submalha baseado na hipótese de viscosidade turbulenta foi proposto por Smagorinsky (1963). Ele foi proposto para a simulação de escoamentos atmosféricos. Smagorinsky introduziu esse conceito supondo um modelo de turbulência tridimensional no qual respeita a lei de Kolmogorov, que diz que a energia cinética turbulenta segue a relação $(k^{-5/3})$, para o caso de turbulência homogênea e isotrópica.

(3.6)

Para escoamentos turbulentos quase bidimensionais, o modelo de Smagorinsky se apresenta muito difusivo, do ponto de vista numérico (LESIEUR, 2008). Porém é muito comum em aplicações de engenharia se utilizar as chamadas leis de parede, que conseguem suprir as deficiências do modelo quando o escoamento está próximo das paredes.

No modelo de Smagorinsky, a hipótese assumida para o comprimento de mistura na qual assume a viscosidade turbulenta proporcional ao comprimento característico submalha Δx , sendo: $\nu_T \propto \Delta x |\bar{S}_{ij}|$. Mais especificamente, a viscosidade dinâmica turbulenta é dada por:

$$\nu_T = \left(C_s \triangle x\right)^2 |\bar{S}|.$$

A maior parte da literatura adota $C_s = 0.1$ (LESIEUR, 2008). Esse valor oferece resultados desejáveis para escoamentos no qual ocorre turbulência isotrópica, escoamento cisalhante livre, e escoamento em canal com função de amortecimento na parede.

De forma geral, escoamentos que ocorrem com presença de parede ao longo do caminho, o modelo de Smagorinsy necessita de lei de parede (RODI *et al.*, 1997). De fato, o modelo de Smagorinsky é difusivo próximo às paredes, que pode ser comprovado através da expansão em séries de potências do componente da velocidade em função da distância (y) da parede (LESIEUR, 2008).

3.3.2 Modelo dinâmico de Germano - Lilly

A fim de suprir as deficiências do modelo de Smagorinsky, Germano *et al.* (1991) e posteriormente Lilly (1992) propuseram uma modificação no cálculo do coeficiente C_s , de forma que este não seja mais assumido como uma constante, e sim como uma função que depende do tempo e do espaço, ou seja $C_s(x, y, z, t)$. Desta forma, o coeficiente encontrado poderá assumir valores diferentes dependendo da região do escoamento e irá respeitar as condições de contorno, podendo inclusive zerar nas paredes, pois o coeficiente calculado dependerá da velocidade do escoamento.

A ideia por trás desta metodologia envolvida para o cálculo do coeficiente, consiste em criar um tensor submalha teste que possui o dobro do tamanho filtro da malha, como ilustrado na figura (3.1). Nela, aparecem o volume de controle para o filtro malha e o filtro teste, onde P

representa o ponto central do volume de controle do filtro malha, W representa o ponto à oeste de P, E representa o ponto à leste de P e $\triangle x$ é o comprimento de um volume de controle do filtro malha.



Figura 3.1: Volume de controle para o filtro malha e o filtro teste. Adaptado de Davidson (2011).

Quando aplicamos um filtro duplo nas equações de Navier-Stokes, onde o segundo filtro possui o dobro do tamanho do filtro malha, ($\tilde{\Delta} = 2\Delta$), nós temos:

$$\frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{\widetilde{u}}_i \widetilde{\widetilde{u}}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{p}}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \widetilde{\widetilde{u}}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}.$$
(3.7)

Onde o tensor submalha teste (T_{ij}) é dado por:

$$T_{ij} = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u}_i} \widetilde{\overline{u}_j}.$$

$$T_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} T_{kk} = -2C \overline{\tilde{\Delta}^2} |\overline{\tilde{S}}|^{\widetilde{\overline{S}}}_{ij}.$$
(3.8)

Logo, o tensor de Leonard é definido como:

$$L_{ij} = \overline{\tilde{u}_i u_j} - \tilde{\bar{u}}_i \overline{\tilde{u}}_j = T_{ij} - \tilde{\tau}_{ij}.$$
(3.9)

Assim, substituindo as equações (3.8) e (3.6) na equação (3.9), e fazendo a aproximação de que a constante C ao ser filtrada, não se altera, teremos:

$$\begin{split} &L_{ij} = -2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} + \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} + 2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{\tau}_{kk} \\ &L_{ij} - \left(\frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{\tau}_{kk}\right) = -2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} + 2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij} \\ &L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\left(T_{kk} - \widetilde{\tau}_{kk}\right) = -2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} + 2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij} \\ &L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk} = -2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} + 2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij} \\ &L_{ij}^d = -2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} + 2C\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij} \\ &L_{ij}^d = -2C\left(\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} - \widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij}\right). \\ &\text{Definindo um novo tensor } M_{ij} = \left(\widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} - \widetilde{\Delta^2}|\widetilde{S}|\overline{S}_{ij}\right), \text{ temos:} \\ &L_{ij}^d = -2CM_{ij}. \end{split}$$

Definindo o erro como:

$$E_{ij} = L_{ij}^d + 2CM_{ij}.$$

Podemos calcular o coeficiente por meio de uma aproximação de mínimos quadrados do erro estipulado:

$$\frac{\partial E_{ij} E_{ij}}{\partial C} = 0.$$
$$2M_{ij} \left(L_{ij}^d + 2CM_{ij} \right) = 0.$$

Impondo a condição de que o invariante $(M_{ij}M_{ij}) \neq 0$, finalmente encontramos o coeficiente que é:

$$C = -\frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}.$$
(3.10)

Agora que foi encontrado o coeficiente, é necessário substituir a equação (3.10) na equação (3.6):

$$\tau_{ij} = -2C\bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \overline{S}_{ij} + \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk}.$$
(3.11)

Por fim, substituindo a equação (3.11) na equação (3.5), e já incorporando o termo $(\frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk})$ na pressão modificada, obtemos:

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}^*}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial (2C\bar{\bigtriangleup}^2 |\bar{S}| \overline{S}_{ij})}{\partial x_j}.$$
(3.12)

Que é a equação que será resolvida. Portanto, o coeficiente C que é função do tensor de Leonard, poder ser calculado justamente por conta da definição deste tensor, que devido à diferença entre o tensor submalha teste e o tensor submalha modelado, resulta em uma região conhecida do gráfico da energia cinética turbulenta (E(k)) em função no número de onda (k), como exemplificado na figura (3.2).



Figura 3.2: Representação gráfica do tensor submalha, tensor submalha teste e o tensor de Leonard no espectro de energia cinética. Adaptado de Poinsot e Veynante (2005).

3.4 Modelos não lineares para o fechamento da turbulência

3.4.1 Modelo não linear proposto por S.B. Pope

Para propor um tensor de tensões geral, Pope (1975), diz ser necessária análise dimensional, invariância sobre transformação de coordenada e o uso de propriedades tensoriais.

Generalizando os componentes τ_{ij}^d para depender não apenas de S_{ij} mas também de Ω_{ij} , queremos τ_{ij}^d como função dessas variáveis, ou seja:

$$\tau_{ij}^d = F_{ij}\left(\widetilde{S}_{kl}, \widetilde{\Omega}_{kl}\right),\tag{3.13}$$

onde temos:

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right); \quad \widetilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

Para simplificar a escrita, será considerado como o tensor em si, seus próprios componentes. Assim:

$$S\Omega = S_{ik}\Omega_{kj} \qquad S\Omega S\Omega = S_{ik}\Omega_{kl}S_{lm}\Omega_{mj} \quad |\mathbf{S}| = \sqrt{tr(\mathbf{S}^2)}$$
$$S^2 = S_{ik}S_{kj} \qquad \{\mathbf{S}^2\} = S_{ik}S_{ki} \quad \mathbf{I} = \delta_{ij}$$

A forma mais geral para a expressão (3.13), é um polinômio tensorial infinito, dado pela seguinte forma(POPE, 1975):

$$\mathbf{a} = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{\alpha_i=0}^{\infty} \prod_{j=1}^{\infty} \sum_{\beta_j=0}^{\infty} G_{\beta_1,\beta_2...}^{\alpha_1,\alpha_2...} \mathbf{S}^{\alpha_1} \mathbf{\Omega}^{\beta_1} \mathbf{S}^{\alpha_2} \mathbf{\Omega}^{\beta_2}...$$
(3.14)

Onde os coeficientes **G** são funções dos invariantes { $\mathbf{S}^{\alpha_1} \Omega^{\beta_1} \mathbf{S}^{\alpha_2} \Omega^{\beta_2} ...$ }.

Felizmente, por meio do teorema de Cayley-Hamilton, um número de invariantes independentes dos tensores de segunda ordem linearmente independentes que podem ser formados por **S** e por Ω é finito (POPE, 1975).

Para um caso geral tridimensional, com turbulência homogênea e isotrópica a equação (3.14), consiste em um tensor polinomial com dez elementos com potências diferentes de \tilde{S}_{ij}

e $\widetilde{\Omega}_{ij}$, ou de ambos, obtidos por meio do teorema de Cayley-Hamilton, como foi proposto por (POPE, 1975), para descrever as tensões de Reynolds na metodologia RANS ou generalizando, para as tensões sub-malha na modelagem LES.

$$\boldsymbol{\tau}^{d} = \sum_{k=1}^{10} G_k \mathbf{T}^k. \tag{3.15}$$

Onde o negrito denota notação tensorial, e \mathbf{T}^k é dado por:

$$\mathbf{T}^{(1)} = \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(2)} = \widetilde{\mathbf{S}}^2 - \frac{1}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}^2)\mathbf{I}$$
$$\mathbf{T}^{(3)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 - \frac{1}{3}tr(\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2)\mathbf{I} \qquad \mathbf{T}^{(4)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$
$$\mathbf{T}^{(5)} = \widetilde{\mathbf{S}}^2\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^2 \qquad \mathbf{T}^{(6)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2\widetilde{\mathbf{S}} - \frac{2}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2)\mathbf{I}$$
$$\mathbf{T}^{(7)} = \widetilde{\mathbf{S}}^2\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2\widetilde{\mathbf{S}}^2 - \frac{2}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}^2\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2)\mathbf{I} \qquad \mathbf{T}^{(8)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^2 - \widetilde{\mathbf{S}}^2\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$
$$\mathbf{T}^{(9)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \qquad \mathbf{T}^{(10)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^2\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2\widetilde{\mathbf{S}}^2\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$$

ou seja, o polinômio tensorial infinito (3.14), pode ser transformado em um polinômio de grau finito e ser expresso na sua forma fechada como :

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk} + \sum_{k=1}^{10} G_k \mathbf{T}^k.$$
(3.16)

Após essa proposta metodológica que Pope fez para a dedução de modelos não lineares para o fechamento da turbulência, outros autores também desenvolverem modelos baseando-se na mesma metodologia. Alguns destes modelos serão apresentados nas próximas seções.

3.4.2 Modelo não linear de Lund e Novikov

Lund e Novikov baseando-se na mesma metodologia proposta por Pope, mostraram que apenas seis termos das equações (3.15) são suficientes para representar o tensor (τ), e cinco para representar o tensor deviatórico, (τ^d). Portanto, a forma polinomial genérica é dada por:

$$\boldsymbol{\tau}^{d} = C_{1}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}|\bar{\mathbf{S}}|\bar{\mathbf{S}}+C_{2}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}(\bar{\mathbf{S}}^{2})^{d}+C_{3}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}(\bar{\boldsymbol{\Omega}}^{2})^{d}+C_{4}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}(\bar{\mathbf{S}}\bar{\boldsymbol{\Omega}}-\bar{\boldsymbol{\Omega}}\bar{\mathbf{S}})+C_{5}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}\frac{1}{|\bar{\mathbf{S}}|}(\bar{\mathbf{S}}^{2}\bar{\boldsymbol{\Omega}}-\bar{\boldsymbol{\Omega}}\bar{\mathbf{S}}^{2}).$$
(3.17)

O cálculo dos coeficientes de forma dinâmica pode ter um custo computacional elevado, e

para analisar a importância de cada um dos cinco coeficientes, Lund e Novikov (1993), fizeram um estudo avaliando a correlação entre cada um destes coeficientes. O artigo demonstrou quais são os dois termos mais relevantes e os dois termos menos relevantes da equação (3.17). Também foram avaliados os três termos mais relevantes e os três termos menos relevantes e por fim, os quatro termos mais relevantes e menos relevantes da mesma equação.

Além dessa comparação, foram avaliados quais os ganhos que se tem ao calcular os coeficientes de forma dinâmica e mantendo os coeficientes como constantes. E foi constatado que de forma geral, o ganho em se calcular os coeficientes de forma dinâmica oferece uma generalidade superior ao cálculo desses coeficientes.

3.4.3 Modelo dinâmico de segunda ordem das tensões sub-malhas de Hongrui

Tendo em vista que a melhor combinação proposta por Lund e Novikov (1993) é composta pelo primeiro e quarto termo da equação (3.17), Hongrui *et al.* (2000) propuseram um modelo não linear que é a simplificação do modelo de Lund e Novikov com base nos dois melhores termos do tensor apresentado.

$$\boldsymbol{\tau}^{d} = C_{1}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2} |\bar{\mathbf{S}}| \bar{\mathbf{S}} + C_{2}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2} (\bar{\mathbf{S}}\bar{\boldsymbol{\Omega}} - \bar{\boldsymbol{\Omega}}\bar{\mathbf{S}}).$$
(3.18)

Definindo o tensor sub-malha e o tensor sub malha teste,

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$$

$$T_{ij} = \widetilde{\overline{u_i u_j}} - \widetilde{\overline{u_i u_j}}.$$

O tensor de Leonard é dado por:

$$L_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j = T_{ij} - \widetilde{\tau}_{ij}.$$
(3.19)

O tensor sub-malha teste é encontrado de forma análoga

$$\mathbf{T}^{d} = C_{1}\widetilde{\bar{\Delta}}^{2} |\widetilde{\mathbf{S}}| \widetilde{\mathbf{S}} + C_{2}\widetilde{\bar{\Delta}}^{2} (\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\bar{\mathbf{\Omega}}} - \widetilde{\bar{\mathbf{\Omega}}}\widetilde{\mathbf{S}}).$$
(3.20)

Substituindo as equações (5.9) e (3.18) na equação (5.8), obtemos

$$\mathbf{L}^d = C_1 \mathbf{M} + C_2 \mathbf{N}. \tag{3.21}$$

Onde

$$\mathbf{M} = (\widetilde{\overline{\Delta}}^2 | \widetilde{\mathbf{S}} | \widetilde{\mathbf{S}} - \widetilde{\Delta}^2 | \widetilde{\mathbf{S}} | \widetilde{\mathbf{S}}).$$
(3.22)

$$\mathbf{N} = \widetilde{\bar{\Delta}}^2 (\widetilde{\mathbf{S}} \widetilde{\bar{\mathbf{D}}} - \widetilde{\bar{\mathbf{D}}} \widetilde{\mathbf{S}}) - \bar{\Delta}^2 (\widetilde{\mathbf{S}} \widetilde{\bar{\mathbf{D}}} - \widetilde{\bar{\mathbf{D}}} \widetilde{\mathbf{S}}).$$
(3.23)

Sendo definidos os tensores **M** e **N**, agora é possível encontrar os coeficientes a partir da definição do erro dado por

$$\mathbf{E} = \mathbf{L}^d - C_1 \mathbf{M} - C_2 \mathbf{N}. \tag{3.24}$$

Ele pode ser minimizado aplicando a aproximação de mínimos quadrados;

$$\frac{\partial}{\partial C_i} tr(E^2) = 0. \tag{3.25}$$

Que por fim, resulta nas constantes

$$C_1 = \frac{(\mathbf{L}^d \mathbf{M} + \mathbf{M} \mathbf{L}^d)(2\mathbf{N} \mathbf{N}) - (\mathbf{L}^d \mathbf{N} + \mathbf{N} \mathbf{L}^d)(\mathbf{M} \mathbf{N} + \mathbf{N} \mathbf{M})}{(2\mathbf{M} \mathbf{M})(2\mathbf{N} \mathbf{N}) - (\mathbf{M} \mathbf{N} + \mathbf{N} \mathbf{M})^2},$$
(3.26)

$$C_2 = \frac{(\mathsf{L}^d\mathsf{N} + \mathsf{N}\mathsf{L}^d)(2\mathsf{M}\mathsf{M}) - (\mathsf{L}^d\mathsf{M} + \mathsf{M}\mathsf{L}^d)(\mathsf{M}\mathsf{N} + \mathsf{N}\mathsf{M})}{(2\mathsf{M}\mathsf{M})(2\mathsf{N}\mathsf{N}) - (\mathsf{M}\mathsf{N} + \mathsf{N}\mathsf{M})^2}.$$
(3.27)

Sendo que $\mathbf{L}^{d}\mathbf{M} = L_{ij}^{d}M_{ij}$ Agora é necessário substituir os coeficientes (3.26) e (3.27) na equação (3.18), que é

$$\boldsymbol{\tau}^{d} = C_{1}\widetilde{\Delta}^{2} |\widetilde{\mathbf{S}}| \widetilde{\mathbf{S}} + C_{2}\widetilde{\Delta}^{2} (\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}).$$
(3.28)

Logo, as equações de Navier Stokes filtradas se resumem a:

$$\frac{\partial(\bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i\bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\bar{p}^*}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial^2(\bar{u}_i)}{\partial x_j\partial x_j} - \frac{\partial\tau_{ij}^d}{\partial x_j}.$$
(3.29)

$$\frac{\partial(\bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i\bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\bar{p}^*}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial^2(\bar{u}_i)}{\partial x_j\partial x_j} - \frac{\partial(C_1\bar{\Delta}^2|\bar{S}|\bar{S}_{ij} + C_2\bar{\Delta}^2(\bar{S}_{ik}\bar{\Omega}_{kj} - \bar{\Omega}_{ik}\bar{S}_{kj}))}{\partial x_j}.$$
 (3.30)

Que é a equação a ser resolvida com coeficientes calculados de forma dinâmica.

3.4.4 Modelo dinâmico não linear das tensões submalhas de Bergstrom

O modelo dinâmico não linear de Wang e Bergstrom (2005), foi baseado nas considerações feitas basicamente por Gatski e Speziale (1993) e por Lund e Novikov (1993).

No artigo do Lund e Novikov (1993) foi constatado que nas cinco piores combinações dos componentes tensoriais estavam inclusos o terceiro termo da equação (3.17). Com isso, os autores deste modelo resolveram descartar essa base tensorial, para diminuir o custo computacional.

Já com base no artigo do Gatski e Speziale (1993), foi estabelecida que todas os outros componentes tensoriais foram descartados pelo fato de serem combinações lineares do primeiro, segundo e quarto termo da equação (3.17). Com isso foi estabelecido o modelo da seguinte forma:

$$\boldsymbol{\tau}^{d} = -2C_{1}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}|\bar{\mathbf{S}}|\bar{\mathbf{S}} - 4C_{2}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}(\bar{\mathbf{S}}\bar{\boldsymbol{\Omega}} - \bar{\boldsymbol{\Omega}}\bar{\mathbf{S}}) - 4C_{3}\bar{\boldsymbol{\Delta}}^{2}(\bar{\mathbf{S}}^{2})^{d}.$$
(3.31)

Esses coeficientes podem ser calculados dinamicamente e de forma análoga aos casos anteriores, baseando-se na estipulação do tensor de Leonard deviatórico e do erro que será minimizado pela aproximação de mínimos quadrados.

CAPÍTULO IV

MODELAGEM NUMÉRICA

4.1 Formulação divergente e não divergente

Ao utilizar o Método dos Volumes Finitos (MVF), antes de efetuar a discretização das equações, algumas características são decorrentes do fato de escrever a equação diferencial na forma divergente ou na forma não divergente. Essa diferença, que será apresentada nesta seção, é do ponto de vista numérico; do ponto de vista matemático não há diferença. Como exemplo, será utilizado o termo advectivo que está presente na equação de Navier-Stokes, escrito já na forma divergente, ou seja, escrito de forma que apareça matemáticamente o símbolo do divergente, que para o termo advectivo das equações de Navier-Stokes, é o divergente do produto das velocidades com a massa específica. Isso pode ser interpretado como o divergente do fluxo de quantidade de movimento linear, que significa fluxo líquido de quantidade de movimento linear através da superfície de uma partícula infinitesimal de fluido.

Utilizando as propriedades do operador divergente, temos a seguinte identidade:

$$\nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = \mathbf{V}\nabla \cdot \mathbf{V} + \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V}. \tag{4.1}$$

Como estamos tratando de escoamentos incompressíveis, o divergente da velocidade se

anula, e a equação (4.1) pode ser escrita na forma:

$$\nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V}. \tag{4.2}$$

Portanto, o lado esquerdo da equação (4.2) representa a forma divergente, e o lado direito a forma não divergente. Pode ser notado que do ponto de vista matemático, para o caso em que $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$, não há diferença entre as abordagens de tratamento do termo advectivo. A forma divergente é equivalente à forma não divergente. Vale ressaltar que para casos com escoamentos compressíveis essas abordagens também são equivalentes, mas a demonstração matemática não é a mesma da adotada aqui.

Todavia, a diferença que será apresentada é que do ponto de vista discreto, o lado esquerdo de (4.2) quando integrado sobre um volume, a rigor, não é igual ao lado direito quando este também é integrado no mesmo volume.

Antes de ser feita a demonstração da diferença entre a formulação divergente e não divergente, é necessário apresentar o Teorema de Gauss-Ostrogradski, também conhecido como Teorema de Divergência, pois a utilização do MVF requer a integração de (4.2) sobre um volume, e portanto será necessária a utilização do teorema.

Sendo V, um volume contido em \mathbb{R}^n (onde n = 3, representa o número de dimensões de um espaço tridimensional), e seja uma função definida por partes, com arestas S, que é a superfície de V. Sendo escolhido ϕ como uma função que representa um campo vetorial contínuo e diferenciável definido sobre o volume V, temos que o Teorema de Gauss-Ostrogradski é dado por:

$$\iiint_{V} \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} \, \mathrm{d}V = \oiint_{S} \boldsymbol{\phi} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}. \tag{4.3}$$

Que pode ser escrito de forma alternativa:

$$\iiint_{V} \nabla \phi \, \mathrm{d}V = \oiint_{S} \phi \, \mathrm{d}\mathbf{S}. \tag{4.4}$$

Onde $\phi = \phi \hat{\mathbf{n}}$ e d $\mathbf{S} = dS \hat{\mathbf{n}}$ são vetores e $\hat{\mathbf{n}}$ é um vetor de módulo constante e direção constante, porém arbitrária (ARFKEN; WEBER, 1999).

Tomando como exemplo um domínio discretizado em uma dimensão, onde a célula W tem a face esquerda ww e face direita w; célula P tem face esquerda w e face direita e e a célula E tem face esquerda e e face direita ee:



Figura 4.1: Domínio espacial discretizado com malha uniforme e igual a uma unidade.

- Forma divergente:

Quando se integra o termo advectivo das equações de Navier-Stokes utilizando a forma divergente de (4.2) sobre um volume, temos que pelo Teorema de Gauss-Ostrogradski:

$$\iiint_{V} \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) \, \mathrm{d}V = \oiint_{S} \mathbf{V}\mathbf{V} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}.$$
(4.5)

Realizando a integração para o volume centrado em W, apresentado na figura (4.1), considerando malha uniforme e igual a uma unidade e assumindo velocidade apenas na direção x, temos que por meio de (4.5):

$$\iint_{ww}^{w} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathbf{d} \mathbf{S} = (u_w u_w - u_{ww} u_{ww}) \,\Delta x. \tag{4.6}$$

Utilizando o mesmo procedimento para a célula centrada em P:

$$\iint_{w}^{e} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} = (u_{e} u_{e} - u_{w} u_{w}) \,\Delta x. \tag{4.7}$$

E por fim, integrando volume centrado em E,

$$\iint_{e}^{ee} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathbf{d} \mathbf{S} = (u_{ee} u_{ee} - u_{e} u_{e}) \Delta x.$$
(4.8)

Podemos observar que:

$$\iint_{ww}^{w} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} + \iint_{w}^{e} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} + \iint_{e}^{ee} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} = (u_{ee} u_{ee} - u_{ww} u_{ww}) \Delta x.$$
(4.9)

Ou seja,

$$\iint_{ww}^{w} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} + \iint_{w}^{e} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} + \iint_{e}^{ee} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S} = \iint_{ww}^{ee} \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot \mathrm{d} \mathbf{S}.$$
(4.10)

Que é o equivalente a integrar o volume centrado em P começando os limites de integração na face ww e terminando na face ee. Isso permite concluir que a forma divergente possibilita de um ponto de vista numérico o balanço da informação que está sendo calculada.

- Forma não divergente

Quando se integra o termo advectivo das equações de Navier-Stokes na forma não divergente sobre um volume, temos que impor que a velocidade se comporta como uma média dentro do volume, o que possibilita a retirada desta velocidade da integral:

$$\iiint_{V} \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} \, \mathrm{d}V = \overline{\mathbf{V}} \cdot \iiint_{V} \nabla \mathbf{V} \, \mathrm{d}V.$$
(4.11)

Agora, aplicando a forma alternativa do Teorema de Gauss-Ostrogradski:

$$\overline{\mathbf{V}} \cdot \iiint_{V} \nabla \mathbf{V} \, \mathrm{d}V = \overline{\mathbf{V}} \cdot \oiint_{S} \mathbf{V} \, \mathrm{d}\mathbf{S}.$$
(4.12)

Ainda de acordo com a figura (4.1), integrando o volume centrado em W, entre as faces ww e w, e assumindo que a velocidade ocorra só na direção x,

$$\overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{ww}^{w} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} = u_{W}(u_{w} - u_{ww}). \tag{4.13}$$

Integrando o volume centrado no ponto P, entre as faces w e e, temos:

$$\overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{w}^{e} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} = u_{P}(u_{e} - u_{w}). \tag{4.14}$$

Integrando o volume centrado em E, entre as faces e e ee,

$$\overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{e}^{ee} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} = u_E(u_{ee} - u_e). \tag{4.15}$$

E por fim, integrando o volume centrado em P, composto pelas faces ww e ee,

$$\overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{ww}^{ee} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} = u_P(u_{ee} - u_{ww}). \tag{4.16}$$

Assim, podemos concluir que a igualdade

$$\overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{ww}^{w} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} + \overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{w}^{e} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} + \overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{e}^{ee} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S} = \overline{\mathbf{V}} \cdot \iint_{ww}^{ee} \mathbf{V} \,\mathrm{d}\mathbf{S}.$$
(4.17)

Só será válida quando $\overline{\mathbf{V}}$ for a mesma para todas as células, e isso só pode ocorrer quando $u_P = u_W = u_E$. O que a rigor, pode não acontecer dependendo da aplicação.

Portanto, a forma não divergente não garante o balanço da informação que está sendo transportada ao longo do volume composto pelas pelas faces ww e ee.

Devido a essa limitação da forma não divergente, o mais indicado em MVF é utilizar a forma divergente na hora da discretização das equações, que foi o adotado durante a presente dissertação.

4.2 Discretização espacial das equações de Navier-Stokes e da Continuidade

Como foi apresentado no capítulo anterior, quando é realizada a filtragem das equações de Navier-Stokes e da continuidade, temos:

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u}_i \overline{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}.$$
(4.18)

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0. \tag{4.19}$$

Inicialmente serão analisadas as equações (4.18) sem a parte temporal. No MVF, a discretização espacial consiste em integrar a equação sobre um volume, que será apresentado na figura (4.2).



Figura 4.2: Variáveis utilizadas para o volume de controle, com as velocidades calculadas nas faces; pressão e escalares no centro do volume (ϕ) (XIE, 2015).

Sendo assim, ao integrar (4.18) sem a parte temporal, sobre o volume:

$$\iiint_{V} \left(\frac{\partial(\bar{u}_{i}\bar{u}_{j})}{\partial x_{j}}\right) \mathrm{d}V = \iiint_{V} \left(-\frac{1}{\rho}\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_{i}} + \nu\frac{\partial^{2}\bar{u}_{i}}{\partial x_{j}\partial x_{j}} - \frac{\partial\tau_{ij}}{\partial x_{j}}\right) \mathrm{d}V.$$
(4.20)

Utilizando o Teorema de Gauss-Ostrogradski na sua forma tradicional e alternativa:

$$\oint_{S} \bar{u}_{i} \bar{u}_{j} \, \mathrm{d}S_{j} = -\frac{1}{\rho} \oint_{S} \bar{p} \, \mathrm{d}S_{i} + \nu \oint_{S} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{j}} \, \mathrm{d}S_{j} - \oint_{S} \tau_{ij} \, \mathrm{d}S_{j}.$$
(4.21)

Tomando como base a figura (4.2), e discretizando a equação apenas na direção x e em torno do ponto P:

$$\iint_{w}^{e} \bar{u}_{1}\bar{u}_{1} \,\mathrm{d}S_{1} + \iint_{s}^{n} \bar{u}_{1}\bar{u}_{2} \,\mathrm{d}S_{2} + \iint_{b}^{t} \bar{u}_{1}\bar{u}_{3} \,\mathrm{d}S_{3} = -\frac{1}{\rho} \iint_{w}^{e} \bar{p} \,\mathrm{d}S_{1} + \nu \iint_{w}^{e} \frac{\partial \bar{u}_{1}}{\partial x_{1}} \,\mathrm{d}S_{1} + \nu \iint_{s}^{n} \frac{\partial \bar{u}_{1}}{\partial x_{2}} \,\mathrm{d}S_{2} + \nu \iint_{b}^{t} \frac{\partial \bar{u}_{1}}{\partial x_{3}} \,\mathrm{d}S_{3} + -\iint_{w}^{e} \tau_{11} \,\mathrm{d}S_{1} - \iint_{s}^{n} \tau_{12} \,\mathrm{d}S_{2} - \iint_{b}^{t} \tau_{13} \,\mathrm{d}S_{3}.$$
(4.22)

Que equivale a

$$\begin{split} \left[(\bar{u}_1 \bar{u}_1)_e - (\bar{u}_1 \bar{u}_1)_w \right] \Delta y \Delta z + \left[(\bar{u}_1 \bar{u}_2)_n - (\bar{u}_1 \bar{u}_2)_s \right] \Delta x \Delta z + \left[(\bar{u}_1 \bar{u}_3)_t - (\bar{u}_1 \bar{u}_3)_b \right] \Delta x \Delta y = \\ &= -\frac{1}{\rho_P} (\bar{p}_e - \bar{p}_w) \Delta y \Delta z + \nu_P \left[\frac{\partial \overline{u}_1}{\partial x_1} \right]_w^e \Delta y \Delta z + \nu_P \left[\frac{\partial \overline{u}_1}{\partial x_2} \right]_s^n \Delta x \Delta z + \nu_P \left[\frac{\partial \overline{u}_1}{\partial x_3} \right]_b^t \Delta x \Delta y - \\ &- \left[(\tau_{11})_e - (\tau_{11})_w \right] \Delta y \Delta z - \left[(\tau_{12})_n - (\tau_{12})_s \right] \Delta x \Delta z - \left[(\tau_{13})_t - (\tau_{13})_b \right] \Delta y \Delta x. \end{split}$$

Dividindo toda a equação anterior por $(\Delta x \Delta y \Delta z)$, obtem-se

$$\frac{\left[\left(\bar{u}_{1}\bar{u}_{1}\right)_{e}-\left(\bar{u}_{1}\bar{u}_{1}\right)_{w}\right]}{\Delta x}+\frac{\left[\left(\bar{u}_{1}\bar{u}_{2}\right)_{n}-\left(\bar{u}_{1}\bar{u}_{2}\right)_{s}\right]}{\Delta y}+\frac{\left[\left(\bar{u}_{1}\bar{u}_{3}\right)_{t}-\left(\bar{u}_{1}\bar{u}_{3}\right)_{b}\right]}{\Delta z}=\\
=-\frac{1}{\rho_{P}}\frac{\left(\bar{p}_{e}-\bar{p}_{w}\right)}{\Delta x}+\frac{\nu_{P}}{\Delta x}\left[\frac{\partial\overline{u}_{1}}{\partial x_{1}}\right]_{e}-\frac{\nu_{P}}{\Delta x}\left[\frac{\partial\overline{u}_{1}}{\partial x_{1}}\right]_{w}+\frac{\nu_{P}}{\Delta y}\left[\frac{\partial\overline{u}_{1}}{\partial x_{2}}\right]_{n}-\frac{\nu_{P}}{\Delta y}\left[\frac{\partial\overline{u}_{1}}{\partial x_{2}}\right]_{s}+\frac{\nu_{P}}{\Delta z}\left[\frac{\partial\overline{u}_{1}}{\partial x_{3}}\right]_{t}-\\
-\frac{\nu_{P}}{\Delta z}\left[\frac{\partial\overline{u}_{1}}{\partial x_{3}}\right]_{b}-\frac{\left[\left(\tau_{11}\right)_{e}-\left(\tau_{11}\right)_{w}\right]}{\Delta x}-\frac{\left[\left(\tau_{12}\right)_{n}-\left(\tau_{12}\right)_{s}\right]}{\Delta y}-\frac{\left[\left(\tau_{13}\right)_{t}-\left(\tau_{13}\right)_{b}\right]}{\Delta z}.$$
(4.23)

A discretização das equações na direção y e z ocorrem de forma análoga, e são dadas respectivamente por:

$$\frac{\left[\left(\bar{u}_{2}\bar{u}_{1}\right)_{e}-\left(\bar{u}_{2}\bar{u}_{1}\right)_{w}\right]}{\Delta x}+\frac{\left[\left(\bar{u}_{2}\bar{u}_{2}\right)_{n}-\left(\bar{u}_{2}\bar{u}_{2}\right)_{s}\right]}{\Delta y}+\frac{\left[\left(\bar{u}_{2}\bar{u}_{3}\right)_{t}-\left(\bar{u}_{2}\bar{u}_{3}\right)_{b}\right]}{\Delta z}=\\
=-\frac{1}{\rho_{P}}\frac{\left(\bar{p}_{n}-\bar{p}_{s}\right)}{\Delta y}+\frac{\nu_{P}}{\Delta x}\left[\frac{\partial \overline{u}_{2}}{\partial x_{1}}\right]_{e}-\frac{\nu_{P}}{\Delta x}\left[\frac{\partial \overline{u}_{2}}{\partial x_{1}}\right]_{w}+\frac{\nu_{P}}{\Delta y}\left[\frac{\partial \overline{u}_{2}}{\partial x_{2}}\right]_{n}-\frac{\nu_{P}}{\Delta y}\left[\frac{\partial \overline{u}_{2}}{\partial x_{2}}\right]_{s}+\frac{\nu_{P}}{\Delta z}\left[\frac{\partial \overline{u}_{2}}{\partial x_{3}}\right]_{t}-\\
-\frac{\nu_{P}}{\Delta z}\left[\frac{\partial \overline{u}_{2}}{\partial x_{3}}\right]_{b}-\frac{\left[\left(\tau_{21}\right)_{e}-\left(\tau_{21}\right)_{w}\right]}{\Delta x}-\frac{\left[\left(\tau_{22}\right)_{n}-\left(\tau_{22}\right)_{s}\right]}{\Delta y}-\frac{\left[\left(\tau_{23}\right)_{t}-\left(\tau_{23}\right)_{b}\right]}{\Delta z}.$$
(4.24)

$$\frac{\left[\left(\bar{u}_{3}\bar{u}_{1}\right)_{e}-\left(\bar{u}_{3}\bar{u}_{1}\right)_{w}\right]}{\Delta x}+\frac{\left[\left(\bar{u}_{3}\bar{u}_{2}\right)_{n}-\left(\bar{u}_{3}\bar{u}_{2}\right)_{s}\right]}{\Delta y}+\frac{\left[\left(\bar{u}_{3}\bar{u}_{3}\right)_{t}-\left(\bar{u}_{3}\bar{u}_{3}\right)_{b}\right]}{\Delta z}=\\
=-\frac{1}{\rho_{P}}\frac{\left(\bar{p}_{t}-\bar{p}_{b}\right)}{\Delta x}+\frac{\nu_{P}}{\Delta x}\left[\frac{\partial \bar{u}_{3}}{\partial x_{1}}\right]_{e}-\frac{\nu_{P}}{\Delta x}\left[\frac{\partial \bar{u}_{3}}{\partial x_{1}}\right]_{w}+\frac{\nu_{P}}{\Delta y}\left[\frac{\partial \bar{u}_{3}}{\partial x_{2}}\right]_{n}-\frac{\nu_{P}}{\Delta y}\left[\frac{\partial \bar{u}_{3}}{\partial x_{2}}\right]_{s}+\frac{\nu_{P}}{\Delta z}\left[\frac{\partial \bar{u}_{3}}{\partial x_{3}}\right]_{t}-\\
-\frac{\nu_{P}}{\Delta z}\left[\frac{\partial \bar{u}_{3}}{\partial x_{3}}\right]_{b}-\frac{\left[\left(\tau_{31}\right)_{e}-\left(\tau_{31}\right)_{w}\right]}{\Delta x}-\frac{\left[\left(\tau_{32}\right)_{n}-\left(\tau_{32}\right)_{s}\right]}{\Delta y}-\frac{\left[\left(\tau_{33}\right)_{t}-\left(\tau_{33}\right)_{b}\right]}{\Delta z}.$$
(4.25)

Portanto as equações (4.23), (4.24) e (4.25) formam o conjunto das equações filtradas de Navier-Stokes discretizadas.

Para a discretização da equação (4.19), o processo é análogo. Integrando em relação ao volume e aplicando o Teorema de Gauss-Ostrogradski.

$$\iiint_{V} \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial x_{i}} dV = \bigoplus_{S} \overline{u}_{i} dS_{i}$$

$$= 0.$$
(4.26)

Ou seja,

$$\iint_{w}^{e} \bar{u}_{1} \,\mathrm{d}S_{1} + \iint_{s}^{n} \bar{u}_{2} \,\mathrm{d}S_{2} + \iint_{b}^{t} \bar{u}_{3} \,\mathrm{d}S_{3} = 0.$$

$$[(u_{1})_{e} - (u_{1})_{w}] \,\Delta y \Delta z + [(u_{2})_{n} - (u_{2})_{s}] \,\Delta x \Delta z + [(u_{3})_{t} - (u_{3})_{b}] \,\Delta x \Delta y = 0.$$
(4.27)

Por fim, dividindo ambos os lados da equação (4.27) por $\Delta x \Delta y \Delta z$, obtemos a equação da continuidade discretizada.

$$\frac{(u_1)_e - (u_1)_w}{\Delta x} + \frac{(u_2)_n - (u_2)_s}{\Delta y} + \frac{(u_3)_t - (u_3)_b}{\Delta z} = 0.$$
(4.28)

4.3 Esquema numérico para o termo advectivo

O termo advectivo das equações de Navier-Stokes é dado pela expressão:

$$\frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial(u_i u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(u_i u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(u_i u_3)}{\partial x_3}.$$
(4.29)

Onde i pode ser 1, 2 ou 3, que representa as velocidades na direção x, y e z, respectivamente.

O tratamento deste termo advectivo será apresentado de forma generalizada, pois também pode ser aplicado quando se trata de um transporte advectivo de uma variável qualquer.

Assim, a advecção de uma variável ϕ , que é expressa:

$$\frac{\partial(u_j\phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial(u_1\phi)}{\partial x_1} + \frac{\partial(u_2\phi)}{\partial x_2} + \frac{\partial(u_3\phi)}{\partial x_3}.$$

Com base no diagrama de variáveis normalizadas, a variável advectada ϕ pode ser normalizada por (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003):

$$\hat{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U}.\tag{4.30}$$



Figura 4.3: Definição das variáveis locais e sistema de coordenadas (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003).

Sendo os subscritos U (upstream) e D (downstream) representam as células à montante e à jusante, respectivamente. Sendo que U fica localizado na direção upstrem da face f da célula considerada(ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003).

Neste método, a face da célula possui um valor normalizado para cada função dependentes do upwind, sendo:

$$\hat{\phi}_f = f(\hat{\phi}_P, \hat{\xi}_P, \hat{\xi}_f),\tag{4.31}$$

Onde as coordenadas generalizadas são dadas por:

$$\hat{\xi}_P = \frac{\xi_P - \xi_U}{\xi_D - \xi_U}.$$
(4.32)

$$\hat{\xi}_f = \frac{\xi_f - \xi_U}{\xi_D - \xi_U}.$$
(4.33)

Tendo visto as definições acima, o esquema advectivo adotado nas implementações do modelos não lineares é dada pelo esquema conhecido como CUBISTA (Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for Treatment of Advection) (ALVES; OLIVEIRA; PINHO, 2003).

$$\hat{\phi}_{f} = \begin{cases} \left[1 + \frac{\hat{\xi}_{f} - \hat{\xi}_{P}}{3(1 - \hat{\xi}_{P})} \right] \frac{\hat{\xi}_{f}}{\hat{\xi}_{P}} \hat{\phi}_{P}, & 0 < \hat{\phi}_{P} < \frac{3}{4} \hat{\xi}_{P} \\ \frac{\hat{\xi}_{f}(1 - \hat{\xi}_{f})}{\hat{\xi}_{P}(1 - \hat{\xi}_{P})} \hat{\phi}_{P} + \frac{\hat{\xi}_{f}(\hat{\xi}_{f} - \hat{\xi}_{P})}{1 - \hat{\xi}_{P}}, & \frac{3}{4} \hat{\xi}_{P} \le \hat{\phi}_{P} \le \frac{1 + 2(\hat{\xi}_{f} - \hat{\xi}_{P})}{2\hat{\xi}_{f} - \hat{\xi}_{P}} \hat{\xi}_{P} \\ 1 - \frac{1 - \hat{\xi}_{f}}{2(1 - \hat{\xi}_{P})} (1 - \hat{\phi}_{P}), & \frac{1 + 2(\hat{\xi}_{f} - \hat{\xi}_{P})}{2\hat{\xi}_{f} - \hat{\xi}_{P}} \hat{\xi}_{P} < \hat{\phi}_{P} < 1 \\ \hat{\phi}_{P}, & \text{no restante.} \end{cases}$$

4.4 Integração temporal

O método de integração utilizado no código MFSim, foi o SBDF (Simiimplicit Backward Differentiation Formula), que tem como característica resolver o termo difusivo de forma implícita e o termo advectivo das equações de Navier-Stokes, de forma explícita.

O método exige que o passo de tempo seja função do tempo utilizado no termo advectivo (Δt_{adv}) . Sendo assim:

$$\Delta t = C \left(\frac{1}{\Delta t_{adv}}\right)^{-1}$$

Onde:

$$\Delta t_{adv} = \frac{\Delta x}{|u|_{max}} + \frac{\Delta y}{|v|_{max}} + \frac{\Delta z}{|w|_{max}}$$

E C é a condição de CFL(Courant-Friedrichs-Lewy) compreendido entre 0 e 1, e Δx , Δy e Δz , são dimensões da célula nas direções x, y e z.

Com isso, as equações de Navier-Stokes adquirem a seguinte forma:

$$\frac{\alpha_{2}(\rho u_{i})|^{n+1} + \alpha_{1}(\rho u_{i})|^{n} + \alpha_{0}(\rho u_{i})|^{n-1}}{\Delta t^{n+1}} = -\beta_{1} \left[\frac{\partial(\rho \bar{u}_{i} \bar{u}_{j})}{\partial x_{j}} \right]^{n} - \beta_{0} \left[\frac{\partial(\rho \bar{u}_{i} \bar{u}_{j})}{\partial x_{j}} \right]^{n-1} - \frac{\partial p}{\partial x_{i}} \Big|^{n+1} + \theta_{1} \left[\mu \frac{\partial^{2} \bar{u}_{i}}{\partial x_{j} \partial x_{j}} \right]^{n} + \theta_{0} \left[\mu \frac{\partial^{2} \bar{u}_{i}}{\partial x_{j} \partial x_{j}} \right]^{n-1}$$
(4.34)

Onde $\alpha_2 = 1, 5$; $\alpha_1 = -2$; $\alpha_0 = 0, 5$; $\theta_2 = 1$; $\theta_1 = 0$; $\theta_0 = 0$; $\beta_1 = 2$ e $\beta_0 = -1$ podem ser conferidos em Damasceno (2018).

4.5 Acoplamento Pressão - Velocidade

No método do passo fracionado a pressão é utilizada para impor a equação da continuidade e para calcular o campo de velocidade no primeiro passo do método (FERZIGER; PERIC, 2012).

Sendo as equações de Navier-Stokes e da continuidade dadas por:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}.$$
(4.35)

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \tag{4.36}$$

Nas três direções as equações serão:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = RHS_u - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x}.$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = RHS_v - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y}.$$
$$\frac{\partial w}{\partial t} = RHS_w - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z}.$$
$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0.$$

Onde, RHS_u , RHS_v , RHS_w representam o termo advectivo e difusivo nas direções x, y e z, respectivamente.

Na discretização adotada, o subscrito *i* representa a posição na malha espacial e o sobrescrito *n* representa a posição na malha temporal. Inicialmente a pressão é calculada de forma implícita, ou seja, no tempo n + 1.

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^n}{\Delta t} &= RHS_u^n - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}^{n+1} \\ \frac{v_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^n}{\Delta t} &= RHS_v^n - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}^{n+1} \\ \frac{w_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^n}{\Delta t} &= RHS_w^n - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z}^{n+1} \\ \frac{u_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y} + \frac{w_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z} = 0. \end{aligned}$$

Para fins metodológicos, iremos separar o método em cinco etapas, que são dadas por:

- Etapa 1 - Passo preditor

Consiste em obter u^*, v^* e w^* pelas equações (4.37), (4.38) e (4.39).

$$\frac{u_{i,j,k}^* - u_{i,j,k}^n}{\Delta t} = RHS_u^n - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x}^n.$$
(4.37)

$$\frac{v_{i,j,k}^* - v_{i,j,k}^n}{\Delta t} = RHS_v^n - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y}^n.$$
(4.38)

$$\frac{w_{i,j,k}^* - w_{i,j,k}^n}{\Delta t} = RHS_w^n - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z}^n.$$
(4.39)

- Etapa 2 - Passo corretor

Corrigire $u \in v$ usando as equações (4.40), (4.41) e (4.42).

$$\frac{u_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}^{n+1}.$$
(4.40)

$$\frac{v_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}^{n+1}.$$
(4.41)

$$\frac{w_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z}^{n+1}.$$
(4.42)

Derivando as equações (4.40), (4.41) e (4.42) em relação à x, y e z respectivamente,

temos:

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\frac{\partial u_{i,j,k}^{n+1}}{\partial x} - \frac{\partial u_{i,j,k}^*}{\partial x} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}^{n+1}.$$
(4.43)

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\frac{\partial v_{i,j,k}^{n+1}}{\partial y} - \frac{\partial v_{i,j,k}^*}{\partial y} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}^{n+1}.$$
(4.44)

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\frac{\partial w_{i,j,k}^{n+1}}{\partial z} - \frac{\partial w_{i,j,k}^*}{\partial z} \right] = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}^{n+1}.$$
(4.45)

- Etapa 3 - Cálculo da correção da pressão

Somando as equações (4.43), (4.44) e (4.45) e utilizando a equação da continuidade, temos a equação de Poisson para a correção da pressão.

$$\nabla^2 p = -\frac{\rho}{\Delta t} \left[\frac{\partial u^*}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y} + \frac{\partial w^*}{\partial z} \right].$$
(4.46)

- Etapa 4 - Iteração

Iterar entre os passos 2 e 3 afim de determinar a pressão e velocidade com precisão necessária (MALISKA, 2017).

- Etapa 5 - Iteração no tempo

Após realizar os passos de 1 à 4, avançar no tempo (MALISKA, 2017).

4.6 Método Multigrid

A base do método multigrid (MM) está em como lidar com o método iterativo da solução do sistema linear. Sua taxa de convergência depende dos autovalores da matriz de iteração que será resolvida. O resultado dos autovalores implicará o quão rápida será a solução do sistema. Os autovetores associados aos seus autovalores irão determinar a distribuição espacial dos erros de iteração, e eles variam consideravelmente de método para método (FERZIGER; PERIC, 2012).

Como a maioria dos problemas envolvendo dinâmica dos fluidos com aplicação prática exige um elevado custo computacional, o método utilizado no código MFSim para o problema tratado na dissertação, foi o MM, pois possibilita um aumento considerável na velocidade de resolução dos sistemas lineares que surgem devido as discretizações das equações envolvidas, pois o método é baseado em ações corretivas Maliska (2017).

O MM consiste em resolver um sistema linear do tipo:

$$A\phi = B. \tag{4.47}$$

Sendo A a matriz constituída pelos coeficientes, ϕ representa as incógnitas envolvidas e B é a matriz que possui os termos fontes.

A solução da equação (4.47) poderia ser feita por algum método iterativo tradicional, como por exemplo o método de Jacobi, Gauss-Seidel, ou TDMA (TriDiagonal Matrix Algorithm), porém, já foi constatado na literatura que os erros de baixa frequência que constituem as malhas mais finas são os responsáveis pela lentidão na convergência dos métodos que utilizam apenas um único nível de malha (VILLAR, 2007).

O princípio do MM é que cada faixa de frequência de erro tem que ser reduzida no espaçamento mais adequado (VILLAR, 2007). Para isso, o método multigrid trabalha com diferentes níveis de malha, sendo que a malha base constitui a malha mais fina, e cada nível posterior tem um aumento gradativo no nível e do tamanho da malha. Desta forma os comprimentos de onda dos erros que são longos em malhas finas vão se tornando cada vez mais curtos em malhas grossas (MCCORMICK, 1987).

Para uma análise detalhada sobre o método multigrid, consultar Villar (2007).

CAPÍTULO V

MODELAGEM DE FECHAMENTO NAO LINEAR

5.1 Modelo não linear de Wang e Bergstrom

O primeiro modelo não linear escolhido para o fechamento da turbulência, foi o modelo de Wang e Bergstrom simplificado. O procedimento foi realizado de forma a reduzir a quantidade de coeficientes de três para dois (HONGRUI *et al.*, 2000).

O modelo dos autores Wang e Bergstrom (2005), que é baseado nos artigos encontrados em KOSOVIĆ (1997) e Pope (1975), é dado da seguinte forma:

$$\tau_{ij}^{d} = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} - 4C_2\widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S}_{ik}\widetilde{\Omega}_{kj} - \widetilde{\Omega}_{ik}\widetilde{S}_{kj}) - 4C_3\widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S}_{ik}\widetilde{S}_{kj})^d.$$
(5.1)

Sendo $|\widetilde{S}| = \sqrt{2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}} e()^d$, um operador que gera o tensor deviatórico, ou seja, um tensor com a soma da diagonal principal igual a zero, portanto: $(\widetilde{S_{ik}}\widetilde{S_{kj}})^d = \widetilde{S_{ik}}\widetilde{S_{kj}} - \frac{1}{3}\widetilde{S_{mn}}\widetilde{S_{mn}}\delta_{ij}$.

5.1.1 Modelo não linear de Hongrui - modificado

Para, a primeira implementação, foi feita uma simplificação com base nos artigos dos autores (HONGRUI *et al.*, 2000) e Lund e Novikov (1993), no qual foi avaliada quais eram as melhores e piores duplas das cinco bases tensoriais apresentadas. Com isso, foi descartado o último termo da equação (5.1).

Portanto, a simplificação resulta em:

$$\tau_{ij}^{d} = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S}_{ij} - 4C_2\widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S}_{ik}\widetilde{\Omega}_{kj} - \widetilde{\Omega}_{ik}\widetilde{S}_{kj}).$$
(5.2)

Agora o desafio é calcular os coeficientes ${\it C}_1$ e ${\it C}_2$ de forma dinâmica.

O procedimento para o cálculo destes coeficientes apresentado na maioria da literatura encontrada é dada pela aproximação por mínimos quadrados (WANG; BERGSTROM, 2005), (HONGRUI *et al.*, 2000), (LILLY, 1992), (YANG *et al.*, 2012) e (LUND; NOVIKOV, 1993).

Esse procedimento resulta em coeficientes, que são tensores invariantes dependentes dos tensores deviatóricos da taxa de deformação, taxa de rotação e tensor de Leonard.

Porém, um método alternativo foi utilizado para a presente dissertação. Os autores desenvolveram um procedimento que resulta nos mesmos coeficientes encontrados na literatura para o caso avaliado, porém, do ponto de vista prático o procedimento proposto foi avaliado como mais simples.

O método consiste em primeiramente definir o tensor submalha e o tensor submalha teste como:

$$\tau_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}. \tag{5.3}$$

$$T_{ij} = \widehat{\widetilde{u_i u_j}} - \widehat{\widetilde{u_i}}\widehat{\widetilde{u_j}}.$$
(5.4)

O tensor de Leonard é dado por:

$$L_{ij} = \widehat{\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j} - \widehat{\widetilde{u}_i} \widehat{\widetilde{u}_j} = T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}}.$$
(5.5)

O tensor submalha teste é encontrado de forma análoga ao tensor de Reynolds submalha:

$$T_{ij}^{d} = -2C_1 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - 4C_2 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}).$$
(5.6)

Substituindo as equações (5.2) e (5.6) na equação (5.5), obtemos:

$$L_{ij} = -2C_1 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - 4C_2 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{\Omega}}_{kj} - \widehat{\widetilde{\Omega}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj}) + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} + 2C_1 \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} + 4C_2 \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{\Omega}}_{kj} - \widehat{\widetilde{\Omega}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj}) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widehat{\tau}_{kk},$$

$$L_{ij} = -2C_1(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}}) - 4C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})\right] + \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widehat{\tau_{kk}},$$

$$L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij} (T_{kk} - \widehat{\tau_{kk}}) = -2C_1(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}}) - 4C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})\right],$$

$$L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk} = -2C_1(\widehat{\Delta}^2|\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widehat{\Delta}^2|\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}}) - 4C_2\left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - \widehat{\Delta}^2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})\right],$$

$$L_{ij}^{d} = -2C_{1}(\widehat{\widetilde{\Delta}}^{2} |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^{2} |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}}) - 4C_{2} \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^{2} (\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\Omega_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - \widetilde{\Delta}^{2} (\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\Omega_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})\right],$$

$$L_{ij}^d = -C_1 M_{ij} - C_2 N_{ij}, (5.7)$$

Onde,

$$M_{ij} = 2(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}).$$
(5.8)

$$N_{ij} = 4 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) \right].$$
(5.9)

Sendo definidos os tensores M_{ij} e N_{ij} , agora é possível encontrar os coeficientes realizando uma contração na equação (5.7), que possibilita aparecer tensores invariantes.

Inicialmente, multiplicando ambos os lados da equação (5.7) por M_{ij} , temos:

$$L_{ij}^{d}M_{ij} = -C_1 M_{ij} M_{ij} - C_2 N_{ij} M_{ij}.$$
(5.10)

Analogamente, multiplicando ambos os lados da equação (5.7) por N_{ij} , temos:

$$L_{ij}^d N_{ij} = -C_1 M_{ij} N_{ij} - C_2 N_{ij} N_{ij}.$$
(5.11)

Por fim, resolvendo o sistema composto pelas equações (5.10) e (5.11), encontramos as constantes:

$$C_1 = \frac{(L_{ij}^d M_{ij})(N_{ij} N_{ij}) - (L_{ij}^d N_{ij})(M_{ij} N_{ij})}{(M_{ij} N_{ij})(M_{ij} N_{ij}) - (N_{ij} N_{ij})(M_{ij} M_{ij})}.$$
(5.12)

$$C_{2} = \frac{(L_{ij}^{d}N_{ij})(M_{ij}M_{ij}) - (L_{ij}^{d}M_{ij})(M_{ij}N_{ij})}{(M_{ij}N_{ij})(M_{ij}N_{ij}) - (N_{ij}N_{ij})(M_{ij}M_{ij})}.$$
(5.13)

Agora basta substituir os coeficientes (5.12) e (5.13) na equação (5.2), que é

$$\tau_{ij}^d = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S_{ij}} - 4C_2\widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S_{ik}}\widetilde{\Omega_{kj}} - \widetilde{\Omega_{ik}}\widetilde{S_{kj}}).$$

Logo, as equações de Navier-Stokes filtradas se resumem a:

$$\frac{\partial(\widetilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\widetilde{p}}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial^2(\widetilde{u}_i)}{\partial x_j\partial x_j} - \frac{\partial\tau_{ij}}{\partial x_j}.$$
(5.14)

$$\frac{\partial(\widetilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\widetilde{p^*}}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial^2(\widetilde{u}_i)}{\partial x_j\partial x_j} - \frac{\partial(-2C_1\widetilde{\Delta}^2|\widetilde{S}|\widetilde{S_{ij}} - 4C_2\widetilde{\Delta}^2(\widetilde{S_{ik}}\widetilde{\Omega_{kj}} - \widetilde{\Omega_{ik}}\widetilde{S_{kj}}))}{\partial x_j}.$$
 (5.15)

Sendo que $\widetilde{p^*}$ é a pressão modificada, sendo já incluída a parte isotrópica do tensor submalha.

5.2 Modelo de S.B. Pope

O modelo criado por Pope é próximo do que foi apresentado por Wang e Bergstrom (2005), porém, neste é feita uma simplificação apresentada em Pope (2001), com o coeficiente $C_2 = -2C_3$, e portanto o modelo é apresentado como segue:

$$\tau_{ij}^{d} = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S_{ij}} - 2C_2\widetilde{\Delta}^2 \left[(\widetilde{S_{ik}}\widetilde{\Omega_{kj}} - \widetilde{\Omega_{ik}}\widetilde{S_{kj}}) - 2(\widetilde{S_{ik}}\widetilde{S_{kj}})^d \right].$$
(5.16)

Para calcular os coeficientes C_1 e C_2 , o procedimento é análogo aos anteriores, começando por estipular o tensor de Leonard:

$$L_{ij} = \widehat{\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j} - \widehat{\widetilde{u}}_i \widehat{\widetilde{u}}_j = T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}}.$$
(5.17)

O tensor submalha teste é encontrado de forma análoga ao tensor de Reynolds submalha:

$$T_{ij}^{d} = -2C_1\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}}_{ij} - 2C_2\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right].$$
(5.18)

Substituindo as equações (5.16) e (5.18) na equação (5.17), obtemos

$$L_{ij} = -2C_1 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - 2C_2 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right] + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} + \\ + 2C_1 \widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} + 2C_2 \widehat{\Delta}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right] - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widehat{\tau_{kk}},$$

$$\begin{split} L_{ij} &= -2C_1(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}}) - \\ &- 2C_2 \left\{ \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right] - \widetilde{\Delta}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right] \right\} + \\ &+ \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widehat{\tau_{kk}}, \end{split}$$

$$\begin{split} L_{ij} &- \frac{1}{3} \delta_{ij} \left(T_{kk} - \widehat{\tau_{kk}} \right) = \\ &= -2C_1 \left(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} \right) - \\ &- 2C_2 \left\{ \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[\left(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}} \right) - 2\left(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}} \right)^d \right] - \widetilde{\Delta}^2 \left[\left(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}} \right)^d \right] \right\}, \end{split}$$

$$\begin{split} L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} &= \\ &= -2C_1(\widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|\widehat{\widetilde{S}_{ij}}) - \\ &- 2C_2 \left\{ \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right] - \widetilde{\Delta}^2 \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d \right] \right\}, \end{split}$$

$$L_{ij}^{d} = -2C_{1}(\widetilde{\Delta}^{2} | \widetilde{\widetilde{S}} | \widetilde{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^{2} | \widetilde{\widetilde{S}} | \widetilde{\widetilde{S}_{ij}}) - \\ -2C_{2} \left\{ \widetilde{\widetilde{\Delta}}^{2} \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^{d} \right] - \widetilde{\Delta}^{2} \left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^{d} \right] \right\},$$

$$L_{ij}^d = -C_1 M_{ij} - C_2 N_{ij}. (5.19)$$

Sendo,

$$M_{ij} = 2(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}}).$$
(5.20)

$$N_{ij} = 2\left\{\widehat{\widetilde{\Delta}}^{2}\left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^{d}\right] - \widetilde{\Delta}^{2}\left[(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - 2(\widehat{\widetilde{S}_{ik}}\widehat{\widetilde{S}_{kj}})^{d}\right]\right\}.$$
(5.21)

Estabelecendo exatamente o mesmo procedimento adotado para encontrar as equações (5.10) e (5.11), teremos como resultado os coeficientes C_1 e C_2 com o mesmo formato dos encontrados em (5.12) e (5.13), porém com os tensores N_{ij} e M_{ij} apresentados em (5.20) e (5.21).

Por fim, agora basta substituir os coeficientes calculados na equação (5.16), que teremos o modelo não linear para o tensor submalha.

5.3 Modelo não linear de Serrin

Como apresentado no artigo de Serrin (1959), o modelo não linear apresentado foi baseado nos postulados de Stokes, que são:

 O tensor τ^d_{ij} é uma função contínua do tensor taxa de deformação S_{ij} e independente de todas as outras propriedades cinemáticas;

- O tensor τ^d_{ij} não depende explicitamente da posição x (homogeneidade espacial);
- Não há direção preferencial no espaço (isotropia);
- Quando $S_{ij} = 0$, τ^d_{ij} se reduz à $\tau^d_{ij} = -p\delta_{ij}$.

Para satisfazer os dois primeiros itens, temos matematicamente a expressão:

$$\tau_{ij}^d = \tau_{ij}^d(S_{mn}),$$

Por meio da aplicação do teorema de Cayley-Hamilton, temos (SERRIN, 1959), (KOSOVIĆ, 1997):

$$\tau_{ij}^d = -C_1 \widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}| \widetilde{S_{ij}} - C_2 \widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S_{ik}} \widetilde{S_{kj}})^d.$$
(5.22)

O tensor submalha teste será:

$$T_{ij}^{d} = -C_1 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - C_2 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d.$$
(5.23)

Substituindo as equações (5.22) e (5.23) na equação envolvendo o tensor de Leonard (5.17), obtemos

$$\begin{split} L_{ij} &= -C_1 \widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - C_2 \widehat{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} + C_1 \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} + C_2 \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widehat{\tau}_{kk} \\ &= -C_1 (\widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}) - C_2 \left[\widehat{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d \right] + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widehat{\tau}_{kk}, \\ L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} (T_{kk} - \widehat{\tau}_{kk}) = -C_1 (\widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}) - C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d \right], \\ L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} = -C_1 (\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}) - C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d \right], \\ L_{ij} = -C_1 (\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}) - C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d \right], \\ L_{ij}^d = -C_1 (\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}) - C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d \right], \\ L_{ij}^d = -C_1 (\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}}_{ij}) - C_2 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}}_{ik} \widehat{\widetilde{S}}_{kj})^d \right], \end{aligned}$$

Onde,

$$M_{ij} = (\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}}).$$
(5.25)

$$N_{ij} = \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}})^d\right].$$
(5.26)

Assim como nos casos anteriores, para encontrar as equações (5.10) e (5.11), teremos como resultado os coeficientes C_1 e C_2 com o mesmo formato dos encontrados em (5.12) e (5.13), porém com os tensores N_{ij} e M_{ij} apresentados em (5.25) e (5.26).

Por fim, agora basta substituir os coeficientes calculados na equação (5.22), que teremos o tensor submalha não linear que depende apenas do tensor taxa de deformação.

5.4 Nova proposta do cálculo dos coeficientes

O cálculo dos coeficientes de forma dinâmica no modelo não linear requer um custo computacional elevado, pois cada um dos invariantes que estão em cada coeficiente, correspondem a um somatório com 9 elementos. Por exemplo, o primeiro invariante que está contido no numerador do coeficiente C_1 , que é $L_{ij}^d M_{ij} = (L_{11}^d M_{11} + L_{12}^d M_{12} + L_{13}^d M_{13} + L_{21}^d M_{21} + L_{22}^d M_{22} + L_{23}^d M_{23} + L_{31}^d M_{31} + L_{32}^d M_{32} + L_{33}^d M_{33}).$

Sabendo desse custo, e após constatar no artigo do Wang e Bergstrom (2005) que os modelos não lineares podem ser reduzidos ao modelo linear de Germano, os autores investigaram se havia alguma forma de atenuar este cálculo.

No artigo do Yang *et al.* (2012), foi demonstrado por meio de dados experimentais que $M_{ij}M_{ij} \gg M_{ij}N_{ij}$ para o caso de um escoamento que ocorre em um canal, e portanto, para o cálculo de C_1 seria razoável supor que a equação (5.10) pode ser escrita como:

$$L_{ij}^d M_{ij} = -C_1 M_{ij} M_{ij},$$

$$C_1 = -\frac{L_{ij}^d M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}.$$
(5.27)

Após calcular o C_1 pela fórmula (5.27), o cálculo de C_2 é encontrado fazendo a substituição do C_1 na equação (5.11):

$$C_2 = \frac{(L_{ij}^d M_{ij})(M_{ij} N_{ij}) - (L_{ij}^d N_{ij})(M_{ij} M_{ij})}{(M_{ij} M_{ij})(N_{ij} N_{ij})}.$$

Mesmo que o caso avaliado em Yang *et al.* (2012) tenha sido para um canal, os autores da presente dissertação optaram por testar $M_{ij}M_{ij} \gg M_{ij}N_{ij}$ para o problema da cavidade com o modelo apresentado na seção (5.1.1), e avaliar a influência de tal simplificação para o caso em estudo. Lembrando que M_{ij} é dada pela equação (5.8) e N_{ij} pela equação (5.9).

5.5 Modelo linear dependente dos tensores taxa de deformação e rotação

Ao assumir o tensor de Reynolds submalha dependente do tensor taxa de deformação e taxa de rotação, foi apresentado na seção (2.4), que a forma mais geral que este tensor possui com uma expansão polinomial até segundo grau, é dada por:

$$\tau_{ij}^{d} = \alpha_1 \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{S}_{ij} + \alpha_2 \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{\Omega}_{ij} + \alpha_3 \widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S}_{ik} \widetilde{S}_{kj})^d + \alpha_4 \widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{\Omega}_{ik} \widetilde{\Omega}_{kj})^d + \alpha_5 \widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S}_{ik} \widetilde{\Omega}_{kj} - \widetilde{\Omega}_{ik} \widetilde{S}_{kj}).$$
(5.28)

A equação (5.28) representa o tensor submalha para um caso de turbulência tridimensional geral, que pode possuir anisotropias.

O presente modelo implementado, é uma expansão de primeiro grau do tensor submalha, no qual irá ser analisada a possibilidade de capturas de anisotropia do escoamento, pois com a inclusão do termo $\widetilde{\Omega}_{ij}$ que é anti-simétrico, implica que o tensor $\tau_{ij}^d \neq \tau_{ji}^d$, logo ele não é simétrico, e sua hipótese de isotropia não é mais válida.

Sendo assim, o modelo implementado será:

$$\tau_{ij}^d = \alpha_1 \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{S}_{ij} + \alpha_2 \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{\Omega}_{ij}.$$
(5.29)

Sendo que os coeficientes α_1 e α_2 , de acordo com o que foi apresentado na seção (2.4), são dados por:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} \left[\widetilde{\Omega}_{ij} \widetilde{S}_{ji} + \widetilde{S}_{ij} \widetilde{\Omega}_{ji} + \widetilde{\Omega}_{ij} \widetilde{\Omega}_{ji} - \widetilde{\Omega}_{ii} \widetilde{\Omega}_{ii} - 2(\widetilde{S}_{ii} \widetilde{\Omega}_{jj}) \right].$$
$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \left[\widetilde{\Omega}_{ij} \widetilde{S}_{ji} + \widetilde{S}_{ij} \widetilde{\Omega}_{ji} + \widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ji} - \widetilde{S}_{ii} \widetilde{S}_{ii} - 2(\widetilde{\Omega}_{ii} \widetilde{S}_{jj}) \right].$$

Utilizando as propriedades de simetria e de anti-simetria de \widetilde{S}_{ij} e $\widetilde{\Omega}_{ij}$, temos:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} \left[\widetilde{\Omega}_{ij} \widetilde{\Omega}_{ji} \right].$$
$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \left[\widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ji} \right].$$

Desta forma, o cálculo dos coeficientes é encontrado de forma direta a partir da dedução do Teorema de Cayley-Hamilton para o tensor submalha dependente dos tensores taxa de deformação e rotação.

Como
$$\tau_{ij}^d = -\widetilde{u'_i u'_j}$$
, tem-se:
 $\tau_{ij}^d = -\frac{1}{2} \left[\widetilde{\Omega}_{mn} \widetilde{\Omega}_{nm} \right] \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{2} \left[\widetilde{S}_{mn} \widetilde{S}_{nm} \right] \widetilde{\Delta}^2 \widetilde{\Omega}_{ij}.$
(5.30)

5.6 Modelo não linear dependente do gradiente de velocidade

Novamente com o auxilio do Teorema de Cayley-Hamilton tridimensional, foi proposto pelos autores a representação do tensor de Reynolds submalha como o polinômio mais geral de segundo grau, dependente apenas do gradiente de velocidade, será:

$$\tau_{ij}^{d} = \alpha_1 \widetilde{\Delta}^2 \frac{\widetilde{\partial u_i}}{\partial x_j} + \alpha_2 \widetilde{\Delta}^2 \left(\frac{\widetilde{\partial u_i}}{\partial x_k} \frac{\widetilde{\partial u_k}}{\partial x_j} \right)^d$$

Utilizando-se novamente do fato que $\tau_{ij}^d = -\widetilde{u'_i u'_j}$, e o que por decorrência do teorema de Cayley-Hamilton, o coeficiente $\alpha_1 \propto \left[\frac{\widetilde{\partial u_m}}{\partial x_n}\frac{\widetilde{\partial u_n}}{\partial x_m}\right]$, a equação será da forma:

$$\tau_{ij}^{d} = -C_1 \widetilde{\Delta}^2 \left[\underbrace{\frac{\partial u_m}{\partial x_n}}_{\partial x_m} \underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\partial x_j} - C_2 \widetilde{\Delta}^2 \left(\underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial x_k}}_{\partial x_k} \underbrace{\frac{\partial u_k}{\partial x_j}}_{\partial x_j} \right)^d.$$
(5.31)
Onde,
$$C_1\left[\frac{\widetilde{\partial u_m}}{\partial x_n}\frac{\widetilde{\partial u_n}}{\partial x_m}\right] = \alpha_1 \text{ e } C_2 = \alpha_2.$$

Agora, com o mesmo procedimento utilizado em modelos anteriores, os coeficientes serão calculados com base no tensor de Leonard. Para tal, segue-se que:

O tensor submalha teste será:

$$T_{ij}^{d} = -C_1 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[\underbrace{\overline{\partial u_m}}_{\partial x_n} \underbrace{\partial u_n}_{\partial x_m} \right] \widehat{\overline{\partial u_i}}_{\partial x_j} - C_2 \widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left(\underbrace{\widehat{\partial u_i}}_{\partial x_k} \underbrace{\partial \widetilde{\partial u_k}}_{\partial x_j} \right)^d.$$
(5.32)

Substituindo as equações (5.32) e (5.31) na equação envolvendo o tensor de Leonard (5.17), é obtido:

$$\begin{split} L_{ij} &= -C_1 \widehat{\Delta}^2 \overline{\left[\frac{\partial \widetilde{u}_m}{\partial x_n} \frac{\partial \widetilde{u}_n}{\partial x_m} \right]} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_j} - C_2 \widehat{\Delta}^2 \left(\frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_k}}{\partial x_j} \right)^d + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} + \\ &+ C_1 \widehat{\Delta}^2 \overline{\left[\frac{\partial \widetilde{u}_m}{\partial x_n} \frac{\partial \widetilde{u}_n}{\partial x_m} \right]} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_j} + C_2 \widehat{\Delta}^2 \left(\frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_j} \right)^d - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widehat{\tau_{kk}} \\ &= -C_1 \left(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \overline{\left[\frac{\partial \widetilde{u}_m}{\partial x_n} \frac{\partial \widetilde{u}_n}{\partial x_m} \right]} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_j} - \widehat{\Delta}^2 \overline{\left[\frac{\partial \widetilde{u}_m}{\partial x_n} \frac{\partial \widetilde{u}_n}{\partial x_m} \right]} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_j} - \\ &- C_2 \left(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left(\frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_k}}{\partial x_j} \right)^d - \widehat{\Delta}^2 \left(\frac{\partial \widetilde{\widetilde{u}_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_j} \right)^d \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widehat{\tau_{kk}}, \end{split}$$

$$L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\left(T_{kk} - \widehat{\tau_{kk}}\right) = -C_1\left(\widetilde{\widetilde{\Delta}}^2 \left[\widetilde{\frac{\partial u_m}{\partial x_n}} \widetilde{\frac{\partial u_n}{\partial x_m}}\right] \widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \widetilde{\Delta}^2 \left[\widetilde{\frac{\partial u_m}{\partial x_n}} \widetilde{\frac{\partial u_n}{\partial x_m}}\right] \widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}\right) - \\ -C_2\left(\widetilde{\widetilde{\Delta}}^2 \left(\widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_k}} \widetilde{\frac{\partial u_k}{\partial x_j}}\right)^d - \widetilde{\Delta}^2 \left(\widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_k}} \widetilde{\frac{\partial u_k}{\partial x_j}}\right)^d\right),$$

$$L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk} = -C_1 \left(\widetilde{\widetilde{\Delta}}^2 \left[\underbrace{\widetilde{\partial u_m}}_{\partial x_n} \underbrace{\widetilde{\partial u_n}}_{\partial x_m} \right] \underbrace{\widetilde{\partial u_i}}_{\partial x_j} - \widetilde{\Delta}^2 \left[\underbrace{\widetilde{\partial u_m}}_{\partial x_n} \underbrace{\widetilde{\partial u_n}}_{\partial x_m} \right] \underbrace{\widetilde{\partial u_i}}_{\partial x_j} \right) - \\ -C_2 \left(\widetilde{\widetilde{\Delta}}^2 \left(\underbrace{\widetilde{\partial u_i}}_{\partial x_k} \underbrace{\widetilde{\partial u_k}}_{\partial x_j} \right)^d - \widetilde{\Delta}^2 \left(\underbrace{\widetilde{\partial u_i}}_{\partial x_k} \underbrace{\widetilde{\partial u_k}}_{\partial x_j} \right)^d \right)$$

58

$$\begin{split} L_{ij}^{d} &= \\ &= -C_{1} \left(\widehat{\widetilde{\Delta}}^{2} \left[\underbrace{\widetilde{\partial u_{m}}}_{\partial x_{n}} \underbrace{\widetilde{\partial u_{n}}}_{\partial x_{m}} \right] \widehat{\overline{\partial u_{i}}}_{\partial x_{j}} - \widetilde{\Delta}^{2} \left[\underbrace{\widetilde{\partial u_{m}}}_{\partial x_{n}} \underbrace{\widetilde{\partial u_{n}}}_{\partial x_{m}} \right] \underbrace{\widetilde{\partial u_{i}}}_{\partial x_{j}} \right) - \\ &- C_{2} \left(\widehat{\widetilde{\Delta}}^{2} \left(\underbrace{\widetilde{\widetilde{\partial u_{i}}}}_{\partial x_{k}} \underbrace{\widetilde{\partial u_{k}}}_{\partial x_{j}} \right)^{d} - \widetilde{\Delta}^{2} \left(\underbrace{\widetilde{\widetilde{\partial u_{i}}}}_{\partial x_{k}} \underbrace{\widetilde{\partial u_{k}}}_{\partial x_{j}} \right)^{d} \right), \end{split}$$

$$L_{ij}^d = -C_1 M_{ij} - C_2 N_{ij}. (5.33)$$

Onde,

$$M_{ij} = \left(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 \left[\overline{\frac{\partial u_m}{\partial x_n}} \frac{\partial u_n}{\partial x_m}\right] \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \widetilde{\Delta}^2 \left[\overline{\frac{\partial u_m}{\partial x_n}} \frac{\partial u_n}{\partial x_m}\right] \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}\right).$$
(5.34)

$$N_{ij} = \left(\widetilde{\widetilde{\Delta}}^2 \left(\frac{\widehat{\partial u_i}}{\partial x_k} \widehat{\partial x_j}\right)^d - \widetilde{\Delta}^2 \left(\frac{\widehat{\partial u_i}}{\partial x_k} \widehat{\partial x_j}\right)^d\right).$$
(5.35)

Por fim, os coeficientes serão calculados com base na resolução do sistema composto pelas equações (5.10) e (5.11).

Como resultado, os coeficientes C_1 e C_2 terão o mesmo formato dos encontrados em (5.12) e (5.13), porém com os tensores M_{ij} e N_{ij} apresentados em (5.34) e (5.35), respectivamente.

CAPÍTULO VI

RESULTADOS E DISCUSSÕES

O experimento material escolhido para a verificação dos modelos matemáticos implementados foi o caso clássico da cavidade com a tampa deslizante.

Este problema consiste em uma cavidade cúbica que é preenchida com um fluido newtoniano com propriedades físicas constantes e com temperatura uniforme. A tampa superior desta cavidade desliza com a velocidade constante, sendo que este movimento da tampa causa uma movimentação do fluido.

A relativa facilidade de implementação computacional e a disponibilidade de dados realizados em experimentos materiais, foram os motivos escolhidos para decisão dos autores por este tipo de problema.

Modelos baseados na hipótese de Boussinesq, que descrevem o tensor de Reynolds dependente de forma linear do tensor taxa de deformação, em casos mais simples, apresentam bons resultados para escoamentos com turbulência homogênea e isotrópica, que ocorrem em geometrias sem presença de curvaturas acentuadas, ou gradientes adversos de pressão (POPE, 1975).

Porém, mesmo se tratando de uma geometria simples, a cavidade foi escolhida como ponto de partida para o estudo da modelagem não linear do tensor de Reynolds submalha, pelos fatos já citados anteriormente e por possibilitar uma análise mais detalhada sobre a utilização de modelos não lineares mesmo quando se trata de escoamentos em geometrias simples.

6.1 Uma escolha precisa dos componentes tensoriais

Grande parte do tempo gasto pelos autores com a presente dissertação, foi com a investigação acerca das escolhas dos componentes tensoriais para compor polinômio tensorial que descreve o tensor submalha não linear.

Como sugerido por Pope (1975), a chave para a construção deste tipo de modelo é baseada na aplicação do teorema de Cayley-Hamilton.

Portanto, seguindo as ideias de Spencer e Rivlin (1958), o polinômio mais geral composto por um tensor de segunda ordem que dependa do tensor taxa de rotação e do tensor taxa de deformação é composto por:

$$\mathbf{T}^{(1)} = \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(2)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$$
$$\mathbf{T}^{(3)} = \widetilde{\mathbf{S}}^{2} \qquad \mathbf{T}^{(4)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$
$$\mathbf{T}^{(5)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} \qquad \mathbf{T}^{(6)} = \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}$$
$$\mathbf{T}^{(7)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(8)} = \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}$$
$$\mathbf{T}^{(9)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(10)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$$
$$\mathbf{T}^{(11)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \qquad \mathbf{T}^{(12)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}$$
$$\mathbf{T}^{(13)} = \mathbf{I}$$

Uma boa forma de se visualizar essa expansão do polinômio tensorial, é reagrupando os termos de acordo com o grau do polinômio:

$$n = 0 \qquad I$$

$$n = 1 \qquad \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$$

$$n = 2 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}^{2} \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}} \qquad \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}$$

$$n = 3 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}$$

$$n = 4 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}} \qquad \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} \qquad \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$$

$$n = 5 \qquad \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}$$

Sendo que os componentes destacados em vermelho, $\mathbf{T}^{(2)}$, $\mathbf{T}^{(12)}$ e $\mathbf{T}^{(13)}$ não foram encontrados na literatura pelo autor da dissertação. Onde $\mathbf{T}^{(13)} = \mathbf{I}$ é o tensor identidade dependente dos traços envolvendo os tensores taxa de deformação e rotação, e n representa o grau do polinômio.

Porém, como o tensor de Reynolds é por definição, simétrico, somente componentes tensoriais com esta propriedade devem ser assumidos (POPE, 1975). O que por consequência justifica a eliminação do componente $\mathbf{T}^{(2)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$, que se trata de um tensor antissimétrico.

Portanto, esses componentes tensoriais apresentados, possuem componentes tensoriais a mais do que é apresentado no artigo dos autores Lund e Novikov (1993) e Pope (1975). Outra característica é que os componentes encontrados não aparecem como deviatóricos.

Para solucionar este impasse, foi percebido que a modelagem de τ_{ij}^d dependente do tensor taxa de deformação e do tensor taxa de rotação, deve ser incorporada a ideia de isotropia, que pode ser expressa por um tensor de quarta ordem isotrópico e simétrico nos índices i e j.

Portanto, o tensor isotrópico de quarta ordem (A_{ijkl}) mais geral possível é (BATCHELOR, 2000):

$$A_{ijkl} = \mu_t \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right)$$

Ou seja, quando se aplica esse tensor para a dedução do τ_{ij}^d , juntamente com o teorema de Cayley-Hamilton, temos:

$$\begin{aligned} \tau_{ij}^{d} &= A_{ijkl} \tau_{kl} (\bar{S}_{ij}, \bar{\Omega}_{ij}) \\ &= A_{ijkl} \left(\bar{S}_{kp} \bar{\Omega}_{pn} \frac{\partial \bar{u}_{n}}{\partial x_{l}} + \bar{\Omega}_{kp} \frac{\partial \bar{u}_{p}}{\partial x_{n}} \bar{S}_{nl} + \frac{\partial \bar{u}_{k}}{\partial x_{p}} \bar{S}_{pn} \bar{\Omega}_{nl} + \bar{\Omega}_{kp} \bar{S}_{pn} \frac{\partial \bar{u}_{n}}{\partial x_{l}} + \bar{S}_{kp} \frac{\partial \bar{u}_{p}}{\partial x_{n}} \bar{\Omega}_{nl} + \frac{\partial \bar{u}_{k}}{\partial x_{p}} \bar{\Omega}_{pn} \bar{S}_{nl} \right) \\ &= A_{ijkl} \left(\alpha_{1} \bar{S}_{ij} + \alpha_{2} \bar{\Omega}_{ij} + \alpha_{3} \bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj} + \alpha_{4} \bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{kj} + \alpha_{5} (\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{kj} - \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{kj}) + \alpha_{6} \delta_{ij} \right) \\ &= \alpha_{1} \bar{S}_{ij} + \alpha_{3} (\bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj})^{d} + \alpha_{4} (\bar{\Omega}_{ik} \bar{\Omega}_{kj})^{d} + \alpha_{5} (\bar{S}_{ik} \bar{\Omega}_{kj} - \bar{\Omega}_{ik} \bar{S}_{kj}) \end{aligned}$$

Que é a expansão do polinômio tensorial até grau dois. Esses componentes coincidem com os quatro primeiros termos apresentados em Pope (1975). Para uma expansão até grau 5, temos:

$$\mathbf{T}^{(1)} = \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(2)} = \widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \frac{1}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}^{2})\mathbf{I}$$
$$\mathbf{T}^{(3)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \frac{1}{3}tr(\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2})\mathbf{I} \qquad \mathbf{T}^{(4)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$
$$\mathbf{T}^{(5)} = \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} \qquad \mathbf{T}^{(6)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}} - \frac{2}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2})\mathbf{I}$$
$$\mathbf{T}^{(7)} = \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \frac{2}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2})\mathbf{I} \qquad \mathbf{T}^{(8)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$
$$\mathbf{T}^{(9)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \qquad \mathbf{T}^{(10)} = \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$$
$$\mathbf{T}^{(11)} = \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}$$

Dos 11 componentes encontrados, os 10 primeiros são idênticos ao apresentado em Pope (1975). Os componentes destacados em azul representam justamente os melhores componentes segundo o estudo dos autores Lund e Novikov (1993). Porém, o componente em vermelho, $\mathbf{T}^{(3)}$ não apresenta bons resultados para os casos avaliados.

Já o componente destacado em marrom, $\mathbf{T}^{(11)}$, foi encontrado realizando a expansão completa até quinto grau, e não foi encontrado em nenhum artigo que o autor da dissertação teve acesso.

Desta forma, pode ser visto que basear apenas no teorema de Cayley-Hamilton não é o suficiente para deduzir os componentes da expansão tensorial proposta por Pope (1975). É necessário ainda a inclusão do tensor de quarta ordem isotrópico para a dedução completa dos termos.

6.1.1 A escolha dos componentes tensoriais

A aparente aleatoriedade da escolha dos componentes tensoriais apresentada em artigos que são referências no tema da modelagem não linear do tensor submalha, foi resolvida com uma melhor compreensão sobre o teorema de Cayley-Hamilton.

Como apresentado na seção (2.4), a base para a dedução dos treze componentes tensoriais apresentados na presente seção (6.1), está em substituir $\mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$, na equação (2.5), que é um caso específico do teorema de Cayley Hamilton.

Esta forma apresentada por Pope (1975), abre muitas possibilidades de combinações, sendo que algumas apresentam resultados computacionais com baixa representatividade do escoamento turbulento.

Um dos primeiros autores a testar as melhores combinações dos componentes tensoriais que trazem resultados consistentes para um escoamento turbulento homogêneo e isotrópico, foram Lund e Novikov (1993). Neste artigo foram avaliadas as combinações em duas situações diferentes: (1) A combinação dos componentes tensoriais utilizando o cálculo dos coeficientes de forma variável;(2) A combinação dos componentes tensoriais utilizando o cálculo dos coeficientes de forma constante. Neste estudo foram testadas as combinações com os dois, três, quatro e cinco melhores componentes tensoriais, e posteriormente os dois, três, quatro e cinco piores componentes tensoriais. Esta análise foi feita para o caso do cálculo dos coeficientes de forma constante.

Esta análise realizada pelos autores Lund e Novikov (1993) demonstrou que tanto para o caso dos coeficientes sendo calculados de forma constante ou dinâmica, para o caso das melhores combinações, o tensor $\tilde{\Omega}^2 - \frac{1}{3}tr(\tilde{\Omega}^2)$ I não estava presente. Por outro lado, novamente para os casos dos coeficientes serem calculados de forma dinâmica e constante, as piores combinações sempre estavam presentes o tensor $\tilde{\Omega}^2 - \frac{1}{3}tr(\tilde{\Omega}^2)$ I. Isso parece indicar que a forma mais geral do polinômio tensorial proposto por Pope (1975) não apresenta bons resultados para a expansão deste polinômio até a quarto grau, que foi o caso avaliado no artigo.

Outros autores como Gatski e Speziale (1993), seguindo as ideias de Pope (1975), apresentam os componentes que estão também entre as combinações propostas em Lund e Novikov (1993).

Com base, nas combinações apresentadas em Lund e Novikov (1993), outros modelos importantes foram propostos, como por exemplo, Wang e Bergstrom (2005) e KOSOVIĆ (1997).

Portanto, notando esta aparente aleatoriedade deste polinômio tensorial constituído pelos treze componentes tensoriais apresentados, e respaldado na análise feita por Spencer e Rivlin (1958), foi observada uma forma de obter as melhores combinações tensoriais por meio do Teorema de Cayley-Hamilton.

Como apresentado na seção (2.4), Pope (1975) fez a substituição $\mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}$ na equação (6.1) para encontrar os 10 componentes tensoriais, onde **a** pode ser entendido como o tensor taxa

de deformação e **b** como o tensor taxa de rotação. Assim, **c** pode ser visto como o tensor gradiente de velocidade. Se for incorporada a ideia de isotropia para esse gradiente de velocidade, com o auxílio do tensor de quarta ordem isotrópico, a permutação realizada pelo teorema de Cayley-Hamilton será apenas entre os tensores taxa de deformação e rotação, eliminando a permutação com o gradiente de velocidade. Desta forma, a substituição proposta pelos autores será $\mathbf{c} = \mathbf{a}$ na equação (6.1):

$$abc + bca + cab + bac + acb + cba = (bc + cb) tra + (ab + ba) trc + + (ca + ac) trb + a (trbc - trbtrc) + b (trca - trctra) + c (trab - tratrb) + + l (tratrbtrc - tratrbc - trbtrca - trctrab + trabc + trcab). (6.1)$$

Após realizar a substituição $\mathbf{c} = \mathbf{a}$ na equação (6.1) tem-se como resultado:

$$G(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a}\mathbf{b}\mathbf{a} + \mathbf{a}^{2}\mathbf{b} + \mathbf{b}\mathbf{a}^{2}$$

= $\alpha_{1}\mathbf{a} + \alpha_{2}\mathbf{b} + \alpha_{3}\mathbf{a}^{2} + \alpha_{4}(\mathbf{a}\mathbf{b} + \mathbf{b}\mathbf{a}) + \alpha_{5}\mathbf{I}.$ (6.2)

Onde:

$$\alpha_1 = [tr\mathbf{a}\mathbf{b} - tr\mathbf{a}tr\mathbf{b}].$$
$$\alpha_2 = \frac{1}{2} [tr\mathbf{a}^2 - (tr\mathbf{a})^2].$$

$$\alpha_3 = [tr \mathbf{b}] \,.$$

$$\alpha_4 = [\operatorname{tr} \mathbf{a}].$$

$$\alpha_5 = \left[\mathrm{tr} \mathbf{a}^2 \mathbf{b} - \mathrm{tr} \mathbf{a} \mathrm{tr} \mathbf{a} \mathbf{b} + \frac{1}{2} \mathrm{tr} \mathbf{b} \left((\mathrm{tr} \mathbf{a})^2 - \mathrm{tr} \mathbf{a}^2 \right) \right].$$

Portanto, se $G(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ for escolhido como $\tau_{ij}^d = A_{ijkl}\tau_{kl}(\bar{S}_{ij}, \bar{\Omega}_{ij})$ e multiplicando cada termo por $\widetilde{\Delta}^2$ para se obter a dimensão desejada, temos:

$$\tau_{ij}^{d} = \alpha_1 \widetilde{\Delta}^2 \overline{S}_{ij} + \alpha_3 \widetilde{\Delta}^2 (\overline{S}_{ik} \overline{S}_{kj})^d + \alpha_4 \widetilde{\Delta}^2 (\overline{S}_{ik} \overline{\Omega}_{kj} - \overline{\Omega}_{ik} \overline{S}_{kj}).$$
(6.3)

Sendo que os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_5$ pode ser escolhido da forma desejada, como foram nos casos de todos os modelos anteriores (SERRIN, 1959).

Os termos apresentados na equação (6.3) são exatamente os mesmos componentes tensoriais escolhidos nos artigos, como sendo a melhor representação da expansão do polinômio tensorial até segundo grau, para escoamentos complexos (KOSOVIĆ, 1997),(WANG; BERGSTROM, 2005),(WANG; BERGSTROM, 2005),(SPEZIALE, 1987),(GATSKI; SPEZIALE, 1993),(SONG *et al.*, 2003), (FU; WANG; GUO, 2011) e (SPEZIALE, 1991).

Com base nos procedimentos anteriores e por meio do artigo dos autores Spencer e Rivlin (1958), foi possível fazer uma generalização para representar a forma mais geral deste polinômio tensorial, com uma expansão até quinto grau, que pode ser dada por:

$$\begin{split} \mathbf{T}^{(1)} &= \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(2)} = \widetilde{\mathbf{S}}^2 - \frac{1}{3} tr(\widetilde{\mathbf{S}}^2) \mathbf{I} \\ \mathbf{T}^{(3)} &= \widetilde{\mathbf{S}} \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(4)} = \widetilde{\mathbf{S}}^2 \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \widetilde{\mathbf{S}}^2 \\ \mathbf{T}^{(5)} &= \widetilde{\mathbf{S}}^2 \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 \widetilde{\mathbf{S}}^2 - \frac{2}{3} tr(\widetilde{\mathbf{S}}^2 \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2) \mathbf{I} \qquad \mathbf{T}^{(6)} = \widetilde{\mathbf{S}} \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \widetilde{\mathbf{S}}^2 - \widetilde{\mathbf{S}}^2 \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \widetilde{\mathbf{S}} \\ \mathbf{T}^{(7)} &= \widetilde{\mathbf{S}} \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 \widetilde{\mathbf{S}}^2 - \widetilde{\mathbf{S}}^2 \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^2 \widetilde{\mathbf{S}} \qquad \mathbf{T}^{(0)} = \mathbf{I} \end{split}$$

Novamente, expressando esta expansão em termos do grau do polinômio tensorial, temos:

$$n = 0 \qquad \mathbf{I}$$

$$n = 1 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}$$

$$n = 2 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \frac{1}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}^{2})\mathbf{I} \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$

$$n = 3 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}} - \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2}$$

$$n = 4 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2} + \widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \frac{2}{3}tr(\widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2})\mathbf{I} \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}\widetilde{\mathbf{S}}$$

$$n = 5 \qquad \widetilde{\mathbf{S}}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}^{2} - \widetilde{\mathbf{S}}^{2}\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}^{2}\widetilde{\mathbf{S}}$$

Vale ressaltar, que as quatro melhores combinações possíveis para uma expansão polinomial até terceiro grau, tanto para o cálculo com coeficientes constantes ou com coeficientes variáveis em Lund e Novikov (1993), é constituído exatamente pelas bases $\mathbf{T}^{(0)}, \mathbf{T}^{(1)}, \mathbf{T}^{(2)}, \mathbf{T}^{(3)}$ e $\mathbf{T}^{(4)}$.

6.2 Cavidade com tampa deslizante

A configuração do caso foi estabelecida com o propósito de gerar resultados que possam ser comparados com um experimento material realizado por Prasad e Koseff (1989).

É importante deixar claro, que a expressão "experimento material"empregada ao longo do texto, tem o intuito de representar o experimento feito por meio de instrumentos de medição constituído por estrutura física e palpável. Quando for utilizada a expressão "experimento computacional", o intuito é referir ao experimento realizado por meio de uma simulação realizada no computador.

Portanto, como no experimento material, a configuração do caso foi a mesma para todos os modelos computacionais implementados. Seguindo as seguintes características:

- O domínio computacional é cúbico e tem dimensões: $1m \times 1m \times 1m$;
- A taxa de refinamento utilizada foi de razão 2;
- O número de níveis físicos utilizados foram iguais à 2;
- O número de células no nível mais fino foi: $32 \times 32 \times 32$;
- Não foi utilizado refinamento adaptativo;
- O esquema semi-implícito de discretização temporal utilizado foi o sbdf;
- O esquema de discretização do termo advectivo foi o cubista;
- O caso foi simulado sem condições de periodicidade;
- Foram utilizados 8 processadores, com divisão topológica igual nas três dimensões: (2, 2, 2).

Para representar como é o problema, uma imagem da cavidade com o modelo de S.B. Pope implementado está apresentada na figura (6.1), com o critério de avaliação de iso superfície.



Figura 6.1: Cavidade com tampa deslizante.

6.2.1 Modelo não linear de Hongrui - modificado

Este modelo foi desenvolvido com o intuito de utilizar apenas dois componentes tensoriais do tensor de Reynolds submalha. O propósito de tal simplificação é decorrente da redução do custo computacional em detrimento da utilização de todas as bases que compõe o polinômio. Tendo em vista que os autores (HONGRUI *et al.*, 2000) faz tal simplificação com base no artigo dos autores Lund e Novikov (1993), onde se propõe as duas melhores combinações para o caso do cálculo dos coeficientes ocorrer de forma dinâmica.

$$\tau_{ij}^{d} = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S_{ij}} - 4C_2\widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S_{ik}}\widetilde{\Omega_{kj}} - \widetilde{\Omega_{ik}}\widetilde{S_{kj}}).$$
(6.4)

A modificação deste modelo consiste no fato do modelo original dos autores (HONGRUI *et al.*, 2000), o segundo termo estar multiplicado por $(-4C_2)$, enquanto no original estava $(+C_2)$. Esta simples mudança de um fator multiplicando o o coeficiente C_2 por (-4), possibilitou a convergência dos cálculos computacionais. A forma original do modelo apresentado por (HONGRUI *et al.*, 2000) não estava possibilitando a convergência do método, portanto a simplificação do modelo apresentado em (WANG; BERGSTROM, 2005) foi adotada. O cálculo do C_1 e C_2 de forma dinâmica, foi detalhado na seção (5.1).

Com isso, foram plotados os gráficos da velocidade média nas direções x e y na figura (6.2). As medidas foram feitas no plano de simetria da cavidade, com o corte no sentido do movimento da tampa deslizante. Os valores encontrados com o modelo, foi comparado com dados de experimento material já citado anteriormente.



Figura 6.2: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Modelo de Hongrui modificado.

Podemos observar quantitativamente pela figura (6.2a), que a velocidade média na direção x tem uma boa aderência nas paredes da cavidade quando comparado com os dados do experimento material. Já nas regiões adjacentes à parede da cavidade a diferença entre o experimento material e computacional começa a se acentuar. Quando se observa o centro da cavidade pode ser notada um reaproximação entre os resultados materiais e computacionais.

Pela figura (6.2b), uma análise análoga à figura (6.2a) pode ser feita.

Também foram plotados gráficos para avaliar a raiz da velocidade quadrática média - RMS (root mean square), nas direções x e y, na figura (6.3). Sendo que o resultado foi multiplicado por 10 para fazer a comparação com a mesma medida apresentada em Prasad e Koseff (1989).



Figura 6.3: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Modelo de Hongrui modificado.

Observando a figura (6.3a), é notado que o perfil plotado no cálculo RMS na direção x consegue captar alguns dos dados experimentais próximo à parede, mas no centro da cavidade a captura fica menos realista do que no caso da comparação realizada com os cálculos da velocidade média em x.

Já pela figura (6.3b), a comparação do RMS computacional com o experimento material próximo à parede da direita foi satisfatória, mas no centro da cavidade a aproximação entre os dois resultados se diferem mais acentuadamente.

6.2.2 Comparação do modelo de Hongrui com Germano

O modelo clássico dos autores Germano *et al.* (1991), que já tem implementado e validado no código MFSim, também foi utilizado para servir como comparação com o experimento material e com os atuais modelos não lineares implementados. Isso será feito para analisar qualitativamente onde o modelo linear e não linear oferecem vantagens para o caso do escoamento na cavidade com tampa deslizante.

Outro motivo para tal comparação com o modelo de Germano, é que o experimento material também carrega erros de medição, e que portanto, a pura comparação dos modelos tendo como base o experimento material tem que ser cautelosa, pois medições de propriedades do campo turbulento são muito complexas.

Tendo a concepção da confiabilidade trazida pela Simulação Numérica Direta (DNS), o

ideal seria uma comparação dos resultados obtidos por meio de DNS com os modelos implementados na dissertação com a metodologia da Simulação das Grandes Escalas (LES). Como não foram encontrados resultados dos campos de pressão e velocidade da cavidade para DNS, a comparação com um caso canônico como é o caso da cavidade com o modelo clássico de Germano, foi julgada como adequada.

Após ser feita esta interpretação, foi simulado o caso da cavidade com as mesmas configurações citadas acima, utilizando como modelo de fechamento da turbulência o modelo linear de Germano *et al.* (1991), na figuras (6.4) e (6.5).



Figura 6.4: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Velocidade média em x.

Por meio da comparação entre as figuras (6.4a) e (6.4b), que indicam a velocidade média na direção x, utilizando os modelos de turbulência de Germano e Hongrui, respectivamente, é notado que o modelo de Germano tem um boa aproximação com os resultados experimentais ao longo de todo o domínio computacional, porém, a adequação entre os resultados do experimento material com o computacional se mostra mais eficiente no modelo não linear quando se trata das regiões próximas às paredes. Em contrapartida, esta aproximação se apresenta melhor no modelo linear quando se avalia o centro da cavidade, do que no modelo não linear.

Quando se avalia os resultados do RMS na direção x, os modelos de Germano e Hongrui, são apresentados na figura (6.5).



Figura 6.5: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção x.

Pela comparação entre as figuras (6.5a) e (6.5b), novamente segue o padrão de uma melhor aproximação dos resultados do experimento material relativas à região de análise. O modelo linear aparenta ter uma melhora quando se avalia a região central da cavidade. E nas regiões próximas às paredes os modelos não lineares conseguem capturar mais valores que são encontrados no experimento material.

A comparação das velocidades médias entre os dois modelos na direção y pode ser constatada na figura (6.6). Pode-se notar novamente que a o modelo linear fica mais próximo dos resultados do experimento material na região central da cavidade. Já no modelo não linear, ocorre uma melhor aproximação com os valores do experimento material nas proximidades da parede da cavidade.



(a) Modelo de Germano.

(b) Modelo de Hongrui.

Figura 6.6: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - Velocidade média em y.

O RMS na direção y também segue a mesma tendência das análises feitas anteriormente. Como pode ser visto pela figura (6.7).



Figura 6.7: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y.

6.2.3 Modelo não linear de S. B. Pope

No livro do Pope (2001), o autor propõe a construção de um modelo utilizando exatamente as três bases que constituem a expansão do polinômio tensorial até segundo grau, que foi mostrado na equação (??). Porém, ele apresenta que o coeficiente $C_3 = -2C_2$. O que resulta em:

$$\tau_{ij}^{d} = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S_{ij}} - 2C_2\widetilde{\Delta}^2 \left[(\widetilde{S_{ik}}\widetilde{\Omega_{kj}} - \widetilde{\Omega_{ik}}\widetilde{S_{kj}}) - 2(\widetilde{S_{ik}}\widetilde{S_{kj}})^d \right].$$
(6.5)

Os resultados para os perfis de velocidade média para o modelo não linear foram já comparados lado a lado com os perfis de velocidade média do modelo de Germano:



Figura 6.8: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y.

Pode ser observado quantitativamente que a diferença entre os perfis de velocidade para os dois modelos na figura (6.8) são pequenas.

Comparando o comportamento dos gráficos dos valores para as velocidades RMS nas direções x e y, tem-se:



Figura 6.9: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y.

Por meio da comparação das figuras (6.9a) e (6.9b) o modelo linear teve uma melhora aparente no centro do canal. Nas proximidades às paredes, o modelo não linear votou a apresentar melhores resultados.

Para as velocidades RMS nas direções x e y, nas figuras (6.9c) e (6.9d) os resultados ficaram bem semelhantes, porém, com uma aproximação um pouco melhor na parede esquerda com o modelo linear, e uma pequena melhora na aproximação com os resultados do experimento material com a parede direita, no modelo não linear.

6.2.4 Modelos de Serrin

Como apresentado na seção (5.3), o modelo não linear de Serrin (1959), propõe o tensor de Reynolds submalha como função apenas do tensor taxa de deformação:

$$\tau_{ij}^d = \tau_{ij}^d(S_{mn}).$$

Por meio da aplicação do teorema de Cayley-Hamilton, temos:

$$G(\mathbf{a}) = \alpha_1 \mathbf{I} + \alpha_2 \mathbf{a} + \alpha_3 \mathbf{a}^2.$$
(6.6)

Ou seja, a expansão polinomial do tensor submalha mais geral até segundo grau, dependente apenas do tensor taxa de deformação, pode ser encontrada substituindo **a** por S_{ij} na equação (6.6). Lembrando que $\alpha_1 \mathbf{I} = \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}$ e $G(\mathbf{a}) = \tau_{ij}$. Assim:

$$\tau_{ij}^d = -C_1 \widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}| \widetilde{S_{ij}} - C_2 \widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S_{ik}} \widetilde{S_{kj}})^d.$$
(6.7)

Os perfis de velocidade média turbulenta nas direções x e y são apresentados na figura (6.10). Pode ser constatado que o modelo linear e não linear não apresentam diferenças significativas nos perfis de velocidades.



Figura 6.10: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades médias nas direções x e y.

Quando se trata das velocidades médias quadráticas comparando o modelo linear de Germano com o modelo não linear de Serrin, os valores encontrados são apresentados na figura (6.11).



Figura 6.11: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades RMS nas direções x e y.

A piora dos dados obtidos para as velocidades RMS no caso não linear, indica que a dependência do tensor submalha dependente apenas do tensor taxa de deformação, é mais bem representado por uma relação linear do que quadrática.

6.2.5 Modelo de Hongrui com coeficiente simplificado

A fim de diminuir o custo computacional e investigar a influência dos coeficientes nos modelos não lineares, foi proposta uma forma de calcular os coeficientes impondo uma simplificação no modelo não linear de Hongrui modificado:

$$\tau_{ij}^d = -2C_1\widetilde{\Delta}^2 |\widetilde{S}|\widetilde{S_{ij}} - 4C_2\widetilde{\Delta}^2 (\widetilde{S_{ik}}\widetilde{\Omega_{kj}} - \widetilde{\Omega_{ik}}\widetilde{S_{kj}}).$$
(6.8)

Como já foi apresentado nas seções anteriores, tem-se que o tensor de Leonard para a equação (6.8) é dado por:

$$L_{ij}^d = -C_1 M_{ij} - C_2 N_{ij}. ag{6.9}$$

Onde

$$M_{ij} = 2(\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \widetilde{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}}).$$
(6.10)

$$N_{ij} = 4 \left[\widehat{\widetilde{\Delta}}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) - \widetilde{\Delta}^2 (\widehat{\widetilde{S}_{ik}} \widehat{\widehat{\Omega}_{kj}} - \widehat{\widetilde{\Omega}_{ik}} \widehat{\widetilde{S}_{kj}}) \right].$$
(6.11)

Quando se realiza a contração da a equação (6.9), multiplicando por M_{ij} , o resultado será:

$$L_{ij}^{d}M_{ij} = -C_1 M_{ij} M_{ij} - C_2 N_{ij} M_{ij}.$$
(6.12)

Foi apresentado no artigo do Yang *et al.* (2012) uma demonstração por meio de dados experimentais obtidos com simulação DNS, que $M_{ij}M_{ij} \gg N_{ij}M_{ij}$, e que portanto para o cálculo de C_1 seria razoável supor que a equação (6.9) pode ser escrita como:

$$L_{ij}^d M_{ij} = -C_1 M_{ij} M_{ij}.$$

Ou seja,

$$C_1 = -\frac{L_{ij}^d M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}}.$$
(6.13)

Após calcular o C_1 pela fórmula (6.13), o cálculo de C_2 é obtido pela substituição do C_1 na equação (6.12):

$$C_2 = \frac{(L_{ij}^d M_{ij})(M_{ij} N_{ij}) - (L_{ij}^d N_{ij})(M_{ij} M_{ij})}{(M_{ij} M_{ij})(N_{ij} N_{ij})}.$$
(6.14)

Agora será apresentada uma comparação entre o modelo não linear com os coeficientes apresentados nas equações (6.13) e (6.14), com o modelo linear de Germano.

Os perfis de velocidade média nas direções x e y, são apresentados na figura (6.12).



Figura 6.12: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y.

O cálculos das velocidades quadráticas médias (RMS) nas direções x e y é mostrado na figura (6.13).



Figura 6.13: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - RMS na direção y.

Esta simplificação no cálculo dos coeficientes demonstrou que os perfis de velocidade média nas direções x e y praticamente não apresenta diferenças entre os gráficos esboçados na figura (6.12). Ou seja, o modelo linear apresenta resultados muito próximos ao não linear quando é feita a simplificação do coeficiente C_1 , para o cálculo das velocidades médias.

Todavia, as diferenças entre as velocidades quadráticas médias entre o modelo linear e o modelo não linear com o coeficiente C_1 simplificado, figura (6.13), apresenta diferenças mais significativas quando se compara às diferenças encontradas nas velocidades médias, onde ponde ser notado que segue a tendência de apresentar resultados melhores com os modelos lineares no centro da cavidade, e resultados melhores com o modelo não linear, nas paredes da cavidade.

6.2.6 Modelo linear dependente de S_{ij} e Ω_{ij} .

Com o propósito de investigar a natureza da simetria do tensor submalha, e sua relação dependente com os tensores taxa de deformação e rotação na expansão do polinômio tensorial, foi proposto avaliar o tensor submalha sem impor as restrições de que cada componente do polinômio tem que ser simétrico (POPE, 1975).

Portanto a aplicação direta do teorema de Cayley-Hamilton, fornece de forma exata a seguinte expressão, que foi deduzida na seção (5.5):

$$\tau_{ij}^{d} = -\frac{1}{2} \left[\widetilde{\Omega}_{mn} \widetilde{\Omega}_{nm} \right] \widetilde{\Delta}^{2} \widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{2} \left[\widetilde{S}_{mn} \widetilde{S}_{nm} \right] \widetilde{\Delta}^{2} \widetilde{\Omega}_{ij}.$$
(6.15)

Os gráficos para os perfis de velocidade média estão apresentados na figura (6.14d).



Figura 6.14: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades médias nas direções x e y.

Pode ser observado pela figura (6.14), que a inclusão do tensor taxa de rotação não

melhorou e nem piorou a descrição dos campos de velocidade média na direção y. Já na direção x, teve uma pequena melhora na aproximação com os resultados do experimento material.

A análise das velocidades quadráticas médias nas direções x e y são apresentadas na figura (6.15).



Figura 6.15: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades RMS nas direções x e y.

Pela figura (6.15b), pode ser notado que o modelo que inclui o tensor taxa de rotação possui uma curva com tendência mais próxima de captar os dados do experimento material do que o modelo de Germano.

Com a figura (6.15d), acaba conseguindo também captar pontos a mais do que o modelo de Germano, apesar de um ponto no centro da cavidade destoar do comportamento padrão.

6.2.7 Modelo não linear dependente do gradiente de velocidade

Novamente com a aplicação do teorema de Cayley-Hamilton, ao supor o tensor submalha dependente diretamente do tensor gradiente de velocidade, tem-se:

$$\tau_{ij}^{d} = \alpha_1 \widetilde{\Delta}^2 \frac{\widetilde{\partial u_i}}{\partial x_j} + \alpha_2 \widetilde{\Delta}^2 \left(\frac{\widetilde{\partial u_i}}{\partial x_k} \frac{\widetilde{\partial u_k}}{\partial x_j} \right)^d$$

Como o gradiente da velocidade é composto pelo tensor taxa de deformação e o tensor taxa de rotação, este modelo, que foi deduzido na seção (5.6), foi proposto pelos autores com a intenção de simplificar a quantidade de coeficientes dos modelos tradicionais e ao mesmo tempo representar todos os cinco primeiros termos da expansão do polinômio tensorial encontrado quando supõe o tensor submalha dependente dos tensores taxa de deformação e rotação. Com isso, o modelo que antes necessitaria do cálculo de cinco coeficientes e e cinco componentes tensoriais, se resume ao cálculo de dois coeficientes e dois componentes tensoriais.

Outro propósito para a criação deste modelo foi para investigar a natureza simétrica do tensor de Reynolds submalha, e consequentemente analisar a simplificação que o S. B. Pope fez, ao retirar o termo assimétrico do polinômio tensorial.

Caso a eliminação do tensor taxa de rotação for devida à simetria, e consequentemente o gradiente de velocidade ser igual ao gradiente transposto da velocidade, isso significaria que o tensor submalha dependente apenas do gradiente de velocidade tem que ser análogo ao tensor submalha dependente apenas do tensor taxa de deformação.

A apresentação para os resultados da velocidades médias nas direções x e y, e as velocidades quadráticas médias nas direções x e y, estão apresentadas na figura (6.16)



(c) Modelo de Germano.



Figura 6.16: Escoamento em uma cavidade com tampa deslizante - velocidades RMS nas direções x e y.

Qualitativamente pode ser observado que quando comparado com o modelo de Serrin, o modelo baseado no gradiente de velocidade tem diferenças significativas na velocidade média na direção y, e nas velocidades quadráticas médias nas direções x e y.

Assim, ao final desse capítulo, percebe-se que, para os modelos explorados, e, para o problema estudado, cavidade retangular com tampa deslizante, foi possível identificar vantagens das modelagens não lineares sobre a modelagem linear apenas para as regiões próximas às paredes. Isso se deve, possivelmente, ao fato que os escoamentos nas proximidades de paredes são mais anisotrópicos que no núcleo turbulento. Fica a pergunta não respondida ainda no presente trabalho de mestrado: esses modelos submalha não lineares apresentarão vantagens sobre os modelos submalha lineares, quando aplicados a problemas físicos caracterizados por fortes anisotropias, gradientes de pressão adversos e efeitos de curvatura? Essa questão deve ser respondida, em outros trabalhos de pós graduação, na sequencia da presente dissertação de mestrado.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Foi importante a dedução e a aplicação do Teorema de Cayley-Hamilton para compreensão da formulação e desenvolvimento dos modelos não lineares para o fechamento da modelagem da turbulência. Sem passar por essa etapa, a escolha dos componentes do polinômio tensorial que constitui o tensor submalha ficava obscura e com aparente aleatoriedade. A partir da compreensão deste teorema foi possível realizar uma escolha precisa dos componentes tensoriais do modelo não linear, respeitando a expansão do polinômio que constitui o modelo.

Após a passagem da etapa citada acima, houve meios de avaliar com mais rigor matemático as limitações de cada modelo apresentado na literatura.

A percepção de uma nova forma de deduzir os componentes tensoriais a partir do teorema de Cayley-Hamilton, que possibilita aparecer exatamente as melhores combinações apresentadas no artigo do Lund e Novikov (1993), foi uma maneira de superar a aparente aleatoriedade da escolha destes componentes. A compreensão deste método possibilitou enxergar a construção dos modelos não lineares por uma perspectiva mais lógica e coerente.

Para a utilização dos coeficientes da forma que foi proposta, os modelos não lineares implementados apresentaram uma tendência em captar melhor os resultados experimentais nas regiões próximas às paredes da cavidade, mas em contrapartida, apresentaram desempenho inferior ao modelo linear de Germano quando avaliado na região central da cavidade. Tal comportamento é devido os componente não lineares do tensor submalha serem capazes de captar as tensões normais, enquanto o componente linear é capaz de captar as tensões cisalhantes (POPE, 1975). Mesmo quando foram incorporados mais termos não lineares no tensor submalha, não ocorreu uma melhora significativa em relação ao modelo linear, quando comparado com os resultados obtidos com o experimento material, indicando que o comportamento do escoamento turbulento na cavidade tem uma tendência a um comportamento linear ao invés de um comportamento não linear, em relação às grandezas dependentes do tensor submalha.

A forma como se calcula os coeficientes é muito importante, pois como já apresentado em Lund e Novikov (1993), a correlação entre os coeficientes é muito maior quando eles são calculados de forma dinâmica. Outra importante questão é a sensibilidade dos coeficientes, pois pequenas alterações na forma de serem calculados ou em fatores que os multiplicam, pode ser suficiente para fazer divergir os cálculos para a obtenção do tensor submalha.

Quando foi feita a simplificação do cálculo do primeiro coeficiente do modelo de Hongruimodificado, pode-se concluir que utilizar este coeficiente como se fosse o de Germano, acarretou em uma melhora dos resultados do modelo não linear na região central da cavidade. Isso sugere que o termo linear do tensor submalha tem característica de captar melhor esta região, que é uma região cisalhante.

O fato da dedução completa da forma mais geral que o tensor submalha pode assumir quando depende do tensor taxa de deformação e do tensor taxa de rotação, com base no Teorema de Cayley-Hamilton, expôs a ausência do tensor taxa de rotação na dedução apresentada por Pope (1975). Tal ausência foi justificada pela incorporação do tensor de quarta ordem isotrópico na dedução dos modelos não lineares. Todavia, a implementação de dois modelos não considerando a simetria do tensor submalha foram propostos para avaliar as consequências de tal simplificação adotada por Pope (1975).

Dois modelos foram criado com o propósito de avaliar a natureza não simétrica do tensor submalha.

O primeiro modelo proposto para a análise levantada anteriormente foi de acordo com a expansão polinomial de primeiro grau do tensor submalha dependente dos tensores taxa de deformação e rotação. Este modelo se caracteriza como um modelo linear, porém, dependente de duas variáveis.

Os cálculos dos campos de velocidade média nas direções x e y tiveram uma pequena melhora na aproximação com os dados experimentais, em relação ao modelo linear de Germano.

No cálculo das velocidades RMS, na direção x, a curva da velocidade do modelo proposto em que o tensor submalha depende dos tensores taxa de deformação e rotação, teve o melhor comportamento entre todos os modelos implementados, incluindo o modelo linear de Germano. A velocidade RMS na direção y também obteve melhoras.

O segundo modelo desenvolvido durante a dissertação, foi um modelo no qual o tensor submalha dependesse apenas do gradiente de velocidade, e foi feita uma expansão do polinômio até segundo grau. Esse modelo, assim como o de grau um dependente dos tensores taxa de deformação e rotação, não foi incorporado na sua dedução o tensor de quarta ordem isotrópico. A sua expansão até grau dois piorou os resultados de forma geral, indicando que o caso da cavidade é melhor representado por um caso linear do que não linear para as circunstâncias avaliadas.

Como o problema da cavidade com tampa deslizante não apresenta fortes anisotropias, gradientes adversos de pressão e curvaturas acentuadas nas linhas de corrente, os modelos não lineares, como já era relatado na literatura, não apresenta ganhos significativos para este tipo de problema, que aparentou ter de forma geral, um comportamento mais linear, mesmo para o caso do tensor submalha dependente dos tensores taxa de deformação e rotação.

Como trabalho futuro, pretende-se avaliar novos modelos não lineares com malha mais refinada, inclusive utilizando outras metodologias e classes de modelos não lineares para o fechamento da turbulência. Além de continuar com a investigação da aplicação destes modelos para casos que não são de turbulência homogênea e isotrópica, e casos com geometrias complexas caracterizadas por fortes anisotropias no escoamento. A expectativa é de que os modelos não lineares para casos com fortes anisotropias captem melhor as informações do escoamento turbulento, em comparação aos modelos de turbulência baseados na hipótese de Boussinesq.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALFONSI, G. Reynolds-averaged navier–stokes equations for turbulence modeling. *Applied Mechanics Reviews*, American Society of Mechanical Engineers, v. 62, n. 4, p. 040802, 2009. Disponível em: https://doi.org/10.1115/1.3124648>.

ALVES, M.; OLIVEIRA, P.; PINHO, F. A convergent and universally bounded interpolation scheme for the treatment of advection. *International journal for numerical methods in fluids*, Wiley Online Library, v. 41, n. 1, p. 47–75, 2003. Disponível em: https://doi.org/10.1002/fld.428>.

ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical methods for physicists*. AAPT, 1999. Disponível em: https://doi.org/10.1016/B978-0-12-059815-1.50004-9.

BATCHELOR, G. K. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press, 2000. Disponível em: https://doi.org/10.1017/CBO9780511800955>.

BRADSHAW, P. *Effects of streamline curvature on turbulent flow.* [S.I.], 1973. Disponível em: https://doi.org/10.1017/S0022112079000380>.

CHAMPAGNE, F.; HARRIS, V.; CORRSIN, S. Experiments on nearly homogeneous turbulent shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 41, n. 1, p. 81–139, 1970. Disponível em: https://doi.org/10.1017/S0022112070000538.

DAMASCENO, M. M. R. Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. Disponível em: http://dx.doi.org/10.14393/ufu.te.2018.771>.

DAVIDSON, L. Fluid mechanics, turbulent flow and turbulence modeling. *Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden (Nov 2011)*, 2011.

DAVIDSON, P. *Turbulence: an introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press, USA, 2015. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.2138427>.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer Science & Business Media, 2012. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=1D3EQgAACAAJ.

FRÖHLICH, J.; RODI, W. Introduction to large eddy simulation of turbulent flows. *Closure strategies for turbulent and transitional flows*, Cambridge University Press, Cambridge, v. 1, n. 8, p. 197–224, 2002. Disponível em: https://doi.org/10.1017/CBO9780511755385>.

FU, S.; WANG, C.; GUO, Y. On the minimal representation of non-linear eddy-viscosity models. *Journal of Turbulence*, Taylor & Francis, n. 12, p. N47, 2011. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1080/14685248.2011.633085>.

GATSKI, T.; RUMSEY, C. Linear and nonlinear eddy viscosity models. *Closure strategies for turbulent and transitional flows*, Cambridge University Press Cambridge, p. 9–46, 2002. Disponível em: https://doi.org/10.1017/CB09780511755385.003.

GATSKI, T. B.; SPEZIALE, C. G. On explicit algebraic stress models for complex turbulent flows. *Journal of fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 254, p. 59–78, 1993. Disponível em: https://doi.org/10.1017/S0022112093002034>.

GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 3, n. 7, p. 1760–1765, 1991. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.857955>.

HONGRUI, G.; SHIYI, C.; GUOWEI, H.; NIANZHEN, C. A second-order dynamic subgrid-scale stress model. *Applied Mathematics and Mechanics*, Springer, v. 21, n. 2, p. 165–172, 2000. Disponível em: https://doi.org/10.1007/BF02458516>.

KOSOVIĆ, B. Subgrid-scale modelling for the large-eddy simulation of high-reynolds-number boundary layers. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 336, p. 151–182, 1997. Disponível em: <10.1017/S0022112096004697>.

LAMB, H. *Hydrodynamics*. [S.I.]: Cambridge university press, 1932.

LANDAU, L. D.; LIFSHITS, E. M. *Fluid mechanics, by LD Landau and EM Lifshitz*. [S.I.]: Pergamon Press, 1959.

LESIEUR, M. *Turbulence in Fluids.* 4. ed. Dordrecht, NL: Springer, 2008. v. 84. 563 p. (Fluid Mechanics and its Applications, v. 84). ISBN 978-1-4020-6435-7.

LILLY, D. K. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 4, n. 3, p. 633–635, 1992. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.858280>.

LUMLEY, J. L. Whither turbulence? turbulence at the crossroads. In: *Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads*. [s.n.], 1990. v. 357. Disponível em: https://doi.org/10.1017/S0022112092233589>.

LUND, T. S.; NOVIKOV, E. Parameterization of subgrid-scale stress by the velocity gradient tensor. 1993. Disponível em: http://adsabs.harvard.edu/abs/1993arb.nasa...27L.

MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. [S.I.]: Grupo Gen-LTC, 2017.

MCCORMICK, S. F. Multigrid methods. [S.I.]: SIAM, 1987.

MOIN, P.; MAHESH, K. Direct numerical simulation: a tool in turbulence research. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 30, n. 1, p. 539–578, 1998. Disponível em: https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.539>.

ORSZAG, S. A.; PATTERSON JR, G. Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Physical Review Letters*, APS, v. 28, n. 2, p. 76, 1972. Disponível em: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.28.76>.

PIOMELLI, U. High reynolds number calculations using the dynamic subgrid-scale stress model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 5, n. 6, p. 1484–1490, 1993. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.858586>.

PIOMELLI, U.; LIU, J. Large-eddy simulation of rotating channel flows using a localized dynamic model. *Physics of fluids*, AIP, v. 7, n. 4, p. 839–848, 1995. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.868607>.

POINSOT, T.; VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. [S.I.]: RT Edwards, Inc., 2005.

POPE, S. A more general effective-viscosity hypothesis. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 72, n. 2, p. 331–340, 1975. Disponível em: https://doi.org/10.1017/S0022112075003382>.

POPE, S. B. *Turbulent flows*. IOP Publishing, 2001. Disponível em: https://doi.org/10.1017/CB09780511840531>.

PRASAD, A. K.; KOSEFF, J. R. Reynolds number and end-wall effects on a lid-driven cavity flow. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 1, n. 2, p. 208–218, 1989. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.857491.

RODI, W.; FERZIGER, J.; BREUER, M.; POURQUIE, M. Status of large eddy simulation: results of a workshop. *Transactions-American Society of Mechanical Engineers Journal of Fluids Engineering*, AMERICAN SOCIETY MECHANICAL ENGINEERS, v. 119, p. 248–262, 1997. Disponível em: https://doi.10.1115/1.2819128>.

RUNCHAL, A.; SPALDING, D. Steady turbulent flow and heat transfer downstream of a sudden enlargement in a pipe of circular cross-section. *Wärme-und Stoffübertragung*, Springer, v. 5, n. 1, p. 31–38, 1972. Disponível em: https://doi.org/10.1007/BF01000476>.

SERRIN, J. Mathematical principles of classical fluid mechanics. In: *Fluid Dynamics I/S-trömungsmechanik I.* Springer, 1959. p. 125–263. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-3-642-45914-6_2.

SILVEIRA-NETO, A. Simulation numérique des grandes échelles d'un écoulement turbulent décollé en aval d'une marche. Tese (Doutorado) — Grenoble INPG, 1991.

SILVEIRA-NETO, A. *TurbulÃ*^a*ncia nos Fluidos*. [S.I.]: Universidade Federal de Uberlândia, BR, 2017.

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. *Monthly weather review*, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963. Disponível em: <a href="https://doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091<0099">https://doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2>.

SONG, F.; YANG, G.; WEIQI, Q.; CHEN, W. Recent progress in nonlinear eddy-viscosity turbulence modeling. *Acta Mechanica Sinica*, Springer, v. 19, n. 5, p. 409–419, 2003. Disponível em: https://doi.org/10.1007/BF02484575>. SPENCER, A. J. M.; RIVLIN, R. S. The theory of matrix polynomials and its application to the mechanics of isotropic continua. *Archive for rational mechanics and analysis*, Springer, v. 2, n. 1, p. 309–336, 1958. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-1-4612-2416-7_67.

SPEZIALE, C. G. On nonlinear kl and k- ε models of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 178, p. 459–475, 1987. Disponível em: https://doi.org/10.1017/S0022112087001319.

SPEZIALE, C. G. Analytical methods for the development of reynolds-stress closures in turbulence. *Annual review of fluid mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 23, n. 1, p. 107–157, 1991. Disponível em: https://doi.org/10.1146/annurev.fl.23.010191.000543>.

VILLAR, M. M. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais. Universidade Federal de Uberlândia, 2007. Disponível em: https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/14664>.

WANG, B.-C.; BERGSTROM, D. J. A dynamic nonlinear subgrid-scale stress model. *Physics of Fluids*, AIP, v. 17, n. 3, p. 035109, 2005. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.1858511.

XIE, Z. A two-phase flow model for three-dimensional breaking waves over complex topography. *Proc. R. Soc. A*, The Royal Society, v. 471, n. 2180, p. 20150101, 2015. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1098/rspa.2015.0101>.

YANG, Z.; CUI, G.; ZHANG, Z.; XU, C. A modified nonlinear sub-grid scale model for large eddy simulation with application to rotating turbulent channel flows. *Physics of Fluids*, AIP, v. 24, n. 7, p. 075113, 2012. Disponível em: https://doi.org/10.1063/1.4739063>.