

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**EFEITO DA MODELAGEM SUBMALHA EM SIMULAÇÕES DE  
GRANDES ESCALAS DE JATOS COAXIAIS TURBULENTOS**

**TESE DE DOUTORADO**

**JEAN MONTEIRO DE PINHO**

**PORTO ALEGRE, RS  
2020**



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

## **EFEITO DA MODELAGEM SUBMALHA EM SIMULAÇÕES DE GRANDES ESCALAS DE JATOS COAXIAIS TURBULENTOS**

**JEAN MONTEIRO DE PINHO**

Tese de Doutorado apresentado como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

**Orientador:**  
**Prof. Dr. André Rodrigues Muniz**

**PORTO ALEGRE, RS**  
**2020**

Pinho, Jean M.

Efeito da Modelagem Submalha em Simulações de  
Grandes Escalas de Jatos Coaxiais Turbulentos / Jean  
Monteiro de Pinho. -- 2020.

190 f.

Orientador: André Rodrigues Muniz

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Rio  
Grande do Sul, Escola de Engenharia, Departamento de  
Engenharia Química, Porto Alegre, BR-RS, 2020.

Modelagem Submalha, LES, OpenMP, GPU, Dinâmica dos  
Fluidos Computacional, Turbulência. I. Muniz, André R.,  
orient. II. Título.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Tese *Efeito da Modelagem Submalha em Simulações de Grandes Escalas de Jatos Coaxiais Turbulentos*, elaborada por Jean Monteiro de Pinho como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Química.

Comissão Examinadora:

---

Prof. , Dr. Argimiro Resende Secchi - COPPE/UFRJ

---

Profa. , Dra. Flávia Schwarz Franceschini Zinani - UNISINOS

---

Prof. , Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo - DEQUI/UFRGS



# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a minha esposa Liliana e filha Isabella pelo amor e apoio durante a realização deste trabalho, sem os quais não seria possível sua realização. Agradeço aos meus pais e meus irmãos pelo carinho, tolerância pela ausência ao longo deste período. Agradeço aos amigos Sandra Barcelos e Jorge Cunha que foram um porto seguro ao longo dos últimos anos.

Agradeço o Prof. André Rodrigues Muniz, orientador e amigo, que sempre soube definir e exercer muito bem os dois papéis e me mantendo motivado e sem desviar o rumo a ser seguido. Obrigado pela paciência e coragem em ter aceitado o desafio em orientar este trabalho. Ao amigo e colega Augusto Mohr Christmann que muito me ajudou quando eu estava distante de Porto Alegre e aos demais colegas do Napsig. É importante também o registro de agradecimento aos amigos e companheiros de doutorado Felipe Crivellaro Minuzzi e Fábio Ronei Rodrigues Padilha pelas longas conversas e discussões ao longo do doutorado.

Sou grato também ao Instituto Federal de Santa Catarina (IFSC) pela afastamento concedido para a realização deste trabalho e aos amigos e colegas de trabalho pela paciência. Ao Laboratório Nacional de Computação Científica (SDumont supercomputer, LNCC/MCTI, Brasil) e ao Centro Nacional de Supercomputação (CESUP/UFRGS) pelos recursos computacionais.



# Resumo

A simulação acurada de escoamentos turbulentos de interesse prático, com custo computacional acessível, ainda é um grande desafio. Simulações de Grandes Escalas (SGE) (*Large Eddy Simulation - LES*) é uma técnica eficiente baseada na eliminação das escalas do escoamento menores do que um comprimento característico e na resolução direta do escoamento nas maiores escalas. Para a descrição do efeito da turbulência nas pequenas escalas, existe uma variedade de modelos submalha disponíveis na literatura, com diferentes níveis de complexidade e custo computacional associados. Embora muitos avanços tenham sido logrados desde o desenvolvimento da técnica LES, não há ainda consenso sobre um modelo submalha definitivo para uso genérico em aplicações de engenharia. A análise do desempenho dos modelos existentes é uma etapa importante no desenvolvimento de novos códigos para LES e sua aplicação em problemas de interesse. Neste sentido, o objetivo principal desta tese foi analisar o efeito da modelagem submalha em Simulações de grandes escalas de jatos coaxiais turbulentos. Foi desenvolvido um *solver* para execução em arquitetura híbrida (CPU-GPU), capaz de empregar diferentes modelos submalha (modelos de Smagorinsky, Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidade). A avaliação do efeito da modelagem submalha se deu através da comparação de resultados de simulações realizadas para um problema teste (utilizando os modelos acima) com dados experimentais da literatura. Para o modelo de Smagorinsky, buscou-se determinar primeiramente o valor ideal da sua constante *ad-hoc* para o problema estudado. Os resultados obtidos mostram que os modelos levam a diferentes previsões para propriedades médias e flutuações no escoamento, apresentando variados graus de acurácia. Os melhores resultados foram encontrados com o modelo de Smagorinsky, mostrando que nem sempre o modelo mais complexo produz melhores resultados, e que modelos mais simples têm condições de produzir resultados de ótima qualidade para o problema em questão, quando adequadamente calibrados.

**Palavras-chave:** Modelagem Submalha, LES, OpenMP, GPU, Dinâmica dos Fluidos Computacional, Turbulência.



# Abstract

The accurate simulations of turbulent flows of practical interest with accessible computational cost is still a great challenge. Large Eddy Simulation (LES) is an efficient technique based on the elimination of flow scales smaller than a characteristic length and on the direct resolution of flow on the largest scales. For the description of the effect of turbulence in small scales, there is a variety of subgrid models available in the literature, with different levels of complexity and associated computational cost. Although many advances have been achieved since the development of the LES technique, there is still no consensus on a definitive subgrid model for generic use in engineering applications. The performance analysis of the existing models is an important step in the development of new LES codes and their application in problems of interest. In this sense, the main objective of this thesis was to analyze the effect of subgrid modeling in large eddy simulation of turbulent coaxial jets. A solver was developed for execution in a hybrid architecture (CPU-GPU), capable of employing different subgrid models (Smagorinsky, Dynamic of Germano and Velocity Structure Functions). The evaluation of the effect of subgrid modeling was done by comparing the results of simulations performed for a test problem (using the models above) with experimental data from the literature. For the Smagorinsky model, we first determine the ideal value of its ad-hoc constant for the problem studied. The obtained results show that the models lead to different predictions for average properties and flow fluctuations, presenting varying degrees of accuracy. The best results were found with the Smagorinsky model, showing that the more complex model does not always produce the best results, and that simpler models are able to produce excellent quality results for a given problem, when properly calibrated.

**Palavras-chave: Subgrid Modeling, LES, OpenMP, GPU, Computational Fluid Dynamics, Turbulence.**



# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xviii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xxiii</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>3</b>
2.1 Escalas da Turbulência . . . . .	3
2.2 Equações de Conservação . . . . .	8
2.2.1 Equação de Conservação da Massa . . . . .	9
2.2.2 Equação de Conservação da Quantidade de Movimento . . . . .	9
2.3 A Natureza Física dos Jatos Turbulentos . . . . .	10
2.4 Técnicas de Simulação de Escoamentos Turbulentos . . . . .	14
2.4.1 RANS . . . . .	15
2.4.2 DNS . . . . .	17
2.4.3 LES . . . . .	18
2.5 Estado da Arte de Simulação de Grandes Escalas de Jatos Coaxiais Turbulentos . . . . .	20
<b>3 Modelagem da Turbulência em LES</b>	<b>25</b>
3.1 Filtros . . . . .	25
3.2 Média Favre . . . . .	27
3.3 Filtragem das Equações de Conservação . . . . .	28
3.4 Modelagem do Tensor de Tensões Turbulentas . . . . .	30
3.4.1 Modelo de Smagorinsky . . . . .	32
3.4.2 Modelo Dinâmico de Germano . . . . .	34
3.4.3 Modelo Função Estrutura de Velocidade . . . . .	38
<b>4 Método Numérico</b>	<b>41</b>
4.1 O Método das Diferenças Finitas . . . . .	41
4.2 Esquemas para Discretização das Derivadas Espaciais . . . . .	42
4.3 Arranjo das Variáveis na Malha . . . . .	43
4.4 Discretização das Derivadas Temporais . . . . .	45
4.5 Tratamento da Pressão . . . . .	47
4.6 Condição de Estabilidade e Malha . . . . .	52

4.7	Tratamento das Condições de Contorno . . . . .	54
4.7.1	Condições de Contorno de Entrada . . . . .	56
4.7.1.1	Método Sintetizador - Filtro Digital . . . . .	57
4.7.2	Condições de Contorno de Saída . . . . .	61
4.8	Sequência de Solução . . . . .	62
4.9	Metodologia de Paralelização . . . . .	64
4.9.1	Paralelização utilizando GPU . . . . .	65
4.10	Definição do Problema Teste e Malha . . . . .	70
4.11	Planejamento das Simulações . . . . .	74
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>83</b>
5.1	Resultados das simulações do GRUPO1 - Análise do coeficiente de Smagorinsky . . . . .	84
5.2	Resultados das simulações para o GRUPO1 - Comparação entre os modelos submalha . . . . .	93
5.3	Resultados das simulações do GRUPO2 - Análise do coeficiente de Smagorinsky . . . . .	106
5.4	Resultados das simulações para o GRUPO2 - Comparação entre os modelos submalha . . . . .	112
5.5	Análise Direta do Efeito da Condição de Contorno . . . . .	119
5.6	Ganhos de Desempenho Computacional . . . . .	127
<b>6</b>	<b>Conclusões e Trabalhos Futuros</b>	<b>131</b>
6.1	Trabalhos Futuros . . . . .	135
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>137</b>
<b>A</b>	<b>Discretização das Equações de Conservação</b>	<b>147</b>
<b>B</b>	<b>Discretização da Equação de Conservação da Massa (Dilatação)</b>	<b>151</b>
<b>C</b>	<b>Técnicas de Paralelização</b>	<b>153</b>
C.0.1	Sistemas de Memória Compartilhada . . . . .	154
C.0.2	Sistemas de Memória Distribuída . . . . .	155
<b>D</b>	<b>Verificação do Código</b>	<b>159</b>
D.1	Escoamento Entre Placas Planas Pareladas . . . . .	159
D.2	Difusão Unidimensional Transiente . . . . .	160
<b>E</b>	<b>Artigo Publicado na Revista <i>Journal of Applied Fluid Mechanics</i></b>	<b>163</b>

# Lista de Figuras

Figura 2.1	Cascata de transferência de energia cinética. Adaptado de Sagaut <i>et al</i> (2013). . . . .	7
Figura 2.2	Regiões características de um jato turbulento. . . . .	11
Figura 2.3	Arrasto Turbulento através da TNTI. Adaptado de Philip e Marusic (2012). . . . .	15
Figura 2.4	Escalas resolvidas e escalas modeladas em LES. Adaptado de Sagaut (2006). . . . .	19
Figura 4.1	Distribuição de pontos de uma malha em um espaço bidimensional, adaptado de Fortuna (2000). . . . .	43
Figura 4.2	Representação das grandezas na malha em arranjo deslocado utilizado, adaptado de Fortuna (2000). A dimensão "z" foi omitida para simplificar a visualização. . . . .	44
Figura 4.3	Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado, adaptado de Fortuna (2000). . . . .	50
Figura 4.4	Esboço da geometria utilizada nas simulações. . . . .	55
Figura 4.5	Resultado da utilização de um sinal de entrada gerado por um ruído branco em um jato plano, adaptado de Klein <i>et al.</i> (2003) . . . . .	58
Figura 4.6	Ilustração da zona de esponja, adaptado de Uzun <i>et al.</i> 2003 . . . . .	62
Figura 4.7	Representação didática da arquitetura de uma GPU, adaptado de Ruetsch e Fatica (2011). . . . .	65
Figura 4.8	CUDA Fortran - Um modelo de programação híbrido , adaptado de Hassan (2014). . . . .	67
Figura 4.9	Programa didático ilustrando um programa CUDA Fortran . . . . .	68
Figura 4.10	Kernel didático ilustrando um programa CUDA Fortran . . . . .	69
Figura 4.11	Fluxograma do código desenvolvido . . . . .	70
Figura 4.12	Comprimentos característicos para a geometria do jato em estudo. . . . .	71
Figura 4.13	Representação esquemática da geometria utilizada nas simulações e dimensões características. . . . .	72
Figura 4.14	Detalhe da malha regular próximo ao injetor. . . . .	74
Figura 4.15	Perfis de velocidade adimensional ao longo da linha axial em um jato obtidos por diferentes valores da constante de Smagorinsky, demonstrando o excesso de dissipação provocado pelo uso de um valor inadequado para $C_s$ . . . . .	76
Figura 4.16	Campo das flutuações de velocidades produzidas pelo método de Klein <i>et al.</i> para um instante " $t$ " para as componentes $u$ , $v$ e $w$ , respectivamente. . . . .	81

Figura 5.1	Campos de velocidade, viscosidade efetiva e flutuações de velocidades tomados no plano central para uma simulação com o modelo de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ). . . . .	85
Figura 5.2	Campos de velocidade instantânea tomados no plano central para uma simulação com o modelo de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ). . . . .	86
Figura 5.3	Perfil instantâneo da componente axial da velocidade obtido com o modelo de Smagorinsky $C_s = 0,060$ , comparado com dados experimentais de velocidade média. . . . .	86
Figura 5.4	Perfis axiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados a dados da literatura. . .	87
Figura 5.5	Perfis axiais de $U_{sim}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados a dados da literatura. . .	88
Figura 5.6	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 5$ . . . . .	88
Figura 5.7	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 10$ . . . . .	89
Figura 5.8	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 15$ . . . . .	89
Figura 5.9	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 20$ . . . . .	90
Figura 5.10	Perfis axiais de $u'_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	92
Figura 5.11	Campos de velocidade média axial tomados no plano central, obtidos com a utilização dos modelos de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ), Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades, respectivamente. . . . .	94
Figura 5.12	Campos de viscosidade efetiva $\mu_e$ tomados no plano central, obtidos com a utilização dos modelos de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ), Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades, respectivamente. . . . .	96
Figura 5.13	Campos de intensidade de turbulência adimensional $u'_{rms}$ tomados no plano central, obtidos com a utilização dos modelos de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ), Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades, respectivamente. . . . .	98
Figura 5.14	Perfis axiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura. . . . .	99
Figura 5.15	Perfis axiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura. . . . .	100
Figura 5.16	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 5$ . . . . .	101

Figura 5.17	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 5$ . . . . .	101
Figura 5.18	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 10$ . . . . .	102
Figura 5.19	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 10$ . . . . .	103
Figura 5.20	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 15$ . . . . .	103
Figura 5.21	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 15$ . . . . .	104
Figura 5.22	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 20$ . . . . .	104
Figura 5.23	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 20$ . . . . .	105
Figura 5.24	Perfis axiais de $u'_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	106
Figura 5.25	Perfis axiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados a dados da literatura. . .	107
Figura 5.26	Perfis axiais de $U_{sim}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados a dados da literatura. . .	107
Figura 5.27	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 5$ . . . . .	108
Figura 5.28	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 10$ . . . . .	109
Figura 5.29	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 15$ . . . . .	110
Figura 5.30	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 20$ . . . . .	110
Figura 5.31	Perfis axiais de $u'_{adm}$ obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante $C_s$ , comparados com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	111
Figura 5.32	Perfis axiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura. . . . .	112

Figura 5.33	Perfis axiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura. . . . .	113
Figura 5.34	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 5$ . . . . .	114
Figura 5.35	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 5$ . . . . .	114
Figura 5.36	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 10$ . . . . .	115
Figura 5.37	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 10$ . . . . .	115
Figura 5.38	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 15$ . . . . .	116
Figura 5.39	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 15$ . . . . .	117
Figura 5.40	Perfis radiais de $U_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 20$ . . . . .	117
Figura 5.41	Perfis radiais de $U_{sim}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996) em $x/D = 20$ . . . . .	118
Figura 5.42	Perfis axiais de $u'_{adm}$ obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	119
Figura 5.43	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $U_{adm}$ obtidos com o modelo de Smagorinsky para $C_s = 0,060$ e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	120
Figura 5.44	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $U_{sim}$ obtidos com o modelo de Smagorinsky para $C_s = 0,060$ e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	120
Figura 5.45	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $U_{adm}$ obtidos com o modelo Dinâmico de Germano e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	122
Figura 5.46	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $U_{sim}$ obtidos com o modelo Dinâmico de Germano e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	122
Figura 5.47	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $U_{adm}$ obtidos com o modelo Função Estrutura de Velocidades e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	123

Figura 5.48	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $U_{sim}$ obtidos com o modelo Função Estrutura de Velocidades e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	123
Figura 5.49	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $u'_{adm}$ obtidos com o modelo de Smagorinsky para $C_s = 0,060$ e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	125
Figura 5.50	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $u'_{adm}$ obtidos com o modelo Dinâmico de Germano e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	126
Figura 5.51	Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de $u'_{adm}$ obtidos com o modelo Função Estrutura de Velocidades e com os dados experimentais de Amielh <i>et al.</i> (1996). . . . .	126
Figura A.1	Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado, adaptado de Ferziger (2012). . . . .	147
Figura A.2	Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado, ajustado para implementação em Fortran. . . . .	148
Figura A.3	Localização das grandezas na malha para discretização dos termos convectivos (para facilitar a visualização somente é mostrado o plano $xoy$ ). . . . .	149
Figura B.1	Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado . . . . .	151
Figura C.1	Comparação entre a quantidade de processadores de uma CPU e de uma GPU. . . . .	154
Figura C.2	Arquitetura de um sistema de memória compartilhada. . . . .	155
Figura C.3	Conceito <i>fork-join</i> utilizado pelo padrão OpenMP . . . . .	156
Figura C.4	Arquitetura de um sistema de memória distribuída. . . . .	156
Figura C.5	Ilustração do envio e recebimento de dados. . . . .	156
Figura D.1	Problema para verificação da solução do escoamento laminar entre placas planas paralelas. . . . .	159
Figura D.2	Perfil de velocidades obtido pela solução do escoamento laminar entre placas planas paralelas. . . . .	160
Figura D.3	Verificação da solução transiente. Os tempos adimensionais analisados são $t_0 = 0$ , $t_1 = 1,708E-2$ , $t_2 = 8,5387491E-2$ e $t_3 = 0,1707749$ . . . . .	161

# Lista de Tabelas

Tabela 4.1	<b>Coefficientes do método Runge-Kutta para erro de truncamento de segunda ordem, de Blazek (2015).</b> . . . . .	47
Tabela 4.2	<b>Velocidades características do experimento e propriedades termo-físicas do fluido.</b> . . . . .	73
Tabela 4.3	<b>Números adimensionais de interesse</b> . . . . .	73
Tabela 4.4	<b>Características da malha estudada.</b> ( $N_x$ , $N_y$ e $N_z$ são os números de pontos nas direções $x$ , $y$ , e $z$ , respectivamente.) . . . . .	74
Tabela 5.1	Comparação entre os erros quadráticos médios produzidos com o uso de diferentes valores da constante de Smagorinsky. . . . .	92
Tabela 5.2	Comparação entre erros quadráticos médios produzidos pelos modelos . . . . .	99
Tabela 5.3	Comparação entre os erros quadráticos médios produzidos com o uso de diferentes valores da constante de Smagorinsky $C_s$ . . . . .	111
Tabela 5.4	Comparação entre erros quadráticos médios produzidos pelos avaliados . . . . .	119
Tabela 5.5	<i>EQM1</i> com modelo de Smagorinsky para diferentes valores da constante $C_s$ . . . . .	124
Tabela 5.6	<i>EQM1</i> para os três modelos avaliados. . . . .	124
Tabela 5.7	<i>EQM2</i> com modelo de Smagorinsky para diferentes valores da constante $C_s$ . . . . .	126
Tabela 5.8	<i>EQM2</i> para os três modelos avaliados. . . . .	127
Tabela 5.9	<b>Ganhos de desempenho para as técnicas utilizadas</b> . . . . .	128

# Lista de Símbolos

$\alpha_m$	Coeficiente Runge-Kutta referente ao estágio $m$	—
$\Delta t$	Passo de tempo	T
$\Delta y$	Comprimento da malha na direção $y$	L
$\Delta z$	Comprimento da malha na direção $z$	L
$\Delta$	Comprimento do filtro de malha	L
$\delta$	Diferencial finito	L
$\delta_d$	Filtro dimensional	L
$\delta_{ij}$	Delta de kronecker	—
$\epsilon$	Taxa de dissipação viscosa	$L^2/T^3$
$\epsilon_I$	Taxa de injeção de energia cinética turbulenta	$L^2/T^3$
$\epsilon_T$	Taxa de energia cinética turbulenta transportada	$L^2/T^3$
$\kappa$	Número de onda	1/L
$\kappa_c$	Número de onde de corte	1/L
$\langle \rangle$	Operador média temporal	—
$\langle u \rangle$	Velocidade mediada no tempo	L/T
$\langle \langle \rangle \rangle$	Operador média Favre	—
$(\sigma_{ij})_{sgs}$	Tensor de tensões submalha	M/LT <sup>2</sup>
$\mu$	Viscosidade dinâmica	M/LT
$\nabla$	Operador gradiente	—
$\nu$	Viscosidade cinemática	L <sup>2</sup> T
$\bar{f}$	Valor da propriedade referente as grandes escalas	—

$\overline{G}$	Função filtro	–
$\bar{u}$	Velocidade média	L/T
$\phi$	Propriedade genérica	–
$\rho$	Massa específica	M/L <sup>3</sup>
$\sigma_{ij}$	Tensor de tensões	M/LT <sup>2</sup>
$\tau_K$	Tempo característico da escala dissipativa de Kolmogorov	T
$\tau_\lambda$	Tempo característico da microescala de Taylor	T
$\tau_{ij}$	Tensor de tensões viscosas	M/LT <sup>2</sup>
$ \tilde{S} $	Norma de Frobenius	1/T
$\xi$	Comprimento do livre caminho médio molecular	L
$A_i$	Matriz dos coeficientes do sistema a ser resolvido	–
$a_{i,j}$	Transformação de Lund	–
$ADVEC$	Soma dos termos advectivos	M/L <sup>2</sup> T <sup>2</sup>
$B$	Vetor dos termos independentes do sistema a ser resolvido	–
$b_i$	Coefficiente do filtro para direção $i$	–
$b_{ijk}$	Filtro tridimensional	–
$C$	Coefficiente Dinâmico de Germano	–
$c$	Velocidade de propagação sonora	L/T
$C_K$	Constante de Kolmogorov	–
$C_R$	Coefficiente correspondente a intensidade de turbulência	–
$C_s$	Constante de Smagorinsky	–
$C_{ij}$	Tensor Cruzado	M/LT <sup>2</sup>
$CFL$	Condição de estabilidade de <i>Courant-Friedricks-Lewy</i>	–
$D$	Diâmetro interno do injetor	L
$D_{il}$	Dilatação	–
$D_{om}$	Domínio onde é realizada a operação de filtragem	m
$Delta_x$	Comprimento da malha na direção $x$	L
$DIFF$	Soma dos termos difusivos	M/L <sup>2</sup> T <sup>2</sup>

$E$	Espectro de energia	$L^2/T^2$
$E_c$	Energia cinética característica	$L^2/T^2$
$EQM1$	Erro quadrático médio para $U_{adm}$	—
$EQM2$	Erro quadrático médio para $u'_{adm}$	—
$F$	Variável auxiliar para solução da eq. do movimento na direção $x$	$M/L^2T$
$f$	Propriedade genérica	—
$f'$	Valor da propriedade referente às pequenas escalas	—
$G$	Variável auxiliar para solução da eq. do movimento na direção $y$	$M/L^2T$
$H$	Variável auxiliar para solução da eq. do movimento na direção $z$	$M/L^2T$
$i$	Direção do sistema coordenado cartesiano	—
$i, j, k$	Coordenadas discretas do domínio computacional	—
$k_t$	Energia cinética turbulenta	$L^2/T^2$
$l_\lambda$	Comprimento característico da microescala de Taylor	$L$
$L_c$	Escala de comprimento característica	$T$
$l_K$	Comprimento característico da escala dissipativa de Kolmogorov	$L$
$L_{ij}$	Identidade de Germano	$M/LT^2$
$L_{IN}$	Comprimento característico das estruturas turbulentas na entrada	$L$
$Ll_{ij}$	Tensor de Leonard	$M/LT^2$
$M_y$	Número de pontos na direção $y$ no plano de entrada	—
$M_z$	Número de pontos na direção $z$ no plano de entrada	—
$Ma$	Número de Mach	—
$mk$	Componente de velocidade da entrada	—
$N_x$	Número de pontos do domínio na direção $x$	—
$N_y$	Número de pontos do domínio na direção $y$	—
$N_z$	Número de pontos do domínio na direção $z$	—
$N_{mk}$	Parâmetro relacionado ao suporte do filtro	—
$n_{mk}$	Número de pontos para construir o comprimento de escala das estruturas turbulentas da entrada	—

$N_{xyz}$	Número de pontos necessários para uma simulação DNS	–
$O$	Ordem da aproximação numérica	–
$P$	Pressão modificada	M/LT <sup>2</sup>
$p$	Pressão	M/LT <sup>2</sup>
$R$	Somatório dos termos que não incluem a derivada temporal	–
$R_{and,mk}$	Vetor randômico tridimensional	–
$R_{and}$	Número randômico	–
$R_{ij}$	Tensor de Reynolds	M/LT <sup>2</sup>
$R_{u,i}$	Coefficiente avaliado em termos das flutuação de velocidades	–
$Re$	Número de Reynolds	–
$Re_{Lc}$	Número de Reynolds relativo ao comprimento característica $L_c$ "	–
$s$	Razão entre as massas específica do fluido do jato e do fluido do escoamento externo	–
$S_{ij}$	Tensor taxa de deformação	1/T
$t$	Variável tempo	T
$t_0$	Intante de tempo inicial	T
$t_c$	Tempo característico	T
$T_{ij}$	Tensor de tensões subteste	M/LT <sup>2</sup>
$u$	Componente de velocidade na direção x	L/T
$u'''$	Flutuação temporal de velocidade	L/T
$u_a$	Amostra de velocidade instantânea	L/T
$U_c$	Velocidade característica	L/T
$u_i$	Velocidade instantânea na direção $i$	L/T
$U_L$	Velocidade local	L/T
$u_r$	Velocidade característica correspondente a escala de dissipação viscosa	L/T
$U_{adm}$	Componente axial de velocidade adimensional	–
$U_{coflow}$	Velocidade de entrada do escoamento externo	
$U_{jet}$	Velocidade de injeção do jato	L/T

$U_{mk}$	Vetor bidimensional com flutuações de velocidades espacialmente correlacionadas na entrada	L/T
$u_{mk}$	Componente $mk$ da velocidade na entrada	L/T
$v$	Componente de velocidade na direção y	L/T
$v_{\Delta}$	Velocidade submalha característica	L/T
$w$	Componente de velocidade na direção z	L/T
$W_c$	Vorticidade característica	1/T
$x$	Coordenada axial com referência na extremidade do bocal	L
$x_i$	Posição na direção coordenada $i$	L
$xi$	Tolerância	–
$\mu'$	Viscosidade mássica	M/LT
$\mu_e$	Viscosidade efetiva	–
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta	M/LT
$\nu^+$	Constante do modelo Função Estrutura de Velocidade	–
$\rho_j$	Massa específica do fluido do jato	M/L <sup>3</sup>
$\rho_{coflow}$	Massa específica do fluido do escoamento externo	M/L <sup>3</sup>
$w'_{adm}$	Intensidade de turbulência adimensional	–
$w'_{rms}$	Raiz da média dos quadrados das flutuações de velocidade	L/T



# Capítulo 1

## INTRODUÇÃO

A turbulência está presente na maior parte dos escoamentos que observamos na natureza e na maioria das aplicações em engenharia. Os escoamentos turbulentos são instáveis e suas propriedades apresentam flutuações que são dependentes do tempo e do espaço. Uma das características mais marcantes dos escoamentos turbulentos é a multiplicidade de escalas que o caracterizam, desde as maiores estruturas (baixas frequências), que são controladas pela geometria ou contorno do escoamento, até as menores estruturas (altas frequências), que são controladas pela viscosidade do fluido. Na prática as estruturas podem ser visualizadas como vórtices de diferentes diâmetros característicos (FREIRE et al., 2002).

Existem grandes investimentos em pesquisas relacionadas à compreensão e ao controle da turbulência, visto que ela está presente e sua influência é determinante em uma grande variedade de aplicações de engenharia, como em aviões, automóveis, motores, turbinas, equipamentos industriais, etc. Nestas aplicações é comum a ocorrência de camadas limite e escoamentos cisalhantes como os jatos turbulentos. A simulação numérica de escoamentos com estas propriedades ainda é um desafio à mecânica dos fluidos computacional, visto que o desenvolvimento dos fenômenos que regem este tipo de escoamento nas simulações são diretamente influenciados pelos modelos utilizados.

A motivação inicial deste trabalho foi o desenvolvimento de um código para a simulação de chamas difusivas turbulentas utilizando modelagem LES (*Large Eddy Simulation*, Simulação de Grandes Escalas) e estudar o efeito da modelagem do processo de mistura nas escalas submalha. Entretanto, uma vez que a modelagem do tensor de

tensões submalha também é um tema ainda em discussão, como veremos a seguir, o objetivo desta tese foi reformulado para estudar o efeito da modelagem submalha do tensor de tensões em LES de jatos coaxiais turbulentos.

Neste sentido, as contribuições deste trabalho são: *i)* redução do custo computacional através do desenvolvimento de uma ferramenta computacional de arquitetura híbrida OpenMP-CUDA para simulação de grandes escalas de jatos turbulentos; *ii)* avaliação do efeito da utilização de diferentes modelos submalha para o tensor de tensões submalha em LES de jatos turbulentos coaxiais.

Desta forma, a presente tese está estruturada da seguinte forma: o Capítulo 2 consiste em uma revisão bibliográfica, onde é apresentada a fundamentação teórica e o estado da arte de LES de jatos coaxiais turbulentos. Os capítulos 3 e 4 tratam da metodologia utilizada no desenvolvimento do código. Os fundamentos da metodologia LES para modelagem de escoamentos turbulentos são apresentados no Cap. 3, enquanto que no Cap. 4 são tratadas as técnicas numéricas utilizadas para a implementação do solver desenvolvido. No Cap. 5 é realizada a apresentação e a discussão dos resultados obtidos. Por fim, no Cap. 6 são apresentadas as conclusões da tese e sugestões para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Este capítulo tem por objetivo (1) apresentar os conceitos e fundamentos essenciais referentes à simulações de jatos turbulentos coaxiais e suas dificuldades, (2) introduzir o equacionamento e definir a notação matemática utilizada no trabalho, bem como (3) apresentar o estado da arte quanto ao efeito dos modelos submalha em LES de jatos coaxiais turbulentos. Inicialmente é apresentada uma discussão sobre as escalas de turbulência e sua importância na metodologia LES. Em seguida, discutem-se os aspectos fenomenológicos de jatos turbulentos e apresentam-se suas equações governantes. É feita então uma breve discussão das principais metodologias utilizadas para a simulação de jatos turbulentos coaxiais. Por fim, uma discussão sobre o efeito da modelagem submalha em Simulações de Grandes Escalas de jatos turbulentos coaxiais é apresentada.

### 2.1 Escalas da Turbulência

Uma definição para escoamentos turbulentos que seja consenso na literatura especializada não existe. Segundo Lesieur (LESIEUR, 2012) para caracterizar um escoamento como turbulento, este deve apresentar as características a seguir:

- Imprevisibilidade, no sentido de que uma pequena incerteza quanto ao seu conhecimento em determinado momento inicial será ampliada de modo a impossibilitar a previsão determinística de sua evolução (comportamento dinâmico caótico).

- Deve provocar o aumento do grau de mistura muito além dos obtidos por difusão molecular.
- Deve compreender uma larga faixa de comprimentos característicos.

A transição à turbulência é caracterizada pelo aparecimento de instabilidades em um escoamento originalmente estável, dito laminar. Essas instabilidades se multiplicam por um processo não linear, e degeneram-se em um regime turbulento (FREIRE et al., 2002). Essa transição de um escoamento laminar para turbulento ocorre quando os efeitos inerciais são dominantes com relação aos efeitos difusivos. Os parâmetros adimensionais que caracterizam o fenômeno da transição são o número de Reynolds (razão entre forças de inércia e forças viscosas) e o número de Rayleigh (razão entre forças de empuxo e viscosas).

Um aspecto interessante no estudo da turbulência é que mesmo com o crescimento das instabilidades e degeneração, podem ser observadas estruturas na forma de vórtices que são transportadas mantendo aproximadamente a mesma geometria. Estas estruturas giram em torno de seu eixo a medida que são transladadas e são chamadas de estruturas coerentes (MÖLLER; SILVESTRINI, 2004).

Apesar da dificuldade em descrever um escoamento turbulento de forma determinística, eles não são totalmente aleatórios, visto a ocorrência de estruturas coerentes que reflete a existência de comprimentos de escalas característicos. Portanto, é possível identificar comportamentos estatísticos que suas grandezas apresentam, como a média e a variância de suas flutuações. Essa característica das flutuações (no espaço e no tempo) de velocidade em torno de uma média possibilita a obtenção de correlações de escalas estatísticas (SAGAUT et al., 2013).

O entendimento dos conceitos e das relações entre as escalas existentes em um escoamento turbulento são fundamentais para a construção e o entendimento do conhecimento teórico atualmente existente relacionados a escoamentos turbulentos. No tocante a técnica LES, todo seu desenvolvimento conceitual e matemático advém da análise e estudo das escalas do escoamento turbulento.

As grandes escalas fornecem uma estimativa das maiores estruturas que ocor-

rem no escoamento, e são definidas pelos seus comprimentos característicos, que são normalmente da mesma ordem de grandeza das escalas integrais. Por exemplo, no caso de um jato coaxial turbulento, consideremos o diâmetro interno  $D$  do injetor como sendo a escala característica de comprimento  $L_c$ . A velocidade característica de transporte das grandes escalas  $U_c$  naturalmente será a velocidade média  $\bar{u}$  de injeção do fluido na região do jato. A partir destas grandezas podem ser então definidas as grandes escalas características de tempo  $t_c$ , vorticidade  $W_c$  e energia cinética  $E_c$ .

$$t_c = \frac{L_c}{U_c}, \quad (2.1)$$

$$W_c = \frac{U_c}{L_c}, \quad (2.2)$$

$$E_c = U_c^2, \quad (2.3)$$

Em escoamentos incompressíveis, a dissipação da energia cinética do escoamento se dá essencialmente pelo efeito do atrito viscoso. O número de Reynolds

$$Re = \frac{U_c D_c}{\nu}, \quad (2.4)$$

é o parâmetro adimensional que expressa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas, onde  $\nu$  é a viscosidade cinemática. De acordo com a teoria de Kolmogorov (LESIEUR, 2012) a dissipação viscosa ocorre nas pequenas escalas do escoamento, de ordem  $r$ . Segundo Kolmogorov, nestas escalas de comprimento a velocidade característica,  $u_r$ , pode ser dada como:

$$u_r = (\epsilon r)^{1/3}, \quad (2.5)$$

onde  $\epsilon$  é a taxa de dissipação viscosa.

Portanto, para essa escala em que ocorre a dissipação viscosa o número de Reynolds local pode ser reescrito como:

$$Re_r = \frac{(\epsilon r^4)^{1/3}}{\nu}, \quad (2.6)$$

A dissipação da energia cinética ocorre nos menores vórtices, quando o Reynolds local passa a ser menor ou igual a unidade. Para esta condição de Reynolds

unitário, utilizando a Eq. 2.6 podemos estimar a escala de comprimento de Kolmogorov,  $l_K$ , também conhecida como escala dissipativa de Kolmogorov.

$$l_K = \left( \frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (2.7)$$

Esta escala é chamada de dissipativa por conta de que todos os vórtices menores que  $l_K$  serem dominados por efeitos viscosos e, portanto, são dissipados, não podendo se desenvolver.

Outra importante escala dos escoamentos turbulentos é a microescala de Taylor, que é uma escala intermediária entre as grandes escalas e a de Kolmogorov. A microescala de Taylor,  $l_\lambda$ , fornece uma estimativa da escala de comprimento em que os efeitos viscosos passam a ser relevantes ao escoamento. Uma definição detalhada em termos matemáticos pode ser encontrada em Sagaut *et al.* (SAGAUT *et al.*, 2013).

$$l_\lambda = \left( \sqrt{15 \frac{\nu}{\epsilon}} \right) u'_{rms} \quad (2.8)$$

em que

$$u'_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{a=1}^N (u'''_a)^2}{N}}, \quad (2.9)$$

e  $u'_{rms}$  é a raiz da média dos quadrados das flutuações de velocidade,  $u'''_a$  é uma amostra da flutuação de velocidade e  $N$  o número de amostras.

Para um escoamento turbulento plenamente desenvolvido, a taxa de dissipação viscosa,  $\epsilon$ , pode ser estimada em termos das grandes escalas. Assumindo a hipótese de equilíbrio, em que a taxa de dissipação viscosa é igual a taxa de injeção de energia cinética nas grandes escalas  $U_c^2/t_c$  (FREIRE *et al.*, 2002), tem-se:

$$\epsilon \approx \frac{U_c^2}{t_c} = \frac{U_c^3}{L_c}, \quad (2.10)$$

A partir da Eq. 2.10, as escalas de Kolmogorov e microescala de Taylor podem ser diretamente relacionadas com as grandes escalas (SAGAUT *et al.*, 2013):

$$l_K = \frac{L_c}{Re_{L_c}^{3/4}}, \quad (2.11)$$

$$l_\lambda = \frac{L_c \sqrt{10}}{Re_{L_c}^{1/2}}, \quad (2.12)$$

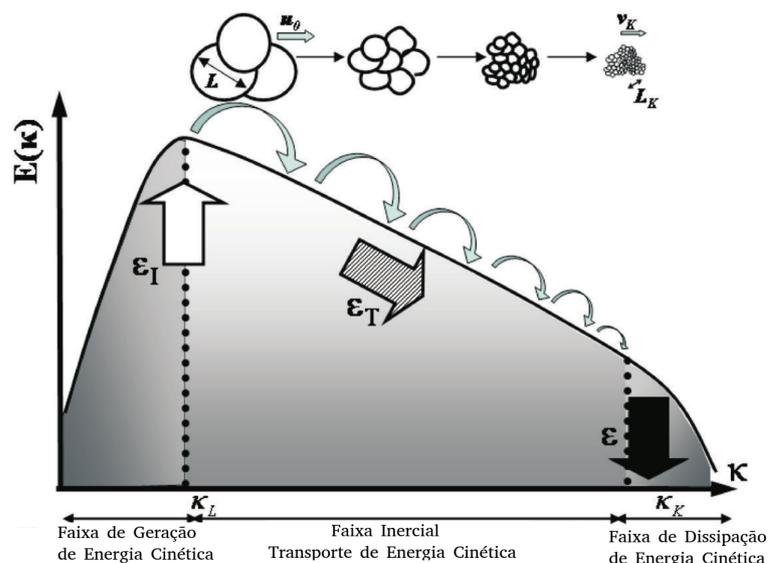


FIGURA 2.1. Cascata de transferência de energia cinética. Adaptado de Sagaut *et al* (2013).

Uma vez que a dissipação da energia cinética turbulenta gerada nas grandes escalas ocorre nas pequenas escalas, existe um mecanismo físico pelo qual a energia do movimento é transferido das grandes escalas até as escalas dissipativas de Kolmogorov. Este mecanismo é conhecido como cascata de energia, e é ilustrado na Fig. 2.1, em que podemos distinguir três regiões de comportamentos distintos, de acordo com a faixa de escalas de comprimento.

A região que compreende as grandes escalas e conseqüentemente pequenos números de onda,  $\kappa = \frac{2\pi}{L_c}$ , é onde surgem os grandes vórtices, compreendendo as grandes estruturas turbulentas. Portanto é nesta região do campo de frequências que ocorre o surgimento das instabilidades no escoamento médio que o conduzem a turbulência. Como conseqüência, é nesta faixa de escalas que ocorre a geração e injeção de energia cinética turbulenta no escoamento,  $\epsilon_I$ , como pode ser visualizado na Fig. 2.1.

Sagaut *et al.* (SAGAUT et al., 2013) observam que as escalas onde ocorrem a geração da energia cinética turbulenta normalmente coincidem com o pico de energia do espectro. O mesmo autor também menciona que as grandes escalas que não estão relacionadas a produção de turbulência são sustentadas por um mecanismo não linear de transferência de energia vindo das escalas mais energéticas. Este mecanismo é chamado de cascata de energia reversa.

A segunda região representada na Fig. 2.1, chamada de faixa inercial, está associada às escalas intermediárias. Esta faixa de comprimentos de onda é responsável por transferir a energia gerada nas grandes escalas para as pequenas escalas,  $\epsilon_T$ . Este mecanismo de transporte de energia é não linear e não depende da ação da viscosidade, ocorrendo por meio do esticamento dos vórtices que, para um fluido incompressível, resulta na diminuição de seu diâmetro. Uma vez que consideramos que não ocorre dissipação de energia nestas escalas tem-se que  $\epsilon_T = \epsilon_I$ .

A terceira e última região do espectro da Fig. 2.1 corresponde as escalas dissipativas de Kolmogorov. Nesta faixa do espectro a energia cinética turbulenta, pelo efeito do atrito viscoso, é dissipada sob a forma de calor. Tendo em vista que assumimos a hipótese de equilíbrio, tem-se  $\epsilon_T = \epsilon_I = \epsilon$ .

Portanto, ocorre que as menores escalas que ocorrem em um escoamento turbulento são as escalas de Kolmogorov. Em aplicações correntes de engenharia o comprimento de Kolmogorov é geralmente maior que o livre caminho médio molecular  $\xi$ . Da teoria cinética dos gases, obtém-se a relação

$$\frac{\xi}{l_k} = \frac{Ma}{Re_L^{1/4}}, \quad (2.13)$$

em que  $Ma = \frac{U}{c}$  é o número de *Mach* e  $c$  a velocidade do som no fluido em estudo. A Eq. 2.13 nos mostra a tendência de  $l_k$  ser sempre maior que  $\xi$ . Segundo Lesieur (LESIEUR, 1997) para  $Ma > 15$  essas duas escalas passam a se confundir. Portanto, para escoamentos a Mach menor que 15 a turbulência pode ser tratada como um fenômeno contínuo e as equações de Navier-Stokes representam adequadamente os escoamentos turbulentos.

## 2.2 Equações de Conservação

O presente trabalho trata de um escoamento homogêneo, isotérmico não reativo a baixo número de Mach. Para diferentes gases, este é regido pelas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento baseadas na hipótese de meio contínuo. As equações de conservação foram escritas e implementadas sem considerar as simplificações para escoamentos incompressíveis, com o objetivo de obter uma fer-

ramenta computacional de uso mais amplo, apesar da análise realizada neste trabalho considerar propriedades constantes. A apresentação das equações foi feita utilizando a notação de Einstein para coordenadas cartesianas.

### 2.2.1 Equação de Conservação da Massa

A conservação da massa para um escoamento monofásico e homogêneo é descrita pela equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.14)$$

em que  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $u_i$  são as componentes da velocidade e  $t$  é o tempo.

### 2.2.2 Equação de Conservação da Quantidade de Movimento

A equação de conservação da quantidade de movimento para as três direções  $i$  são escritas como:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N f_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.15)$$

em que  $\sigma_{ji}$  é o tensor de tensões e  $f_i$  representa o somatório das forças de campo que atuam sobre o volume de controle. A partir deste ponto do texto faremos  $f_i = 0$ , uma vez que o problema em estudo é um escoamento homogêneo e isotérmico com propriedades constantes.

A relação constitutiva para o tensor de tensões utilizada neste trabalho é baseada nas hipóteses de meio contínuo, isotrópico, homogêneo e que o fluido tem comportamento Newtoniano. Sob essas condições o tensor de tensões pode ser escrito como:

$$\sigma_{ij} = p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (2.16)$$

onde  $p$  é a pressão, e  $\tau_{ij}$  é o tensor de tensões viscosas, modelado como:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left( \mu' - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.17)$$

em que  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $\mu'$  a viscosidade mássica. A teoria cinética dos gases mostra que  $\mu'$  tem valor nulo para misturas monoatômicas, resultado que pode ser expandido para a maioria das aplicações de engenharia. A partir dessa hipótese, tem-se

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.18)$$

Finalmente, substituindo a Eq. 2.18 na equação de conservação para a quantidade de movimento, obtém-se

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \quad (2.19)$$

## 2.3 A Natureza Física dos Jatos Turbulentos

Além de suas características dinâmicas, os jatos turbulentos têm sido amplamente estudados devido as suas propriedades de mistura. Junto com o escoamento eles podem carregar substâncias inseridas por orifícios ou tubos que são espalhadas pelas altas taxas de mistura que ocorrem nos escoamentos turbulentos. Escoamentos na configuração de jato são frequentemente utilizados em injetores de combustíveis em sistemas de propulsão e queimadores industriais. Para melhorar a eficiência destes processos e equipamentos é importante que se domine os fundamentos e modelos matemáticos relacionados a este tipo de escoamento.

O escoamento de um jato coaxial circular turbulento é um problema representativo de escoamentos cisalhantes livres em expansão espacial. Neste tipo de escoamento podemos identificar três principais regiões (LIPARI; STANSBY, 2011), ilustradas na Fig. 2.2. A primeira região está localizada imediatamente a jusante do injetor e é chamada de região potencial. Resultados numéricos e experimentais comprovam a existência da região potencial e mostram que, para escoamentos isotérmicos com densidade constante, tem seu comprimento variando em função dos parâmetros do escoamento, na ordem de 4 até 10 diâmetros do injetor. O comprimento do núcleo potencial de jatos coaxiais depende da relação entre a quantidade de movimento do jato e do escoamento externo e características geométricas do jato, sendo a relação en-

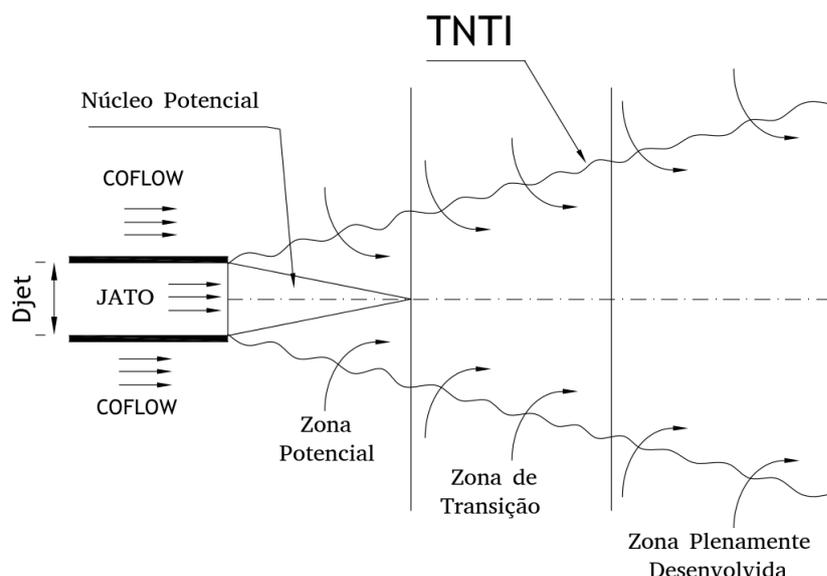


FIGURA 2.2. Regiões características de um jato turbulento.

tre quantidade de movimento a característica dominante (PITTS, 1986; RUFFIN et al., 1994). Essa primeira região é dominada puramente por efeitos inerciais.

A extinção da região potencial ocorre em função do crescimento das camada de mistura anular decorrente do crescimento das instabilidades de Kelvin-Helmholtz. Essa camada de mistura é criada pela instabilidade inflexional associada com o gradiente de velocidades entre o escoamento do injetor e o escoamento coaxial externo (SAGAUT, 2006). A espessura da camada de mistura aumenta a medida que se analisa regiões mais distantes do injetor. Resultados experimentais e dados de simulações mostram ainda que o tensor de Reynolds aumenta até um valor máximo, que coincide com a extremidade da região potencial (SAGAUT, 2006).

Tratando-se de simulações de jatos turbulentos, Sagaut (SAGAUT, 2006) relata que os diversos aspectos da solução numérica têm forte influência na solução obtida para o problema. Os modelos submalha, utilizados em LES, têm influência no comprimento da região potencial. Portanto os modelos são responsáveis por permitir um desenvolvimento da camada de mistura anular mais rápido ou mais lento. Modelos mais dissipativos atrasam o desenvolvimento da camada de mistura, de modo a tornar a região potencial mais longa. A intensidade das perturbações das condições de contorno tem efeito na forma e tamanho do núcleo potencial. Os erros numéricos devido a malha e esquemas numéricos empregados também podem influenciar o comprimento

potencial do jato avaliado pela simulação. Quando são utilizados que esquemas numéricos dispersivos há uma tendência de encurtar a região potencial, enquanto que quando são utilizados esquemas numéricos dissipativos há uma tendência de alongar a região potencial.

Após a região potencial tem-se a zona de transição ou pluma forçada (RODI, 2014), que se estende até aproximadamente 40 diâmetros a jusante do ponto de injeção. Nesta região, também chamada de região de desenvolvimento do jato, os efeitos inerciais normalmente continuam a dominar, mas em alguns casos, em escoamentos com variações de propriedades, efeitos gravitacionais já podem ter bastante influência. A rápida expansão da região do jato vem acompanhada de um rápido decaimento da velocidade axial que passa a apresentar autossimilaridades. As regiões potencial e transicional constituem o chamado *near field*. Chen e Rodi (CHEN; RODI, 1980) propuseram uma lei de similaridade para descrever o perfil da componente axial da velocidade ao longo do eixo do jato, na região onde o jato apresenta similaridade, válida inclusive para jatos de massa específica variável

$$\frac{U_L}{U_j} = 6,3 \left( \frac{\rho_j}{\rho_{coflow}} \right)^{1/2} (D_j/x), \quad (2.20)$$

em que  $U_L$  é o valor local da componente axial da velocidade,  $U_j$  a velocidade de injeção do jato, e  $\rho_j$  a massa específica do fluido do jato,  $\rho_{coflow}$  a massa específica do fluido do escoamento externo,  $D_j$  o diâmetro interno do bocal do jato e  $x$  é a posição axial medida a partir do ponto de injeção do jato.

A terceira região, já distante do injetor, é chamada de região de pluma ou de região do escoamento plenamente desenvolvido (*far field*). Nesta região o perfil de velocidade é auto-similar e o jato é considerado em equilíbrio, que significa que todos os perfis radiais de velocidade tendem ao perfil de uma gaussiana (PAYRI et al., 2016). Verifica-se também que nesta região a razão entre as tensões turbulentas média e a velocidade axial passa a ser uma constante na faixa de 0,28 – 0,29 (RODI et al., 1975).

Tem sido observado que os jatos com injetor de geometria retangular apresentam processos de arrasto e mistura mais intensos do que jatos de injetor circular ou elíptico (ROUMBAS et al., 2016). Existem poucos estudos sobre jatos com injetor de seção quadrada (ROUMBAS et al., 2016). Bitting *et al.* (BITTING et al., 2001) realizaram medições de alta resolução em jatos coaxiais de injetor de seção quadrada e circular,

para os números de Reynolds de 19000 e 29000. Eles observaram que o jato com injetor de seção quadrada possui melhor efeito de mistura quando comparado com o jato com injetor de seção circular. Entretanto, por simplicidade construtiva a grande maioria das aplicações de engenharia e estudos existentes são relacionados a jatos com injetores cilíndricos.

A turbulência tende a ser criada localmente onde o escoamento é mais instável. Esta afirmação pode ser observado, por exemplo, em escoamentos cisalhantes que possuem jatos, ondas e camadas limites (PHILIP; MARUSIC, 2012). Nestes exemplos as regiões turbulentas são adjacentes a uma região não turbulenta (*non turbulent* - NT), onde a turbulência é gerada.

Os escoamentos cisalhantes livres, tais como jatos, apresentam uma tendência de espalhar-se lentamente na direção normal à direção preferencial do jato e ao surgimento de intermitência. O espalhamento é manifestado pelo crescimento lateral da interface escoamento turbulento // escoamento não turbulento (*Turbulent/Non Turbulent Interface* - TNTI), que é uma região bastante estreita, continuamente deformada por uma ampla faixa de escalas. A TNTI marca a transição entre as regiões de escoamento irrotacional e de escoamento turbulento. Gampert *et al.* (GAMPERT et al., 2014) relata que primeiramente a TNTI foi chamada de "super camada laminar". Flutuações de velocidade irrotacionais são normalmente encontradas no escoamento não turbulento fora da camada de interface, que não reflete uma ausência de flutuações, mas sim uma mudança na característica das flutuações de turbilhonadas para irrotacionais.

Bisset *et al.* (BISSET et al., 2002) explica que sendo a vorticidade transmitida para o fluido somente através da ação da viscosidade molecular, então deve existir uma camada cisalhante que por natureza é essencialmente viscosa, muito embora ela possa ser extremamente fina. Através dessa fina camada do escoamento turbulento, ocorre a maioria das trocas entre o escoamento totalmente turbulento e o não turbulento, incluindo o transporte de escalares.

Aguirre e Catraki (AGUIRRE; CATRAKIS, 2005) complementam, explicando que a ocorrência da intermitência característica dos jatos turbulentos é atribuída também a TNTI. O surgimento da interface turbulenta, ou camada cisalhante, se dá pelas instabilidades de Kelvin-Helmholtz que são responsáveis pela transição de comporta-

mento laminar para turbulento. A ocorrência destes fenômenos no problema teste que será estudado torna sua solução mais complexa, entretanto mais apropriada para verificar a robustez do modelo proposto e do código desenvolvido.

A taxa de espalhamento das ondas, que caracterizam a intermitência, a transferência de massa através das camadas de mistura, e as taxas de mistura e de reação (quando reativos) em jatos são, portanto, principalmente determinadas pelas características do escoamento na vizinhança TNTI. Assim, o arrasto turbulento é de central importância para escoamentos de interesse na natureza e em aplicações de engenharia (SILVA et al., 2015) .

Segundo Da Silva *et al.* (SILVA et al., 2015), estudos mais antigos costumavam descrever o arrasto turbulento como sendo causado pelas grandes escalas do movimento ocorrendo de forma cíclica em locais específicos da TNTI, transferindo propriedades transportadas ao longo da TNTI. Entretanto, trabalhos recentes sugerem o contrário, que o arrasto resulta principalmente do movimento das pequenas escalas de comprimento que vão transferindo propriedades ao longo da TNTI. A Fig. 2.3 explica como ocorre o arrasto turbulento, evidenciando o importante papel das pequenas escalas que compõe a TNTI. Esta análise indica que o arranjo numérico, e o modelo de turbulência utilizado nas simulações de grandes escalas deve ter condições de minimamente capturar ou reproduzir os fenômenos que ocorrem junto a TNTI.

## 2.4 Técnicas de Simulação de Escoamentos Turbulentos

Existem basicamente três metodologias de simulação de escoamentos turbulentos, denominadas Navier-Stokes com Média de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* - RANS), Simulações de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation* LES) e Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation* DNS). Cada uma apresenta vantagens e desvantagens, de modo que a escolha da metodologia adequada depende da característica ou tipo de fenômeno a ser analisado e a disponibilidade de tempo e recursos computacionais.

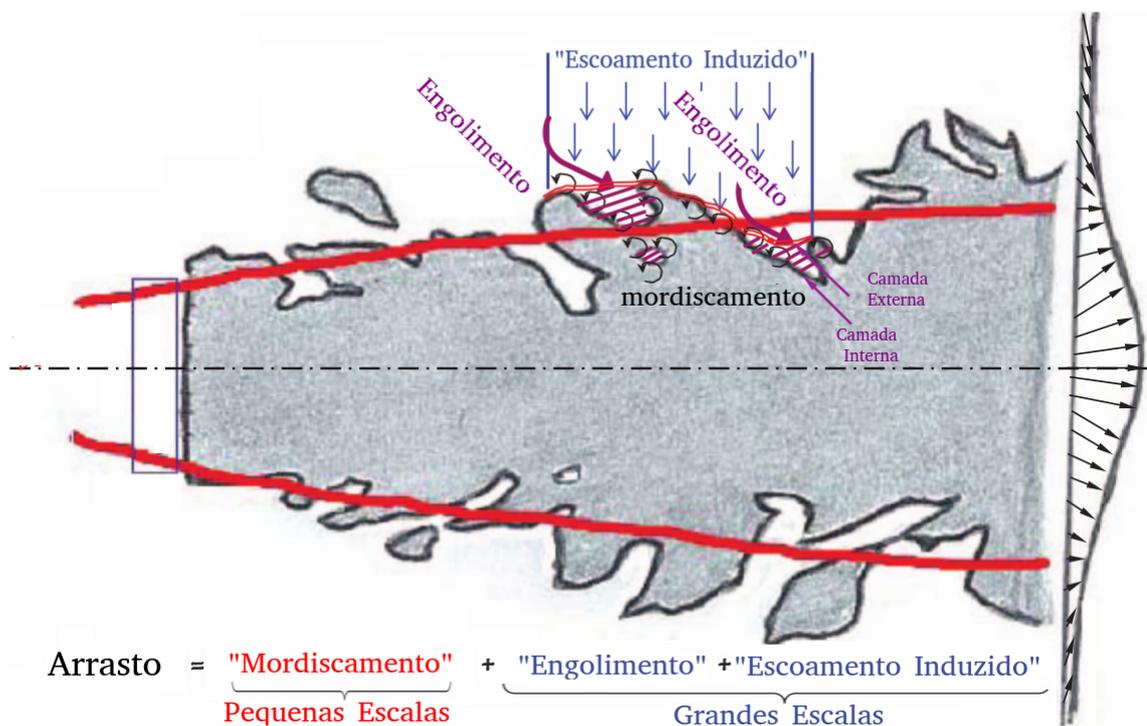


FIGURA 2.3. Arrasto Turbulento através da TNTI. Adaptado de Philip e Marusic (2012).

### 2.4.1 RANS

A metodologia RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) é a técnica precursora na simulação de escoamentos turbulentos. A técnica possui um custo bastante atrativo, sendo amplamente utilizada na solução de problemas de engenharia. Por outro lado possui certas limitações, pois uma vez que a equação de conservação resolvida é para grandezas médias, fenômenos transientes e intermitentes não podem ser capturados. A precisão dos resultados também tem limitações, de modo que a precisão requerida para a solução de problemas de formação de poluentes, por exemplo, não é alcançada por esta técnica (PITSCH, 2006).

Através de RANS o movimento turbulento não é efetivamente resolvido. A proposta da técnica é incorporar, por meio de modelos e informações estatísticas, os efeitos da turbulência sobre o escoamento médio (RODI, 2017). Os fundamentos do tratamento estatístico da turbulência foi introduzido inicialmente por Osborne Reynolds, que decompôs as componentes da velocidade instantânea  $u_i$  em termos de suas médias,  $\langle u_i \rangle$ , e suas flutuações  $u'''_i$ , temporais.

A partir dessa análise proposta por Reynolds, a velocidade instantânea  $u_i(t)$  pode ser escrita como

$$u_i(t) = \langle u_i \rangle + u_i''', \quad (2.21)$$

que é conhecida como a decomposição de Reynolds. O valor médio  $\langle u_i \rangle$  é definido por

$$\langle u_i \rangle = \frac{1}{T} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T u_i(t) dt, \quad (2.22)$$

Introduzindo a Eq. 2.21 na Eq. 2.19 de conservação de movimento e em seguida operando a média definida na Eq. 2.22 obtém-se a equação média de Navier Stokes, que para escoamentos incompressíveis tem a seguinte forma

$$\rho \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + \rho \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j} \delta_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} \right) - \rho \langle u_i''' u_j''' \rangle \right] \quad (2.23)$$

Nesta equação, como decorrência da não linearidade dos termos convectivos e da decomposição de Reynolds, aparecem termos adicionais relacionados às flutuações de velocidades  $\rho \langle u_i''' u_j''' \rangle$ , conhecido como tensor de Reynolds. Fisicamente o tensor de Reynolds representa o fluxo de quantidade de movimento decorrente das flutuações de velocidades. A determinação das componentes do Tensor de Reynolds é um dos grandes desafios da modelagem da turbulência. De acordo com Deschamps (FREIRE et al., 2002) as abordagens mais comuns para modelar o efeito do tensor de Reynolds nas equações médias de Navier-Stokes, são *i*) pelo uso do conceito de viscosidade turbulenta e *ii*) pela modelagem da equação para o transporte do tensor de Reynolds.

Existe uma grande variedade de modelos alicerçados na hipótese de viscosidade turbulenta que apresentam bons resultados. Entretanto, estes modelos são desenvolvidos para determinadas condições de escoamento, de modo que é necessário um bom conhecimento sobre o problema físico em estudo para a seleção do modelo apropriado. A dificuldade em selecionar o modelo ocorre devido ao modelo não resolver a turbulência e sim mimicar seu efeito, de modo que modelo que apresente bons resultados para um problema específico pode gerar resultados muito distantes da realidade para outro tipo de aplicação.

Por outro lado, modelar uma equação de transporte para o tensor de Reynolds se apresenta como uma solução mais generalista. Entretanto, partindo nesta direção, as

equações resultantes apresentam termos de terceira ordem relacionados as flutuações de velocidades, o que acaba aumentando bastante o número de equações e hipóteses para fechar o equacionamento. Este é o conhecido problema de fechamento da turbulência (FREIRE et al., 2002).

O detalhamento desta classe de modelos foge do escopo deste trabalho. A literatura disponível acerca de modelos RANS é bastante ampla, de modo que o leitor interessado pode encontrar com facilidade diversos trabalhos de revisão sobre modelos RANS, como por exemplo os trabalhos de Menter (MENTER, 2009), de Rodi (RODI, 2017) e de Lorensen *et al.* (LORENZON et al., 2018).

## 2.4.2 DNS

Em termos de metodologias para simulação de escoamentos turbulentos, sem levarmos em conta os custos computacionais envolvidos, a técnica DNS é a formulação mais adequada. A metodologia DNS se propõe a resolver todas as escalas de tempo e de comprimento presentes no escoamento, desde as grandes escalas, que definem a geometria do problema até as escalas dissipativas de Kolmogorov. Para tanto o tamanho máximo de malha deve ser a metade do comprimento  $l_K$ , de modo a respeitar o teorema de Nyquist (NYQUIST, 1928).

De acordo com Sagaut *et al* (SAGAUT et al., 2013) deve ainda ser considerado o critério de que o domínio seja maior do que  $50L_c$ , de modo a evitar o surgimento de correlações de natureza não física. Atendendo estas duas restrições tem-se que o número de pontos aproximado  $N_{xyz}$  para uma malha tridimensional é

$$N_{xyz} \approx Re_{L_c}^{\frac{9}{4}}, \quad (2.24)$$

Nesta metodologia as equações de conservação dos escoamento são discretizadas e resolvidas numericamente de forma direta, sem a necessidade de qualquer modelo adicional. Para tanto, além de uma malha e passo de tempo pequenos o suficiente para capturar as escalas dissipativas de Kolmogorov, uma atenção especial deve ser dada aos esquemas numéricos utilizados, com o objetivo de minimizar a dispersão e dissipação de erros numéricos.

Entretanto com os atuais recursos computacionais e considerando o ritmo da evolução destes recursos, ainda muitos anos serão necessários para que seja possível a solução de problemas de engenharia. Este tipo de simulação tem sido usado para a obtenção de resultados precisos em casos mais simples para a verificação e obtenção de modelos aproximados, além de contribuir também para a compreensão de fenômenos de difícil observação experimental.

### 2.4.3 LES

As Simulações de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation* - LES) de escoamentos turbulentos é uma técnica promissora que consiste na eliminação das escalas do escoamento menor que um tamanho  $\Delta$ . A eliminação das pequenas escalas é feita através da adequada aplicação de um filtro passa-baixo no sistema de equações, levando à equações que descrevam o movimento das grandes escalas (LESIEUR et al., 2005).

A metodologia LES, em termos de custo computacional, é intermediária entre a DNS e a simulação utilizando as equações médias de Reynolds (RANS). Com sua utilização é possível capturar a turbulência anisotrópica que ocorre nas grandes escalas através da solução das escalas intermediárias enquanto que as pequenas escalas são descritas por modelos de turbulência homogênea isotrópica.

Pitsch (PITSCH, 2006) relata que para estudos de sistemas reativos e não reativos a técnica LES fornece melhores resultados para o processo de mistura escalar e taxas de dissipação quando comparada com a metodologia RANS. Esta é uma das razões pela qual LES possui vantagens quando o objetivo é modelar problemas complexos em que o processo de mistura escalar seja de grande importância, como a combustão.

Os resultados obtidos com LES, assim como os obtidos com DNS são soluções transientes e tridimensionais das equações de Navier Stokes, podendo capturar fenômenos como a intermitência existente na TNTI de jatos turbulentos. Desta forma ainda assim é necessário a utilização de malhas refinadas e passos de tempo também pequenos.

De acordo com o teorema de Nyquist, escalas menores do que  $2\Delta x$  (em que  $\Delta x$

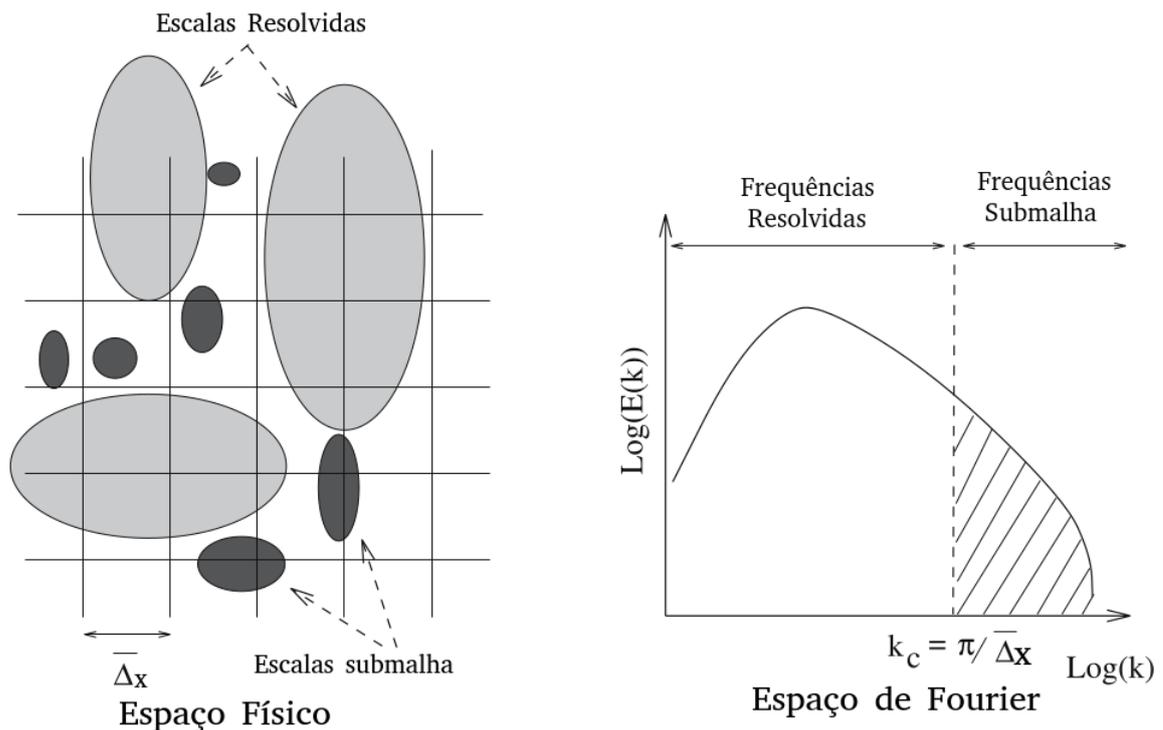


FIGURA 2.4. Escalas resolvidas e escalas modeladas em LES. Adaptado de Sagaut (2006).

é o tamanho da malha) não podem ser capturadas nas simulações (SAGAUT, 2006). Neste sentido o que se propõe com a técnica LES é resolver as escalas que a malha tem condições de capturar e descrever o efeito das menores escalas através de modelos matemáticos. A Fig. 2.4 a) ilustra este conceito, mostrando, na malha as escalas resolvidas e as modeladas, também chamadas de submalha. A Fig. 2.4 b) representa a separação das escalas no espaço da frequência, em que podemos observar que as escalas modeladas são as de menor energia e onde ocorre a dissipação viscosa. A separação entre as grandes escalas que são resolvidas e as menores escalas que são modeladas se dá por meio de um processo de filtragem, que é explicado em uma seção específica no capítulo de Modelagem da Turbulência (Capítulo 3).

A fundamentação teórica das simulações de grandes escalas parte das definições das escalas. Como já visto a escala em que ocorre a dissipação viscosa, a escala de *Kolmogorov*, é muito menor do que as escalas do contorno, que definem as características do escoamento e são consideradas como grandes escalas. O comportamento das pequenas escalas é pouco ou em quase nada afetado pelas grandes escalas. Neste sentido considera-se que o padrão do escoamento nas pequenas escalas tende a ser homogê-

neo e isotrópico. Pressupõe-se então que modelos para as pequenas escalas sejam mais universais, sem sofrer interferências do tipo de escoamento, quando comparados à metodologia clássica das médias de Reynolds (FREIRE et al., 2002) (PIOMELLI, 1999).

O esforço requerido em LES pode ser estimado considerando que a menor escala resolvida deve estar situada na subfaixa inercial do espectro de energia cinética turbulenta, Fig. 2.1, onde o efeito dos termos submalha passam a ser um problema independente das grandes escalas. Uma estimativa dessa escala é a microescala de Taylor,  $l_\lambda$ . Nesta direção, o número de pontos necessários para resolver um escoamento tridimensional é dado pela equação: (HUAI, 2006)

$$N_{LES} \approx \left( \frac{L_c}{l_\lambda} \right)^3 \approx Re^{3/2}, \quad (2.25)$$

em que a microescala de Taylor, em termos das grandes escalas pode ser estimado como (SAGAUT et al., 2013)

$$l_\lambda \approx L_c \sqrt{10} Re^{-1/2}, \quad (2.26)$$

## 2.5 Estado da Arte de Simulação de Grandes Escalas de Jatos Coaxiais Turbulentos

A metodologia LES tem se mostrado bastante promissora para a solução de escoamentos turbulentos. Entretanto ainda existem desafios quanto à forma adequada de descrever o efeito das escalas não resolvidas em diversos tipos de escoamentos. Loffler *et al.* (LÖFFLER et al., 2008) observam que a investigação do desempenho e comportamento dos modelos existentes é importante para o desenvolvimento de novos métodos.

A contribuição deste trabalho segue exatamente a afirmação anterior de Loffler *et al.* (LÖFFLER et al., 2008), uma vez que foi realizado um estudo do efeito da modelagem do tensor de tensões submalha a partir da comparação entre resultados de simulações de diferentes modelos. Para tanto, nesta seção discuti-se os principais trabalhos existentes na literatura que tratam do efeito da modelagem submalha, dando prioridade a estudos que tratam da análise do efeito submalha em LES de jatos turbulentos coaxiais.

Fureby *et al.* (FUREBY *et al.*, 1997) realizaram um estudo comparativo para cinco diferentes modelos submalha para o tensor de tensões submalha. Foram analisados o modelo de Smagorinsky (algébrico), um modelo de uma equação, um modelo de similaridade e combinações lineares destes três tipos de modelos para o decaimento da energia cinética turbulenta, para uma condição de turbulência homogênea e isotrópica em uma caixa cúbica. A comparação entre os espectros de turbulência e das características macroscópicas do escoamento mostraram pequenas diferenças entre os resultados obtidos pelos diferentes modelos, mas não insignificantes. Os resultados indicam que os modelos de uma equação são melhores do que os modelos algébricos. Foi verificado que os melhores resultados foram obtidos através da combinação linear entre o modelo Dinâmico de Germano local, que é um modelo de similaridade, e o modelo de uma equação.

Meneveau e Katz (MENEVEAU; KATZ, 2000) revisaram os modelos submalha baseados nas propriedades de invariância de escalas. É apresentada uma detalhada análise *a priori* do tensor de tensões produzido pelos modelos submalha de Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963), Dinâmico de Germano (GERMANO *et al.*, 1991) e de Similaridade, introduzido por Bardina *et al.* (BARDINA *et al.*, 1980), com o tensor de tensões real para o escoamento turbulento em um canal. Os autores concluíram que com base nos resultados da época seria prematuro um veredito sobre qual dos modelos existentes seria o melhor utilizado em LES. Entretanto, os resultados obtidos indicaram que o modelo Dinâmico reproduziu melhor o tensor de tensões comparado ao produzido pelo modelo de Smagorinsky, e que o modelo de similaridade produziu resultados melhores do que o modelo Dinâmico de Germano.

Em 2003, Bogey e Bailly (BOGEY; BAILLY, 2003b) publicaram um trabalho em que apresentam uma análise do efeito da modelagem submalha em LES de jatos subsônicos sobre o campo de velocidades e suas características acústicas. A análise do efeito da modelagem submalha foi realizada através de uma simulação utilizando somente o filtro LES explícito seletivo, projetado para eliminar as pequenas escalas sem afetar as escalas resolvidas, e de outra simulação em que foi utilizado o modelo submalha Dinâmico de Germano. Os resultados mostram que o desenvolvimento da camada cisalhante foi pouco influenciado pela utilização do modelo submalha. Entretanto, o comportamento do campo de velocidades após o término da região potencial mostrou-

se diferente para as duas simulações, sendo o decaimento e a taxa de espalhamento do jato maior para as simulações em que foi usado o modelo submalha Dinâmico de Germano. Ainda em 2003 os autores publicaram outro trabalho (BOGEY; BAILLY, 2003a) em que concluíram que um dos fatores que mais influencia nas características do desenvolvimento da camada cisalhante são as condições iniciais.

Andersson *et al.* (ANDERSSON *et al.*, 2005) estudaram o efeito das condições de contorno de entrada, do número de Reynolds e da modelagem submalha em LES de jatos turbulentos. Em todos os casos de seu estudo foram utilizados o modelo submalha de Smagorinsky, de modo que a avaliação do efeito da modelagem submalha foi realizado através da variação do tamanho do filtro. Os autores também analisaram o efeito da modelagem da condição de contorno mediante a sintetização de um sinal turbulento na entrada através de um método baseado em modos randômicos de Fourier, detalhado em Billson *et al.* (BILLSON *et al.*, 2003). Os resultados obtidos pelos autores para a análise dos efeitos da condição de contorno de entrada e variação do número de Reynolds indicaram que estes parâmetros têm pouca influência na dinâmica do jato. Por outro lado, com relação a análise do efeito submalha foi verificado que o aumento do tamanho do filtro torna o modelo mais dissipativo. Como resultado do aumento da dissipação, foi verificado que, após o término da região potencial, iniciada a transição do jato, a taxa de espalhamento prevista foi maior a medida que o tamanho do filtro foi aumentado.

Bodony e Lele (BODONY; LELE, 2008) realizaram uma importante revisão sobre o cenário da utilização e características dos resultados de simulações do tipo LES para jatos turbulentos coaxiais. Os autores discutiram em detalhes a interação que existe entre o método numérico e a modelagem submalha. Dentre diversas constatações importantes, os autores observam que no tocante a utilização de modelos submalha, não existe um consenso na literatura sobre qual o mais adequado, uma vez que seu efeito é cumulativo às características dissipativos que os esquemas numéricos podem possuir, tanto na etapa de filtragem, quanto na e etapa de discretização das equações. Bogey and Bailly (BOGEY; BAILLY, 2006) acrescentam ainda que a dissipação total adicionada pelo modelo de viscosidade submalha é influenciada pelo número de Reynolds. Portanto o desempenho dos modelos também é alterado pela dinâmica do jato.

Salkhordeh *et al.* (SALKHORDEH *et al.*, 2014) estudaram seis diferentes modelos submalha para o tensor de tensões disponíveis no solver OPENFOAM. Para o efeito da modelagem das condições de contorno, os seus resultados uma grande sensibilidade na dinâmica do jato na região próxima ao bocal, principalmente quanto ao comprimento potencial do jato. O modelo que apresentou melhores resultados para as distribuições de velocidades e de flutuações de velocidades foi o modelo Dinâmico de Germano com Coeficiente Local Médio. O trabalho ainda avaliou o efeito da modelagem da turbulência na condição de contorno de entrada em LES de um jato turbulento. A análise do efeito da condição de contorno foi realizada comparando os resultados de simulações em que foram definidos perfis de velocidades na entrada sem flutuações com os resultados de simulações em que as flutuações foram descritas por um método precursor. As simulações que utilizaram o método precursos para descrever as condições de contorno na entrada produziram resultados superiores, de modo que o comprimento potencial do jato foi passado a ser bem previsto.

Payri *et al.* (PAYRI *et al.*, 2016) realizaram um estudo sobre o efeito da modelagem submalha e do tipo de condição de contorno em LES de jatos coaxiais turbulentos, utilizando OPENFOAM. Foram avaliados os modelos submalha de Smagorinsky e o modelo de uma equação de Pomraning e Rutland (POMRANING; RUTLAND, 2002). Os dois modelos submalha produziram bons resultados, e embora o modelo de uma equação demandasse mais operações, ele admite um maior passo de tempo para uma mesma condição CFL, o que tornou seu custo razoável. Para a avaliação do efeito da modelagem da condição de contorno, foram confrontados um método de mapeamento e outro sintetizador, os autores verificaram que os resultados obtidos com o método de mapeamento foram superiores. Os autores ainda observaram que, embora os resultados das simulações que utilizaram o método sintetizador sejam inferiores, sua qualidade é boa, quando levado em conta seu menor custo computacional.

Brès e Lele (BRÈS; LELE, 2019) apresentaram uma revisão do progresso recente acerca das simulações de grandes escalas para jatos turbulentos coaxiais, com os avanços obtidos a partir de 2008. Os autores observaram que avanços importantes foram feitos quanto a verificação da importância da inclusão da geometria do bocal no modelo matemático das simulações. Os trabalhos de Bogey e Bailly (BOGEY; BAILLY, 2010), de Trumper *et al.* (TRUMPER *et al.*, 2018) e Freund (FREUND, 2019), contem-

plam uma interessante análise da influência das condições de contorno de entrada na simulação de jatos turbulentos. Brès e Lele (BRÈS; LELE, 2019) relataram também que a modelagem dos termos submalha e a interação destes modelos com o modelo numérico utilizado é um desafio que ainda permanece em aberto.

Ainda Brès e Lele (BRÈS; LELE, 2019) relataram a atual tendência da computação de alto desempenho, que é a utilização de arquiteturas híbridas CPU-GPU para LES de jatos, como realizado em Markesteijn *et al.* (MARKESTEIJN; KARABASOV, 2018). O desafio na implementação de *solvers* híbridos (CPU-GPU) se devem principalmente às diferenças de arquitetura que existe entre as CPU's e GPU's. Nas placas GPU (*Graphics Processing Unit*) existe uma limitação de memória, fator que deve ser levado em conta no desenvolvimento de novos algoritmos para serem executados em GPU. De modo que quando se usa este tipo de processamento, recalculer certas variáveis pode ser mais eficiente do que armazená-las (ZHU *et al.*, 2018). Neste sentido, de acordo com Markesteijn *et al.* (MARKESTEIJN *et al.*, 2015) os esquemas numéricos a serem aplicados para discretizar as equações em um código desenvolvido para execução em GPU podem ser diferentes dos mais adequados para CPU.

Uma solução para superar as limitações de memória dos processadores gráficos é a utilização de um cluster de GPU's. Por outro lado, a portabilidade de um código desenvolvido para execução em uma GPU, para execução em múltiplas GPU's pode ser uma tarefa complexa. Para essa portabilidade é preciso definir como os dados serão particionados entre as várias GPU's e garantir o lançamento dos *thread blocks* com tamanhos adequados e que estes acessem os dados corretamente em cada GPU. Kumar *et al.* (KUMAR *et al.*, 2019) observam que a transferência de dados cruzada entre as GPU's é uma operação computacionalmente demorada.

Outra alternativa para superar a limitação de memória é o desenvolvimento de um *solver* que seja econômico na utilização de memória, capaz de resolver o problema com eficiência e com o uso de apenas uma GPU. Esta segunda abordagem foi utilizada neste trabalho, de modo que o *solver* desenvolvido pode ser executado em uma única estação de trabalho equipada com uma GPU de alta capacidade, realizando simulações da ordem de  $100 \times 10^6$  pontos em poucos dias, representando um avanço interessante na aproximação da técnica LES das aplicações industriais.

# Capítulo 3

## Modelagem da Turbulência em LES

Este capítulo tem por objetivo apresentar os tratamentos matemáticos que foram aplicados para obtenção das equações utilizadas para as simulações LES, mais especificamente os processos de filtragem, de aplicação das médias e da modelagem do tensor de tensões submalha.

### 3.1 Filtros

Os filtros são responsáveis por separar matematicamente o campo  $f(\mathbf{x}, t)$  de uma propriedade em outros dois campos, um primeiro referente às grandes escalas que serão resolvidas, sendo  $\bar{f}(\mathbf{x}, t)$  o valor médio da propriedade  $f$  em um volume delimitado pelo filtro. E um segundo referente às pequenas escalas do escoamento  $f'(\mathbf{x}, t)$  (também chamadas de escalas submalha), que será modelado em LES. Desta separação irá resultar

$$f(\mathbf{x}, t) = \bar{f}(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t), \quad (3.1)$$

conhecida como decomposição de Leonard (KURO; ACHARYA, 2012).

A operação de filtragem consiste na convolução da variável a ser filtrada com a função filtro,

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{D_{om}} f(\mathbf{x}', t) \bar{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}' : t) d\mathbf{x}', \quad (3.2)$$

onde  $D_{om}$  é o domínio no qual a operação deve ser realizada e  $\bar{G}$  é a função filtro. A filtragem destina-se a eliminar ou suavizar flutuações menores do que o número de onda

de corte pré-definido. Entretanto a filtragem reduz o número de graus de liberdade do problema, podendo reduzir a acurácia e o desempenho do modelo, visto que há uma diminuição nas informações contidas no sistema com o aumento da largura do filtro. O lado favorável é a redução do custo computacional. O desafio está em encontrar o equilíbrio entre o tamanho do filtro, qualidade da solução e custo computacional.

Através de uma análise precisa, a modelagem em LES envolve dois processos de filtragem: *i*) um filtro dimensional ( $\delta$ ) e *ii*) e um filtro da malha ( $\Delta$ ) (KUO; ACHARYA, 2012). Os fenômenos que ocorrem em escala inferior ao espaçamento da malha não podem ser capturados por nenhum dos filtros e são sempre modelados. As escalas menores que metade do filtro ( $\Delta/2$ ) da malha são chamadas de escalas submalha. A Fig. 2.4 ilustra as escalas resolvidas e as escalas submalha.

A modelagem LES permite a utilização de filtros explícitos ou implícitos, desde que eles representem as propriedades dos termos submalha. À medida que a malha vai sendo refinada a diferença entre eles é que para filtros explícitos a solução aproxima-se da abordagem das equações filtradas, enquanto que para filtros implícitos aproxima-se da solução das equações obtidas pela metodologia DNS (HÄLLQVIST, 2006). Portanto, em LES não faz sentido analisar a convergência de malha, uma vez que no limite de malhas que possibilitam que sejam capturadas as menores escalas responsáveis pela dissipação viscosa, a solução irá convergir para os resultados obtidos por meio de simulações DNS.

A maioria das aplicações em LES utilizam o filtro implícito do tipo volumétrico constante (FREIRE et al., 2002), também chamado de filtro *box* ou *top hat filter* (PIOMELLI, 1999)

$$G(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/\Delta^3, & \text{se } |x_i| \leq \Delta/2, \quad i = 1, 2, 3; \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.3)$$

em que  $\Delta$  é o tamanho característico do filtro. Quando o tamanho  $\Delta$  é tomado como sendo o mesmo tamanho da malha, as operações de filtragem e diferenciação se comutam, caracterizando uma filtragem implícita. Essa abordagem é também chamada na literatura de filtragem de Schumann (HUAI, 2006) e é utilizada neste trabalho .

Quando a função filtro é definida de forma a não ser comutativa com a diferenciação, a filtragem é dita explícita. A utilização da filtragem explícita tem a vantagem de

separar claramente o tamanho do filtro, que está relacionado com a física do problema, do tamanho da malha que se relaciona apenas com a resolução das pequenas escalas. As outras funções filtro que também são comumente utilizadas em LES são o filtro Gaussiano e o filtro *cut-off* (KUROKI; ACHARYA, 2012) (PIOMELLI, 1999) (VEYNANTE; VERVISCH, 2002).

## 3.2 Média Favre

Os dois tipos de médias mais comumente aplicados às equações de conservação para a solução de escoamentos turbulentos são a média temporal (também chamada de média de Reynolds), definida na Seção 2.5.1, e a média temporal ponderada pela massa (também chamada de média Favre). A média de Reynolds é bastante utilizada para escoamentos com massa específica constante, enquanto que a média Favre tem sido preferida ao tratar escoamentos com massa específica variável, como em chamadas turbulentas.

Com o objetivo de facilitar a expansão do solver desenvolvido para a simulação de escoamentos com massa específica variável, as equações de conservação da quantidade de movimento foram desenvolvidas em termos da média Favre. De acordo com Gharbi *et al.* (GHARBI *et al.*, 1996) a utilização da média ponderada pela massa específica tem a vantagem de fornecer equações semelhantes às utilizadas para escoamentos incompressíveis. Piomelli (GHARBI *et al.*, 1996) aponta ainda que com a utilização da média Favre, não ocorre o surgimento dos termos submalha na equação de conservação da massa.

Uma variável  $f$  filtrada pela média Favre é definida como

$$\langle\langle f \rangle\rangle = \frac{\langle \rho f \rangle}{\langle \rho \rangle}, \quad (3.4)$$

em que o operador  $\langle \rangle$  indica média temporal e  $\langle\langle \rangle\rangle$  o filtro Favre. Decompondo o valor da variável  $f$  em termos de uma componente média  $\langle\langle f \rangle\rangle$  e uma flutuação  $f''$ , tem-se que:

$$f(\mathbf{x}, t) = \langle\langle f(\mathbf{x}, t) \rangle\rangle + f''(\mathbf{x}, t), \quad (3.5)$$

Multiplicando a Eq. 3.5 pela massa específica, aplicando a média temporal, tem-se

$$\langle \rho f(\mathbf{x}, t) \rangle = \langle \rho(\langle f(\mathbf{x}, t) \rangle + f''(\mathbf{x}, t)) \rangle \quad (3.6)$$

$$\langle \rho f(\mathbf{x}, t) \rangle = \langle \rho f(\mathbf{x}, t) \rangle + \langle \rho f''(\mathbf{x}, t) \rangle, \quad (3.7)$$

de modo que, pela definição da Eq. 3.4, tem-se

$$\langle \rho f''(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad (3.8)$$

Este procedimento pode ser aplicado para as variáveis velocidade, fração mássica e entalpia. Variáveis cujos efeitos da massa específica são inerentes ao processo de medição, tais como pressão, o tensor de tensões e a própria massa específica não necessitam ser filtradas pela média Favre. Para estas pode ser utilizada a média temporal tradicional (KUO; ACHARYA, 2012).

### 3.3 Filtragem das Equações de Conservação

Para realizar a filtragem das equações e utilizarmos a média Favre, é necessário que seja definida uma variável Favre filtrada (MOIN et al., 1991)

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}, \quad (3.9)$$

tal que verifica-se as seguintes relações

$$\overline{\rho u_i} = \bar{\rho} \tilde{u}_i, \quad (3.10)$$

$$\overline{\rho u_i u_j} = \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j, \quad (3.11)$$

Uma variável pode ser decomposta em termos de sua parcela Favre média filtrada e sua parcela submalha

$$f(\mathbf{x}, t) = \tilde{f}(\mathbf{x}, t) + f'(\mathbf{x}, t), \quad (3.12)$$

Após a aplicação do filtro, cujo detalhamento pode ser visto em Moint *et al.* (MOIN et al., 1991) e Kuo e Acharya (KUO; ACHARYA, 2012), a equação de conservação da quantidade de movimento, para fluido newtoniano, torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_j}) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right] \quad (3.13)$$

Devemos notar que o termo não linear da equação filtrada resultou em um produto de duas variáveis filtradas, o que inviabiliza sua solução (FREIRE et al., 2002). Este termo não linear pode ser aberto utilizando a decomposição de Leonard em termos do filtro Favre (SAGAUT, 2006), definidos nas Eqs. 3.1 e 3.9

$$\overline{\rho u_i u_j} \equiv \overline{\bar{\rho} (\tilde{u}_i + u_i') (\tilde{u}_j + u_j')} = \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i u_j'} + \overline{\rho u_i' \tilde{u}_j} + \overline{\rho u_i' u_j'}, \quad (3.14)$$

Somando e subtraindo o termo  $\overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}$

$$\overline{\rho u_i u_j} = \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i u_j'} + \overline{\rho u_i' \tilde{u}_j} + \overline{\rho u_i' u_j'}, \quad (3.15)$$

de modo que substituindo a Eq. 3.15 em Eq. 3.13 tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) &= \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right] - \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i u_j'} + \overline{\rho u_i' \tilde{u}_j} + \overline{\rho u_i' u_j'} \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

Define-se ainda o tensor de tensões submalha (*sub-grid-scale, sgs*):

$$(\sigma_{ij})_{sgs} = \overline{\rho u_i u_j} - \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} = \bar{\rho} (\overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j), \quad (3.17)$$

$$(\sigma_{ij})_{sgs} = \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i u_j'} + \overline{\rho u_i' \tilde{u}_j} + \overline{\rho u_i' u_j'} = Ll_{i,j} + C_{i,j} + R_{i,j}, \quad (3.18)$$

sendo  $Ll_{i,j}$  o tensor de Leonard,  $C_{i,j}$  o tensor cruzado e  $R_{i,j}$  o tensor de Reynolds, definidos respectivamente como

$$Ll_{i,j} = \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}, \quad (3.19)$$

$$C_{i,j} = \bar{\rho} \left( \overline{\tilde{u}_i u_j'} + \overline{u_i' \tilde{u}_j} \right), \quad (3.20)$$

$$R_{i,j} = \overline{\rho u_i' u_j'}, \quad (3.21)$$

O tensor de Leonard representa a interação entre as escalas resolvidas que resultam em contribuições submalha. O tensor cruzado representa a interação entre as escalas resolvidas e as escalas não resolvidas. O tensor de Reynolds representa a interação entre as escalas pequenas não resolvidas.

Após as equações de conservação passarem pelo processo de filtragem, todas as equações a serem resolvidas foram adimensionalizadas em termos da velocidade característica e do comprimento característico. Como propriedades características foram

tomadas as propriedades do injetor, seguindo a linha dos trabalhos experimentais de referência. Foram considerados como valores característicos a velocidade do jato,  $U_j$ , e o diâmetro interno do injetor,  $D$ , que são as grandezas utilizadas para o cálculo do número de Reynolds. Assim as equações adimensionalizadas resolvidas neste trabalho, na notação de Einstein, são ( $i, j = 1, 2, 3$ ):

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0; \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = & -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right] - \\ & + \frac{\partial (\sigma_{ij})_{sgs}}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

A modelagem do tensor de tensões submalha presente na Eq. 3.23 é tratada em detalhes nas próximas seções.

### 3.4 Modelagem do Tensor de Tensões Turbulentas

O modelo de tensor submalha ideal deve descrever fielmente a interação entre as escalas resolvidas e as escalas não resolvidas, descrevendo assim o fluxo de energia cinética que ocorre nos dois sentidos (cascata de energia a frente e reversa). Entretanto, a maioria dos modelos utilizados atualmente consideram somente o fluxo de energia das grandes escalas para as pequenas e não consideram a transferência reversa de energia, que possui intensidade consideravelmente menor (SAGAUT, 2006).

Dentro da estratégia elaborada para o estudo do efeito da modelagem submalha em LES de jatos turbulentos coaxiais serão avaliados três modelos para o tensor de tensões submalha, todos classificados como modelos funcionais. Segundo Sagaut (SAGAUT, 2006) esta classe de modelos está fundamentada na seguinte hipótese:

*"A ação das escalas submalhas sobre as escalas resolvidas é essencialmente energética, de modo que somente o balanço da energia transferida entre as duas faixas de escalas é suficiente para descrever a ação das escalas submalha."*

Esta classe de modelo é baseada no conceito de viscosidade turbulenta, proposto por Boussinesq. A utilização do conceito de viscosidade turbulenta introduz a hipótese

de que "o mecanismo de transferência de energia das escalas resolvidas para as submalha é análogo ao mecanismo molecular de transferência de quantidade de movimento, representado pelo termo difusivo onde aparece a viscosidade  $\mu$ ". Desta forma, podemos então escrever o tensor de tensões submalha como:

$$(\sigma_{ij})_{sgs} = -\nu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \nu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.24)$$

que resulta na correção da pressão estática, de onde se obtém a pressão modificada  $\bar{P}$

$$\bar{P} = \bar{p} - \frac{1}{3} \bar{\rho} (\sigma_{kk})_{sgs}, \quad (3.25)$$

Entretanto, como o estudo das interações acústicas e efeitos de compressibilidade estão fora dos objetivos deste trabalho e o efeito de  $(\sigma_{kk})_{sgs}$  ser pequeno sobre o campo de velocidades (BOGEY; BAILLY, 2003b), esta parcela isotrópica do tensor de tensões submalha foi negligenciada. A não consideração deste termo tem como objetivo aumentar eficiência computacional, da mesma forma que feito em Pierce e Moin (PIERCE; MOIN, 2004; PIERCE, 2001).

Dessa forma o termo submalha  $(\sigma_{ij})_{sgs}$  pode ser modelado adicionando-se uma viscosidade submalha ou turbulenta, como normalmente referida na literatura,  $\mu_t$  à viscosidade molecular, o que resulta na utilização de uma viscosidade efetiva adimensional  $\mu_e$  (PETRY, 2002; HUAI, 2006),

$$\mu_e = \frac{\mu + \mu_t}{\mu}, \quad (3.26)$$

Embora seja sabido que  $\mu_t \gg \mu$  a manutenção da viscosidade e da difusividade molecular auxilia na estabilidade do código, evitando valores nulos para essas propriedades. Segundo Kuo e Acharya (KUO; ACHARYA, 2012) os efeitos moleculares podem ser importantes próximo as paredes e próximo a TNTI.

Introduzindo as Eqs. 3.24 e 3.26 na Eq. 3.23 obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\mu_e}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.27)$$

De forma efetiva e simples, a viscosidade turbulenta pode ser vista como a responsável por levar em conta no modelo o efeito das escalas não resolvidas no escoamento. Ela atua de forma tal que, caso o tamanho do filtro seja maior do que a metade do comprimento dissipativo de Kolmogorov, as menores escalas resolvidas não

serão pequenas o suficiente para que a viscosidade molecular dissipe a energia produzida nas grandes escalas. Desta forma o termo atua como uma viscosidade artificial, chamado de viscosidade turbulenta, sendo responsável por dissipar a energia cinética turbulenta que é produzida nas grandes escalas do escoamento (que por sua vez são resolvidas).

A viscosidade turbulenta, portanto, não é uma característica de um determinado fluido, e sim determinada pelas características locais do escoamento. Sagaut (SAGAUT, 2006) observa ainda que a maioria dos modelos baseados na viscosidade turbulenta descrevem somente a cascata de energia a frente induzem o indesejado alinhamento entre o tensor taxa de deformação e o tensor submalha. De fato este alinhamento não ocorre, visto que os resultados de Tao *et al.* (TAO et al., 2000) mostram uma orientação relativa de 34 graus entre a taxa de deformação e o tensor de tensões turbulentas.

Segundo Bonody e Lele (BODONY; LELE, 2008) os modelos submalha para descrever a viscosidade turbulenta normalmente se enquadram em três classes: *i*) coeficientes constantes; *ii*) coeficiente dinâmico e *iii*) sem modelo de viscosidade explícito, utilizando apenas a dissipação numérica do processo de filtragem. Os modelos do tipo *i* e *ii* têm como objetivo aproximar o efeito das tensões submalha, utilizando informações das escalas resolvidas. Já os modelos do tipo *iii* reproduzem o efeito de dissipação da energia cinética turbulenta que ocorre nas pequenas escalas pela dissipação dos próprios esquemas numéricos, como através da utilização de esquemas do tipo *upwind*, por exemplo. A seguir, serão desenvolvidos os equacionamentos e fundamentação relativos ao modelo submalha de Smagorinsky de coeficientes constantes (do tipo *i*), modelo Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidade (ambos do tipo *ii*).

### 3.4.1 Modelo de Smagorinsky

O modelo submalha de Smagorinsky é o modelo mais utilizado para LES. É um modelo baseado gradiente de velocidade das grandes escalas, inicialmente desenvolvido para escoamentos atmosféricos. Trata-se de um modelo bastante simples com boas propriedades numéricas, mas tem a tendência de dissipar muita energia cinética

turbulenta (HUAI, 2006).

A viscosidade submalha é obtida supondo que as pequenas escalas estão em equilíbrio, e que a produção de energia cinética turbulentas nas grandes escalas e a dissipação nas pequenas escalas são equivalentes. Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963) supôs que a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , é proporcional ao comprimento característico do filtro  $\Delta$  e a uma velocidade submalha característica  $v_\Delta$

$$v_\Delta = \Delta |\tilde{S}| \quad (3.28)$$

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z}, \quad (3.29)$$

em que a norma de Frobenius  $|\tilde{S}|$  é calculada a partir do segundo invariante do tensor taxa de deformação filtrado

$$|\tilde{S}| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad (3.30)$$

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.31)$$

E então, calcula-se a viscosidade turbulenta como

$$\mu_t = \rho (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}|, \quad (3.32)$$

A constante de Smagorinsky,  $C_s$  foi determinada analiticamente para turbulência isotrópica por Lilly (LILLY, 1966) como sendo 0,18, também recomendado por Pope (POPE, 2000) e Sagaut (SAGAUT, 2006). Wilson e Demuren (WILSON; DEMUREN, 1997) e Jones *et al.* (JONES *et al.*, 2002) usaram de 0,1 – 0,12 como sugerido por Lesieur *et al.* (LESIEUR *et al.*, 2005) que representa uma redução na viscosidade turbulenta de um fator de aproximadamente 4, enquanto que Deardorff (DEARDORFF, 1970), McMillan (MCMILLAN, 1980) e Ferziger (FERZIGER; PERIC, 2012) recomendam que o valor da constante de Smagorinsky para escoamentos cisalhantes seja de 0,06 – 0,1.

Uzun *et al.* (UZUN *et al.*, 2003) e Ylyushin e Krasinsky (ILYUSHIN; KRASINSKY, 2006) buscaram o valor adequado para o coeficiente de Smagorinsky para LES de jatos turbulentos de propriedades constantes. O interessante é que em ambos os trabalhos foram utilizadas faixas de valores diferentes para a contante de Smagorinsky, enquanto que o valor adequado para Uzun *et al.* (UZUN *et al.*, 2003) é  $C_s = 0,1342$ , o

valor obtido para Ilyushin e Krasinsky (ILYUSHIN; KRASINSKY, 2006) é próximo ao valor teórico  $C_s = 0,17$ . Essa divergência de resultados ilustra que, de fato, os modelo submalha interagem com o esquema numérico quanto ao seu efeito de dissipação, não havendo assim um valor universal para a constante de Smagorinsky que seja adequado a todos os solvers LES (ILYUSHIN; KRASINSKY, 2006; BRÈS; LELE, 2019).

Embora o modelo submalha de Smagorinsky seja amplamente utilizado na solução de escoamentos turbulentos em LES, provendo geralmente bons resultados, ele possui algumas limitações (MOIN et al., 1991):

*i)* A constante de Smagorinsky  $C_s$  deve ser alterada para a solução de diferentes escoamentos;

*ii)* o modelo não tem o comportamentos assintótico correto próximo a paredes;

*iii)* quando o escoamento torna-se laminar o modelo ainda continua a dissipar energia cinética, sendo então muito dissipativo na TNFI;

*iv)* o modelo não contempla o efeito de cascata reversa (*backscatter*) de energia das escalas pequenas para as maiores, efeito que pode ser relevante em escoamentos de transição como os jatos.

*v)* efeitos de compressibilidade não são considerados.

### 3.4.2 Modelo Dinâmico de Germano

Com o objetivo de contornar as deficiências do modelo de Smagorinsky discutidas na seção anterior, Germano *et al.* (GERMANO et al., 1991), partiram dos conceitos de similaridade de escalas de Bardina *et al.* (BARDINA et al., 1980) e Germano (GERMANO, 1990) para derivar um novo modelo de viscosidade submalha. O modelo usa o campo de taxa de deformação em duas escalas diferentes, e então emprega informação espectral no campo das grandes escalas para extrapolar as tensões nas pequenas escalas (MOIN et al., 1991). Utilizando a identidade algébrica de Germano (GERMANO, 1990) e o modelo de viscosidade turbulenta de Smagorinsky (SMAGORINSKY, 1963) para representar as tensões em ambas escalas, Germano *et al.* (GERMANO et al., 1991)

desenvolveram o modelo que ficou conhecido como modelo Dinâmico de Germano.

O desenvolvimento matemático deste modelo é baseado em um duplo processo de filtragem, com dois comprimentos de filtro característicos diferentes. O primeiro é o filtro LES já desenvolvido no texto indicado pela barra (o filtro de malha). O segundo filtro é o chamado filtro teste, e tem tamanho característico geralmente como sendo múltiplo do tamanho da malha, e aqui no texto é indicado pelo acento circunflexo ( $\hat{\cdot}$ ). Analogamente ao processo de filtragem a nível de malha, o filtro teste é definido como:

$$\hat{f}(\mathbf{x}, t) = \int_D f(\mathbf{x}', t) \hat{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}' : t) d\mathbf{x}', \quad (3.33)$$

O filtro teste é assumido sendo maior que o filtro de malha, sendo equivalente a utilização de uma malha mais grossa. A recomendação é utilizar  $\hat{\Delta} = 2\Delta$  (LILLY, 1992). Pela definição do filtro teste, tem-se que  $\hat{\hat{G}} = \hat{G}$ .

Aplicando o filtro teste na equação já filtrada a nível de malha, Eq. 3.23, obtemos uma equação duplamente filtrada,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\widehat{\widehat{\rho u_i}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widehat{\widehat{\rho u_i u_j}}) &= -\frac{\partial \widehat{\widehat{p}}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\partial \widehat{\widehat{u_i}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{\widehat{u_j}}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \widehat{\widehat{u_i}}}{\partial x_i} \right] - \\ &+ \frac{\partial (\widehat{\widehat{\sigma_{ij}}})_{sgs}}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

Procedendo de forma análoga ao primeiro processo de filtragem, define-se o tensor de tensões relativo ao segundo filtro, chamado de tensor de tensões subteste  $(T_{ij})_{subteste}$  (FREIRE et al., 2002)

$$(T_{ij})_{subteste} = \widehat{\widehat{\rho u_i u_j}} - \frac{(\widehat{\widehat{\rho u_i}})(\widehat{\widehat{\rho u_j}})}{\widehat{\widehat{\rho}}} \quad (3.35)$$

de modo que a Eq. 3.34 pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\widehat{\widehat{\rho u_i}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widehat{\widehat{\rho u_i u_j}}) &= -\frac{\partial \widehat{\widehat{p}}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\partial \widehat{\widehat{u_i}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{\widehat{u_j}}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \widehat{\widehat{u_i}}}{\partial x_i} \right] - \\ &+ \frac{\partial (T_{ij})_{subteste}}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

Nesse modelo é considerado que tanto a parte anisotrópica de  $(T_{ij})_{subteste}$  e de  $(\widehat{\widehat{\sigma_{ij}}})_{sgs}$  podem ser descritos de acordo com a forma funcional baseada no conceito de

viscosidade turbulenta, mesma utilizada no modelo de Smagorinsky (GERMANO et al., 1991). Assim procedendo tem-se

$$(\widehat{\sigma}_{ij})_{sgs} - \frac{1}{3}(\widehat{\sigma}_{kk})_{sgs}\delta_{kk} = -2C\Delta^2|\widehat{S}|\widehat{S}_{ij} \quad (3.37)$$

$$(T_{ij})_{subteste} - \frac{1}{3}(T_{kk})_{subteste}\delta_{kk} = -2C\widehat{\Delta}^2|\widehat{S}|\widehat{S}_{ij} \quad (3.38)$$

em que

$$|\widehat{S}| = \sqrt{2\widehat{S}_{ij}\widehat{S}_{ij}}, \quad (3.39)$$

$$\widehat{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.40)$$

Lilly (LILLY, 1992) observa que o grande discernimento do modelo de Germano é reconhecer que a consistência entre Eq. 3.37 e Eq. 3.38 depende da escolha apropriada de um coeficiente  $C$  local, de modo que o coeficiente passa a ser função da posição e do tempo  $C(\mathbf{x}, t)$ .

Subtraindo a Eq. 3.34 da Eq. 3.36, ver Moin *et al.* (MOIN et al., 1991) e Freire *et al.* (FREIRE et al., 2002), tem-se o tensor de Leonard filtrado, que é conhecido como a Identidade de Germano

$$L_{ij} \equiv (T_{ij})_{subteste} - (\widehat{\sigma}_{ij})_{sgs} \quad (3.41)$$

$$L_{ij} = \left[ \frac{(\widehat{\rho u_i})(\widehat{\rho u_j})}{\widehat{\rho}} \right] - \frac{(\widehat{\rho u_i})(\widehat{\rho u_j})}{\widehat{\rho}} \quad (3.42)$$

$$L_{ij} = (\widehat{\rho \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j}) - \frac{(\widehat{\rho \widetilde{u}_i} \widehat{\rho \widetilde{u}_j})}{\widehat{\rho}} \quad (3.43)$$

a qual pode ser calculada explicitamente. Os elementos da identidade de Germano  $L_{ij}$  são as componentes resolvidas do tensor de tensões associado com as escalas de movimento entre o filtro teste e o filtro de malha. Lilly (LILLY, 1992) refere-se a estas escalas como "janela de teste". Através da utilização da Eq. 3.43 é que será possível a determinação do coeficiente  $C(\mathbf{x}, t)$  que aparece no modelo de Smagorinsky.

As tensões na janela de teste podem ser avaliadas a partir da diferença entre as Eq. 3.37 e Eq. 3.38, de modo que

$$L_{ij} - \frac{1}{3}L_{kk}\delta_{ij} = 2C(\mathbf{x}, t) M_{ij} \quad (3.44)$$

em que

$$M_{ij} = \overline{\Delta^2 |\widetilde{S}| \widetilde{S}_{ij}} - \overline{\Delta^2} \widehat{|\widetilde{S}|} \widehat{S}_{ij} \quad (3.45)$$

e os valores para  $C(\mathbf{x}, t)$  que resolvem a equação Eq. 3.44 podem ser utilizadas para determinar as tensões submalha, da mesma forma que é feito no modelo de Smagorinsky.

Lilly (LILLY, 1992) propôs minimizar o erro na determinação do coeficiente  $C(\mathbf{x}, t)$  através do método dos mínimos quadrados. Ele definiu a variável  $Q$  como sendo o quadrado do erro

$$Q = \left( L_{ij} - \frac{1}{3}L_{kk}\delta_{ij} - 2C(\mathbf{x}, t) M_{ij} \right)^2 \quad (3.46)$$

estabelecendo  $\partial Q / \partial C = 0$ , tem-se

$$C(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \quad (3.47)$$

A Eq. 3.47 foi obtida admitindo  $L_{kk} = 0$ , o que de fato ocorre para a faixa de número de Mach deste trabalho. Esta hipótese não foi imposta anteriormente com o objetivo de desenvolvermos o código mais geral possível.

Devemos notar que o denominador da Eq. 3.47 pode tornar-se nulo somente se todas as suas 5 componentes também forem nulas, situação em que o numerador também é nulo. O numerador da Eq. 3.47 pode apresentar valores negativos, que resulta em um coeficiente  $C$  localmente negativo, reproduzindo o efeito da cascata de energia reversa.

A implementação do modelo Dinâmico de Germano não é tão simples quanto o modelo de Smagorinsky, em função da dupla filtragem. Sagaut (SAGAUT, 2006) discute algumas propostas relacionadas a implementação para garantir estabilidade numérica, como por exemplo restringir um valor máximo e um mínimo admissível para  $C(\mathbf{x}, t)$  calculado.

### 3.4.3 Modelo Função Estrutura de Velocidade

O trabalho de Cholet e Lesieur (CHOLLET; LESIEUR, 1981), com o objetivo de obter o espectro de energia para as escalas resolvidas do escoamento sem a utilização de informações das pequenas escalas, desenvolveu uma metodologia para o cálculo da viscosidade turbulenta no espaço de Fourier. O método é válido para turbulência forçada estacionária e para o decaimento da turbulência homogênea e isotrópica, assumindo que o número de onda de corte  $\kappa_c$  encontra-se na faixa inercial com  $\kappa^{5/3}$ .

Segundo Cholet e Lesieur (CHOLLET; LESIEUR, 1981) a viscosidade turbulenta no espaço de Fourier pode ser calculada como

$$\nu_t(\kappa_c, t) = \nu_t^+ \sqrt{\frac{E(\kappa_c, t)}{\kappa_c}} \quad (3.48)$$

em que  $\nu_t^+$  é uma constante determinada pelo balanço de energia. Utilizando os resultados de Kraichnan (KRAICHNAN, 1976) com a hipótese de um espectro de energia de Kolmogorov para números de onda superior a  $\kappa_c$ , tem-se  $\nu_t^+ = 0,267$ , de modo que

$$\nu_t(\kappa_c, t) = 0,267 \sqrt{\frac{E(\kappa_c, t)}{\kappa_c}} \quad (3.49)$$

O cálculo da viscosidade turbulenta no espaço físico é complexo e pode ser feito mediante a utilização do conceito de Função Estrutura de Velocidade de segunda ordem, proposto por Métails e Lesieur (MÉTAIS; LESIEUR, 1992). A Função Estrutura de Velocidade local de segunda ordem  $F_2(\mathbf{x}, \Delta, t)$  é definida por

$$F_2(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \overline{\|\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\|^2} \quad (3.50)$$

em que o operador  $\bar{\phantom{x}}$  indica média espacial da operação em torno do ponto  $\mathbf{x}$  no interior de uma esfera de raio  $\mathbf{r}$ . Segundo Batchelor (BATCHELOR, 1953) existe uma correspondência entre a função estrutura de velocidade  $F_2(\mathbf{x}, \Delta, t)$ , definida no espaço físico, e o espectro de energia  $E(\kappa, t)$ , definido no espaço de Fourier para turbulência homogênea e isotrópica, de acordo com a seguinte relação:

$$E(\kappa_c, t) = 0,03 \Delta F_2(\mathbf{x}, r, t), \quad (3.51)$$

que utilizando a Eq. 3.48 resulta em

$$\nu_t(x, \Delta, t) = 0,067 C_K^{-3/2} \Delta \sqrt{F_2(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t)} \quad (3.52)$$

sendo  $\Delta$  o tamanho característico da malha e  $C_K = 1,4$  é a constante de Kolmogorov. A Eq. 3.52 representa  $\nu_t$  utilizando  $F_2(\mathbf{x}, \Delta, t)$  para todo o espectro de energia. Entretanto em LES devemos utilizar somente a parte do espectro das escalas resolvidas,  $\kappa < \kappa_c$ , de modo que para atender este interesse, Métais e Lesieur (MÉTAIS; LESIEUR, 1992) propuseram a utilização de uma função estrutura de velocidade truncada  $F_{2t}(\mathbf{x}, r, t)$

$$F_{2t}(\mathbf{x}, \mathbf{r}, t) = \langle \|\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\| \rangle_{\|\mathbf{r}\|=\Delta} \quad (3.53)$$

de modo que a equação para o cálculo da viscosidade turbulenta utilizando o modelo Função Estrutura (*Structure-Function Model - SFModel*) passa a ser:

$$\nu_t(\mathbf{x}, \Delta, t) = 0,104 C_K^{-3/2} \Delta \sqrt{F_{2t}(\mathbf{x}, \Delta, t)}, \quad (3.54)$$

De acordo com Lesieur (LESIEUR, 2012) o modelo apresenta bons resultados para escoamentos cisalhantes livres, sendo menos dissipativo que o modelo de Smagorinsky.



# Capítulo 4

## Método Numérico

As análises referentes ao efeito da modelagem submalha em jatos de massa específica variável foram todas realizadas em um código de desenvolvimento próprio, implementado em FORTRAN90. As equações são resolvidas para um domínio tridimensional em coordenadas cartesianas utilizando o método das diferenças finitas. Este capítulo será dedicado ao detalhamento da abordagem numérica e estratégia de implementação utilizada.

### 4.1 O Método das Diferenças Finitas

Os três métodos tradicionalmente utilizados para solução de escoamentos são o das diferenças finitas, o dos volumes finitos e o dos elementos finitos. Desde seu desenvolvimento inicial, estes métodos evoluíram bastante, de modo que é comum encontrarmos na literatura soluções para diferentes tipos de problemas envolvendo todos os três. Deve ser mencionado também que grandes avanços têm sido realizados no desenvolvimento dos métodos Lattice Boltzmann (PERUMAL; DASS, 2015), podendo ser mais uma importante alternativa prática em um futuro próximo.

No método das diferenças finitas, um problema contínuo é discretizado de modo que as variáveis dependentes são consideradas existentes somente em pontos discretos do domínio de interesse. As equações diferenciais governantes são discretizadas a partir de aproximações algébricas para suas derivadas, de modo que o problema passa a ser descrito por um sistema de equações algébricas, lineares ou não lineares (PLETCHER et al., 2012).

Ainda que existam diferentes procedimentos para derivação dos esquemas numéricos para aproximação das derivadas espaciais, como o DRP (*Dispersion-Relation-Preserving*) de Tam e Web (TAM; WEBB, 1993), a obtenção das aproximações para uma propriedade genérica  $\phi$  é geralmente realizada a partir de expansões em séries de Taylor

$$\begin{aligned} \phi(x_0 + \Delta x, y_0, z_0) = & \phi(x_0, y_0, z_0) + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_0 \Delta x + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_0 \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots \\ & \dots + \frac{\partial^{n-1} \phi}{\partial x^{n-1}} \Big|_0 \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{\partial^n \phi}{\partial x^n} \Big|_0 \frac{(\Delta x)^n}{n!}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

que é a origem dos esquemas numéricos utilizados neste trabalho, detalhada a seguir.

## 4.2 Esquemas para Discretização das Derivadas Espaciais

No presente estudo todas as derivadas espaciais foram discretizadas utilizando esquemas de diferenças centrais de segunda ordem para pontos no interior do domínio e esquemas de segunda ordem atrasados ou adiantados (*backward* ou *forward*) nos contornos. A escolha deste tipo de esquema se deu em função deste possuir uma característica não dissipativa (MAINIERI, 2013) e apresentar precisão suficiente para a solução de problemas de engenharia. A utilização de esquemas com características dissipativas em LES elimina as flutuações inerentes aos escoamentos turbulentos, não sendo recomendados.

A obtenção dos esquemas centrais de segunda ordem para derivadas primeira e segunda utilizados neste trabalho é realizada a partir da expansão em série de Taylor e truncamento dos termos na ordem desejada. Assim, através de manipulações algébricas, obtem-se para os pontos no interior do domínio as seguintes aproximações

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta x} + O[(\Delta x)^2], \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi_{i+1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2} + O[(\Delta x)^2], \quad (4.3)$$

onde os subscritos  $i$ ,  $j$  e  $k$  se referem aos pontos da malha, conforme ilustrado na Fig 4.1 para uma situação de problema de apenas duas dimensões (para facilitar a

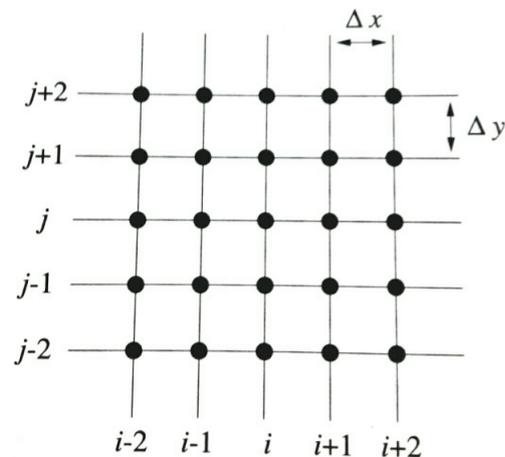


FIGURA 4.1. Distribuição de pontos de uma malha em um espaço bidimensional, adaptado de Fortuna (2000).

visualização). O tratamento aplicado aos pontos dos contornos será descrito em seção dedicada às fronteiras, na sequência do texto.

### 4.3 Arranjo das Variáveis na Malha

A malha é o conjunto de pontos discretos definidos dentro de um domínio espacial para representar a solução de um problema matemático contínuo. A Fig. 4.1 ilustra um conjunto de pontos distribuídos para representar um espaço plano cartesiano  $XoY$

A forma mais simples e direta para localizar as grandezas monitoradas no escoamento é armazenar todas as propriedades nos pontos da malha, o que facilita bastante a implementação do código (FERZIGER; PERIC, 2012). Entretanto, apesar de atrativo, a utilização deste tipo de arranjo das variáveis na malha para a solução das equações de Navier-Stokes pode fornecer campos oscilatórios, como já relatado por diversos pesquisadores (FERZIGER; PERIC, 2012; CLÓVIS, 1995; FORTUNA, 2000; PLETCHER et al., 2012).

Buscando evitar a ocorrência de soluções oscilatórias, foi adotado um arranjo de variáveis na malha dito *deslocado*, em que as velocidades e a pressão são armazenados em diferentes locais da malha, conforme Fig. 4.2. Este arranjo das variáveis deslocadas na malha foi introduzido inicialmente por Harlow e Welch (HARLOW; WELCH,

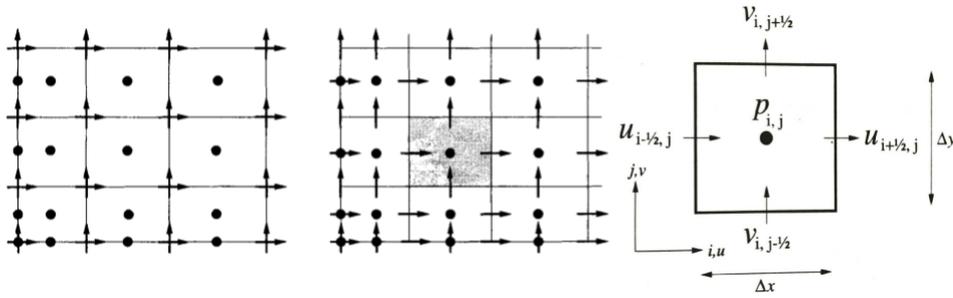


FIGURA 4.2. Representação das grandezas na malha em arranjo deslocado utilizado, adaptado de Fortuna (2000). A dimensão "z" foi omitida para simplificar a visualização.

1965). A utilização do arranjo deslocado se deu com o objetivo de seguir a sugestão de Fortuna (FORTUNA, 2000) para a obtenção de uma solução mais estável. Fortuna (FORTUNA, 2000) observa que embora os pontos " $i + \frac{1}{2}, j, k$ ", " $i - \frac{1}{2}, j, k$ ", " $i, j + \frac{1}{2}, k$ " e " $i, j - \frac{1}{2}, k$ " não estejam presentes explicitamente na malha, sua utilização é um artifício matemático para a obtenção da aproximação desejada. Para este tipo de arranjo de malha, tem-se que componentes de velocidades  $u$ ,  $v$  e  $w$  são armazenadas nas faces das células, distantes  $\frac{\Delta x}{2}$ ,  $\frac{\Delta y}{2}$  e  $\frac{\Delta z}{2}$ , respectivamente, do centro da célula. A pressão  $p$  e as demais propriedades ( $\phi$ ) do escoamento são armazenadas no centro da célula.

Consequentemente, a discretização das equações de conservação de cada componente da velocidade irá ocorrer em diferentes posições. Para as equações de conservação do movimento na direção  $x$ , a discretização será nas faces normais ao eixo  $x$ . De modo análogo, é realizada a discretização para as equações de conservação do movimento para as direções  $y$  e  $z$  nas faces normais aos eixos  $y$  e  $z$ , respectivamente. Por outro lado, a equação de conservação da massa é discretizada usando valores no centro das células (na posição " $i, j, k$ ").

A discretização das equações de conservação para a quantidade de movimento empregada neste trabalho são semelhantes a apresentada de forma detalhada em Fortuna (FORTUNA, 2000), com a diferença de que aqui a massa específica é mantida dentro das derivadas. A manutenção da massa específica dentro das derivadas se deu com o objetivo de deixar as equações e o código encaminhado para expansão à solução de escoamentos com variação de massa específica. As interpolações para a obtenção dos valores das grandezas em posições diferentes de seus locais de armazenamento foram todas realizadas por meio de médias aritméticas, a qual mantém a ordem do erro em 2, sendo portanto consistente com os esquemas centrados. A discretização das equações

de conservação para o escoamento tridimensional é apresentada no Apêndice A deste documento.

## 4.4 Discretização das Derivadas Temporais

As derivadas temporais foram aproximadas a partir de esquemas explícitos, que apesar de possuírem maiores restrições de estabilidade, são fácil de serem implementados em computação paralela. Considera-se então uma equação de conservação do tipo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = R(\phi^n), \quad (4.4)$$

em que  $\phi$  é a variável dependente e  $R(\phi^n)$  é o somatório de todos os termos que não incluem a derivada temporal, incluindo possíveis termos fontes e as derivadas espaciais discretizadas. A discretização temporal explícita mais simples é o esquema de Euler explícito (FORTUNA, 2000), que para esta equação é definida por

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t * R(\phi^n), \quad (4.5)$$

A utilização combinada dos métodos de Euler explícito e esquemas de segunda ordem centradas para derivadas espaciais configuram o Método FTCS apresentado em Pletcher *et al.* (PLETCHER et al., 2012), constituindo um esquema numérico de primeira ordem no tempo e segunda no espaço.

Entretanto, tendo em vista que o fenômeno da turbulência é intrinsecamente transiente, em que as grandezas instantâneas variam ao longo do tempo em torno de uma média (MÖLLER; SILVESTRINI, 2004) a utilização de um esquema de primeira ordem (que possui características dissipativas) para as derivadas temporais introduz erros numéricos na solução. O caráter dissipativo dos esquemas de primeira ordem amortecem as flutuações, podendo retardar ou anular efeitos de transição como os que ocorrem em jatos.

Portanto, tratando-se de escoamentos turbulentos, recomenda-se a utilização de um esquema numérico cuja ordem do erro em relação ao tempo seja no mínimo dois

(PLETCHER et al., 2012). Com o objetivo de aumentar a ordem do esquema temporal foi utilizado um esquema multi-estágios do tipo Runge-Kutta. Segundo Blazek (BLAZEK, 2015) estes esquemas explícitos são computacionalmente baratos, consomem pouca memória e ainda apresentam a vantagem de que podem ser empregados com qualquer esquema de discretização espacial.

O esquema multiestágio utilizado neste trabalho é um método Runge-Kutta com baixo armazenamento, apresentado em Blazek (BLAZEK, 2015), dado por

$$\begin{aligned}
 \phi_0 &= \phi^n \\
 \phi_1 &= \phi_0 + \alpha_1 \Delta t * R(\phi_0) \\
 \phi_2 &= \phi_0 + \alpha_2 \Delta t * R(\phi_1) \\
 &\vdots \\
 \phi^{n+1} &= \phi_m = \phi_0 + \alpha_m \Delta t * R(\phi_{m-1})
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

em que os coeficientes  $\alpha_m$  são os coeficientes de cada estágio, e  $m$  o número de estágios. A partir da utilização de coeficientes adequados podemos alterar ou a ordem do erro da integração temporal ou a região de estabilidade do esquema (BLAZEK, 2015). Os trabalhos de Hu *et al.* (HU et al., 1996) e Allampalli *et al.* (ALLAMPALLI et al., 2009) apresentam uma discussão sobre o procedimento para a determinação e otimização dos coeficientes para o método Runge-Kutta.

A Tabela 4.1 apresenta os coeficientes propostos por Blazek (BLAZEK, 2015). As soluções obtidas com esquemas Runge-Kutta neste trabalho empregaram esquemas de segunda ordem e 3 estágios. Com o objetivo de acelerar a obtenção do regime estatisticamente estacionário, foi implementada uma metodologia para passo de tempo variável, conforme será discutido na seção 4.6.

Dessa forma, o arranjo numérico proposto e utilizado consiste de esquemas centrais de segunda ordem para as derivadas espaciais advectivas e difusivas, e de segunda ordem explícito para as derivadas temporais.

TABELA 4.1. Coeficientes do método Runge-Kutta para erro de truncamento de segunda ordem, de Blazek (2015).

Número de estágios	3	4	5
CFL	0.69	0.92	1.15
$\alpha_1$	0.1918	0.1084	0.0695
$\alpha_2$	0.4929	0.2602	0.1602
$\alpha_3$	1.0000	0.5052	0.2898
$\alpha_4$	0	1.0000	0.5060
$\alpha_5$	0	0	1.0000

## 4.5 Tratamento da Pressão

O tratamento do termo de pressão é uma das etapas mais complexas na solução das equações de Navier-Stokes. A dificuldade se deve ao fato da pressão ter grande influência nas equações do movimento e não existir uma equação de conservação específica para a sua avaliação a cada passo de integração. Verifica-se também que para escoamentos a baixo número de Mach, como os do presente estudo, a equação da continuidade não tem uma variável dominante, de modo que configura-se apenas como uma restrição cinemática que o campo de velocidades deve obedecer (FERZIGER; PERIC, 2012; CLÓVIS, 1995).

Uma equação de Poisson para a pressão derivada a partir do divergente das equações de conservação da quantidade de movimento é normalmente utilizada para a avaliação do campo de pressão, tanto em métodos explícitos quanto em métodos implícitos. Ferziger (FERZIGER; PERIC, 2012) observa que a utilização da equação de Poisson não deve ser feita de forma independente, é preciso que ela seja consistente com a conservação da massa.

A literatura especializada já citada apresenta uma grande variedade de métodos para a avaliação correta do campo de pressão. Segundo Fortuna (FORTUNA, 2000) estes métodos podem ser divididos em dois grandes grupos, os explícitos e os implícitos. Embora a utilização de métodos explícitos resulte em restrições no passo de tempo

da marcha temporal, por conta das condições de estabilidade (FORTUNA, 2000), no contexto deste trabalho eles são vantajosos por dois motivos principais. O primeiro é que em função das escalas características da turbulência serem pequenas, ainda que as condições de estabilidade permitissem grandes avanços no tempo isso implicaria na não captura de importantes fenômenos da turbulência que estamos interessados. O segundo encontra-se na facilidade da paralelização de métodos explícitos, que se faz necessária em função da utilização de domínios com elevados números de pontos. Portanto este tipo de método foi escolhido para a solução do problema em estudo.

O cálculo do campo de pressão é realizado mediante o método Sola (*Solution Algorithm*) (HIRT et al., 1975; WILSON et al., 1988), que consiste em um procedimento iterativo para corrigir a pressão em cada célula do domínio em um instante  $n + 1$ , de modo que:

- A pressão de uma célula é aumentada caso exista um fluxo de massa resultante para dentro da célula, ou;

- A pressão de uma célula é reduzida caso exista um fluxo de massa resultante para fora da célula.

A análise do sentido do fluxo de massa resultante é realizado a partir do cálculo da Dilatação

$$D_{it} = \nabla \cdot (\rho \tilde{u}_i) \quad (4.7)$$

Devemos notar que trata-se de um procedimento intrinsecamente iterativo, uma vez que quando ajustamos a pressão de uma célula, e conseqüentemente ajustamos as velocidades (que são alocadas nas faces da célula) para esta nova pressão, com o intuito de corrigir a dilatação de uma célula, também alteramos as dilatações das seis células vizinhas. O procedimento é repetido até que o valor da dilatação em todas as células do domínio estejam abaixo de uma tolerância  $\xi$ .

A seguir apresentaremos o desenvolvimento das equações para correção do campo de pressão e das velocidades. Para simplificar a notação, a partir deste ponto trataremos as três componentes da velocidade como  $u$ ,  $v$  e  $w$ , uma vez que os índices  $i j k$  serão utilizados para indicar posição na malha. Definiremos os termos  $F^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)}$ ,

$G^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)}$  e  $H^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})}$  como:

$$F^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = (\rho u)^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} + \Delta t \left[ -ADVEC^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} + DIFF^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} \right] \quad (4.8)$$

$$G^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)} = (\rho v)^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)} + \Delta t \left[ -ADVEC^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)} + DIFF^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)} \right] \quad (4.9)$$

$$H^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})} = (\rho w)^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})} + \Delta t \left[ -ADVEC^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})} + DIFF^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})} \right], \quad (4.10)$$

em que os termos  $ADVEC^n_{(i,j,k)}$  e  $DIFF^n_{(i,j,k)}$  são dados pelas Eq. A.5 e Eq. A.6 do Apêndice A. Utilizando as Equações 4.8, 4.9 e 4.10, as equações para atualizar as velocidades para uma célula computacional típica, ilustrada na Fig. 4.3 (vide apêndice A) são escritas como:

$$(\rho^n u^{n+1})_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = F^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} - \Delta t \frac{p^n_{(i+1,j,k)} - p^n_{(i,j,k)}}{\Delta x} \quad (4.11)$$

$$(\rho^n u^{n+1})_{(i-\frac{1}{2},j,k)} = F^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} - \Delta t \frac{p^n_{(i,j,k)} - p^n_{(i-1,j,k)}}{\Delta x} \quad (4.12)$$

$$(\rho^n v^{n+1})_{(i,j+\frac{1}{2},k)} = G^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)} - \Delta t \frac{p^n_{(i,j+1,k)} - p^n_{(i,j,k)}}{\Delta y} \quad (4.13)$$

$$(\rho^n v^{n+1})_{(i,j-\frac{1}{2},k)} = G^n_{(i,j-\frac{1}{2},k)} - \Delta t \frac{p^n_{(i,j,k)} - p^n_{(i,j-1,k)}}{\Delta y} \quad (4.14)$$

$$(\rho^n w^{n+1})_{(i,j,k+\frac{1}{2})} = H^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})} - \Delta t \frac{p^n_{(i,j,k+1)} - p^n_{(i,j,k)}}{\Delta z} \quad (4.15)$$

$$(\rho^n w^{n+1})_{(i,j,k-\frac{1}{2})} = H^n_{(i,j,k-\frac{1}{2})} - \Delta t \frac{p^n_{(i,j,k)} - p^n_{(i,j,k-1)}}{\Delta z} \quad (4.16)$$

Uma vez que as velocidades dadas pelas equações 4.11 - 4.16 normalmente não satisfazem a equação da continuidade, elas precisam ser corrigidas.

A idéia é corrigir a pressão para que as velocidades decorrentes deste novo campo de pressão satisfaçam o princípio de conservação da massa. Teremos então um processo iterativo que utiliza uma correção  $\delta P$  para zerar a dilatação  $D_{il}$ . De modo que as equações recursivas para as velocidades que devem produzir uma dilatação nula, são

$$\left[ \rho^n (u + \delta u)^{n+1,k} \right]_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = F^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ p_{(i+1,j,k)} - (p + \delta p)_{(i,j,k)} \right]^{n+1,k} \quad (4.17)$$

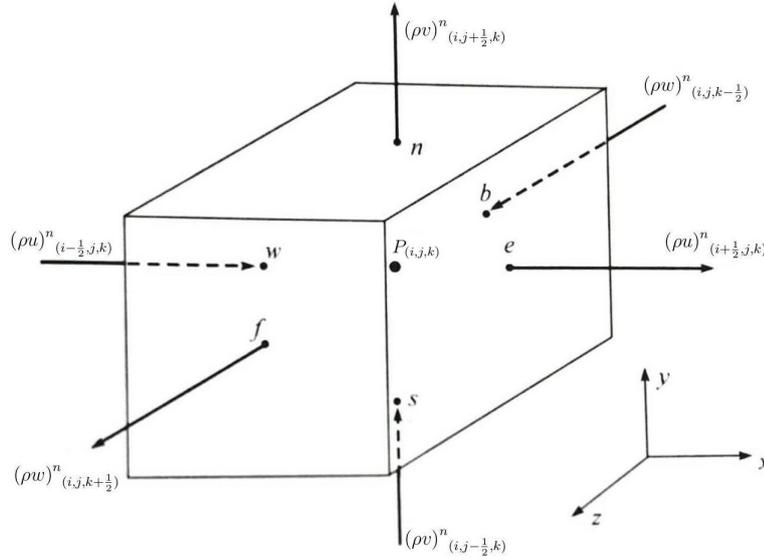


FIGURA 4.3. Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado, adaptado de Fortuna (2000).

$$\left[ \rho^n (u + \delta u)^{n+1,k} \right]_{(i-\frac{1}{2},j,k)} = F^n_{(i-\frac{1}{2},j,k)} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[ (p + \delta p)_{(i,j,k)} - p_{(i+1,j,k)} \right]^{n+1,k} \quad (4.18)$$

$$\left[ \rho^n (v + \delta v)^{n+1,k} \right]_{(i,j+\frac{1}{2},k)} = F^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)} - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[ p_{(i,j+1,k)} - (p + \delta p)_{(i,j,k)} \right]^{n+1,k} \quad (4.19)$$

$$\left[ \rho^n (v + \delta v)^{n+1,k} \right]_{(i,j-\frac{1}{2},k)} = F^n_{(i-\frac{1}{2},j,k)} - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[ (p + \delta p)_{(i,j,k)} - p_{(i,j-1,k)} \right]^{n+1,k} \quad (4.20)$$

$$\left[ \rho^n (w + \delta w)^{n+1,k} \right]_{(i,j,k+\frac{1}{2})} = F^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[ p_{(i,j,k+1)} - (p + \delta p)_{(i,j,k)} \right]^{n+1,k} \quad (4.21)$$

$$\left[ \rho^n (w + \delta w)^{n+1,k} \right]_{(i,j,k-\frac{1}{2})} = F^n_{(i,j,k-\frac{1}{2})} - \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[ (p + \delta p)_{(i,j,k)} - p_{(i,j,k-1)} \right]^{n+1,k} \quad (4.22)$$

Subtraindo as equações sem correções Eqs.4.11 - 4.16 das equações sem correções Eqs. 4.17 - 4.22 tem-se

$$\delta u^{n+1,k}_{(i+\frac{1}{2},j,k)} = \frac{\Delta t}{\rho^n_{(i+\frac{1}{2},j,k)}} \frac{\delta p^{n+1,k}_{(i,j,k)}}{\Delta x} \quad (4.23)$$

$$\delta u^{n+1,k}_{(i-\frac{1}{2},j,k)} = -\frac{\Delta t}{\rho^n_{(i-\frac{1}{2},j,k)}} \frac{\delta p^{n+1,k}_{(i,j,k)}}{\Delta x} \quad (4.24)$$

$$\delta v^{n+1,k}_{(i,j+\frac{1}{2},k)} = \frac{\Delta t}{\rho^n_{(i,j+\frac{1}{2},k)}} \frac{\delta p^{n+1,k}_{(i,j,k)}}{\Delta y} \quad (4.25)$$

$$\delta v^{n+1,k}_{(i,j-\frac{1}{2},k)} = -\frac{\Delta t}{\rho^n_{(i,j-\frac{1}{2},k)}} \frac{\delta p^{n+1,k}_{(i,j,k)}}{\Delta y} \quad (4.26)$$

$$\delta w^{n+1,k}_{(i,j,k+\frac{1}{2})} = \frac{\Delta t}{\rho^n_{(i,j,k+\frac{1}{2})}} \frac{\delta p^{n+1,k}_{(i,j,k)}}{\Delta z} \quad (4.27)$$

$$\delta w^{n+1,k}_{(i,j,k-\frac{1}{2})} = -\frac{\Delta t}{\rho^n_{(i,j,k-\frac{1}{2})}} \frac{\delta p^{n+1,k}_{(i,j,k)}}{\Delta z} \quad (4.28)$$

Impondo que as velocidades corrigidas resultem em uma dilatação nula,  $D_{il} = 0$ , chega-se a

$$\begin{aligned} D_{il}^{n+1,k+1} = & \frac{[\rho^n (u^{n+1,k} + \delta u^{n+1,k})]_{(i+\frac{1}{2},j,k)} - [\rho^n (u^{n+1,k} + \delta u^{n+1,k})]_{(i-\frac{1}{2},j,k)}}{\Delta x} + \\ & + \frac{[\rho^n (v^{n+1,k} + \delta v^{n+1,k})]_{(i,j+\frac{1}{2},k)} - [\rho^n (v^{n+1,k} + \delta v^{n+1,k})]_{(i,j-\frac{1}{2},k)}}{\Delta y} + \\ & + \frac{[\rho^n (w^{n+1,k} + \delta w^{n+1,k})]_{(i,j,k+\frac{1}{2})} - [\rho^n (w^{n+1,k} + \delta w^{n+1,k})]_{(i,j,k-\frac{1}{2})}}{\Delta z} = 0 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Substituindo as correções das velocidades pelas Equações 4.23 - 4.28 no termo da correção de pressão e resolvendo para a mesma chega-se na equação para a correção da pressão:

$$\delta p^{n+1,k+1}_{(i,j,k)} = \frac{-D_{il}^{n+1,k+1}}{2\Delta t \left[ \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right]} \quad (4.30)$$

Devemos notar que o sinal negativo do numerador, que surge matematicamente, indica que a pressão na célula deve ser reduzida quando há um fluxo de massa resultante para fora da célula. De posse do valor que devemos corrigir a pressão em cada ponto

do domínio, podemos então determinar a equação recursiva para avaliação do campo de pressão

$$p_{(i,j,k)}^{n+1,k+1} = p_{(i,j,k)}^{n+1,k} + \delta p_{(i,j,k)}^{n+1,k+1} \quad (4.31)$$

Os campos de velocidade e pressão obtidos quando a dilatação for menor que a tolerância são então utilizados na solução das equações do movimento, para então dar continuidade à marcha temporal.

Uma vez que as velocidades e os valores da massa específica não são armazenados na mesma localização da malha, o seu cálculo requer o uso de interpolações. A descrição detalhada da discretização da dilatação  $D_{il_{i,j,k}}$  é apresentada no Apêndice B.

Pode ser verificado que no procedimento descrito as velocidades são avaliadas em  $n+1$  enquanto que a massa específica em  $n$ . Essa defasagem temporal está alinhada com a estratégia de solução segregada que será descrita na sequência do texto, na seção referente a sequência de solução.

## 4.6 Condição de Estabilidade e Malha

A modelagem da turbulência através da técnica LES é sensível ao refinamento de malha, de modo que à medida que o tamanho do filtro espacial é reduzido, diminui também a porção do resultado que é obtida por modelos submalhas. Como consequência, ocorre uma diminuição do impacto da modelagem submalha sob os resultados obtidos, visto que um maior número de escalas passam a ser resolvidos diretamente pelas equações de Navier-Stokes.

A malha utilizada para o estudo do problema foi do tipo estruturada regular, com distância entre os pontos discretos constante em todas as direções ( $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ ). Este tipo de malha, embora simples e em uma primeira impressão parecer inadequada ou ineficiente, possui algumas características interessantes. Em função da metodologia de filtragem implícita utilizada neste trabalho, conforme descrito na Seção 3.2, o emprego de uma malha com espaçamento regular evita a propagação de

erros devido a variações do tamanho do filtro, como descrito por Piomelli (PIOMELLI, 1999) e demonstrado por Ilyushin e Krasinsky (ILYUSHIN; KRASINSKY, 2006).

A utilização de malhas com espaçamento constante resulta em malhas com elevados números de pontos. A concentração de pontos utilizada nas regiões de gradientes elevados é a mesma das regiões onde os gradientes são suaves. Por outro lado, este tipo de malha torna propícia a utilização de passos de tempos variáveis, por facilitar a análise da condição de estabilidade de *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL).

Esquemas de integração temporal explícitos são instáveis quando são utilizados valores de CFL maiores que seus valores críticos, definidos por

$$CFL = \Delta t \sum_{i=1}^3 \frac{u_i}{\Delta x_i}, \quad (4.32)$$

cujos valores críticos para o método utilizado são listados na Tab. 4.1, no final da Seção 4.4. Portanto o passo de tempo ao longo da marcha temporal do problema pode ser alterado para acelerar a obtenção de resultados estatisticamente estacionários, desde que a condição CFL dada em Eq. 4.32 seja sempre menor ou igual a um valor crítico, neste trabalho admitido como sendo 95% dos valores da Tab. 4.1.

Tomando a Eq. 4.32 e introduzindo as definições dos passos de tempo difusivo ( $\Delta t_{dif}$ ) e advectivo ( $\Delta t_{ad}$ )

$$\Delta t_{ad} = \left( \sum_{i=1}^3 \frac{\Delta x_i}{|u_i|_{\max}} \right) \quad (4.33)$$

$$\Delta t_{dif} = \left( \sum_{i=1}^3 \frac{\Delta x_i^2}{\mu_e} \right)$$

em que  $\Delta x_i$  é o espaçamento da malha na direção  $i$  e  $|u_i|_{\max}$  são as velocidades máximas normalizadas nas respectivas direções  $i$ , chega-se a uma expressão para o  $\Delta t$

$$\Delta t = CFL_{crítico} \left( \frac{1}{\Delta t_{ad}} + \frac{1}{\Delta t_{dif}} \right)^{-1}, \quad (4.34)$$

análogo ao desenvolvido em Damasceno (DAMASCENO et al., 2015). A utilização desta metodologia para a avaliação do passo de tempo conduz a uma sensível redução dos tempo de simulação necessários, comparado ao uso de um passo de tempo fixo.

Devemos observar entretanto que os valores de passo de tempo obtidos são apreciavelmente menores do que os tempos característicos da escala dissipativa Kolmogorov, comportamento semelhante às análises realizadas por Choi e Moin (CHOI; MOIN, 1994).

## 4.7 Tratamento das Condições de Contorno

O sistema de equações formado pelas equações de Navier-Stokes possui elevada não linearidade. Portanto, a utilização de condições de contorno inadequadas pode fornecer uma solução distante da realidade. Fortuna (FORTUNA, 2000) observa que existem muitas aproximações que podem ser utilizadas para limitar o domínio de solução do escoamento sob estudo, mas que ainda não há uma aproximação universal para descrever as fronteiras do domínio computacional que apresente bons resultados em todos os problemas.

Análises de LES realizadas com diferentes modelos submalha tem mostrado que, em muitos casos, não são os modelos sub-malha que têm mais influência sobre a acurácia da solução, mas sim a adequada descrição das condições de contorno da região de entrada do escoamento, e de contorno como um todo, como visto no trabalho de Payri *et al.* (PAYRI *et al.*, 2016). Aumentando o tamanho do domínio computacional podemos reduzir o efeito das condições de contorno nos resultados, em função do efeito de "perda de memória" pela turbulência sobre a estrutura de contorno do escoamento. Por outro lado, tal aumento do domínio computacional resulta, inevitavelmente, em uma maior demanda de recursos computacionais.

Neste trabalho são resolvidas as equações para a quantidade de movimento, sendo aplicada uma metodologia para o cálculo da pressão embasada na equação de conservação da massa. Logo, é necessário a especificação de condições de contorno para cada uma das três componentes de velocidade e para a equação da pressão. A Fig. 4.4 representa esquematicamente a geometria do problema resolvido. Trata-se de um duto de seção quadrada com um duto interno de seção circular concêntrico ao duto externo. Para esta configuração de escoamento, é necessário que sejam especificadas condições de contorno para a entrada e saída do domínio e para as paredes do duto

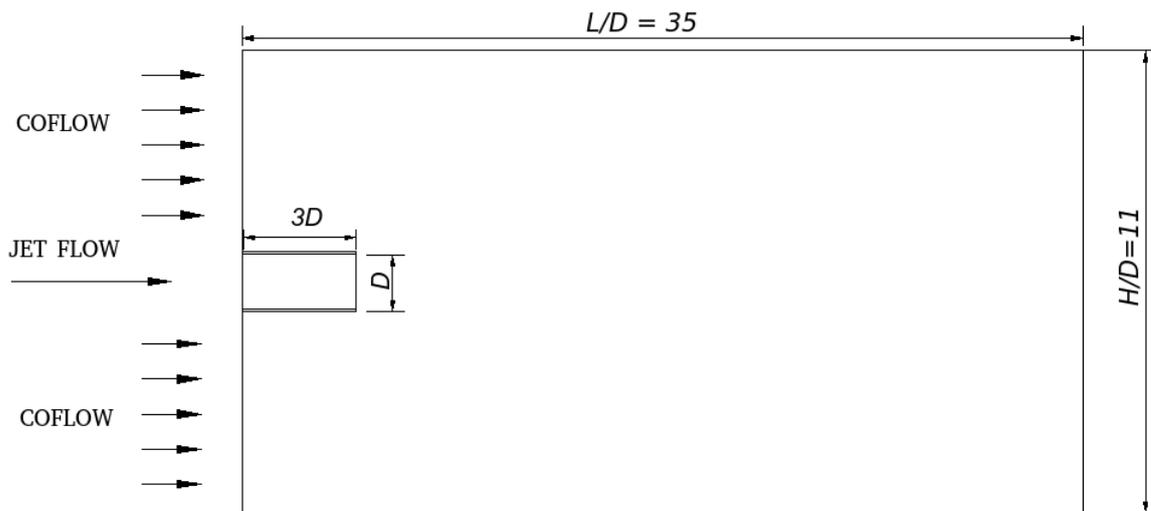


FIGURA 4.4. Esboço da geometria utilizada nas simulações.

externo e injetor, para todas as equações diferenciais parciais resolvidas.

Para as equações de conservação de quantidade de movimento, são definidas condições de contorno de Dirichlet para a fronteira de entrada e para as paredes do duto, ou seja, velocidades são prescritas para a fronteira de entrada e para as paredes dos dutos. No problema experimental de referência as paredes são sólidas e impermeáveis, portanto com velocidades de escoamento nulas, condição conhecida como de não deslizamento e de impenetrabilidade. Para a fronteira de saída, será utilizada uma condição de contorno de Neumann para escoamentos plenamente desenvolvidos, em que admite-se que o fluxo de quantidade de movimento normal a fronteira é nulo

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, \quad (4.35)$$

O detalhamento das metodologias para implementação destas condições de contorno nas equações de conservação da quantidade de movimento será realizado nas próximas duas seções.

Com relação à equação para avaliação da pressão, suas condições de contorno tem origem puramente numéricas. Tal fato se deve a equação para a pressão ser obtida por meio de manipulações matemáticas, de modo que não existem condições de contorno físicas (FORTUNA, 2000). Esse inconveniente para avaliação das condições de contorno para a pressão foi um dos motivos que conduziram a escolha do algoritmo SOLA. Por meio do método SOLA um campo de pressão estimado inicialmente é apenas corrigido para satisfazer a equação da continuidade, não havendo a

necessidade de especificar valores para a pressão em pontos fora do domínio de solução.

### 4.7.1 Condições de Contorno de Entrada

O tratamento das condições de contorno, tanto para entrada quanto para saída do domínio computacional é um tema complexo. A complexidade reside no fato de que as componentes de velocidade nessa fronteira devem possuir uma parcela média e outra parcela estocástica. A componente estocástica é responsável por mimificar a turbulência e de preferência ser de fácil implementação (TABOR; BABA-AHMADI, 2010).

Existem dois procedimentos geralmente usados para tratar as condições de contorno de entrada em escoamentos turbulentos, chamados de técnicas de mapeamento e técnicas sintetizadoras (SAGAUT et al., 2013). Os métodos de mapeamento são do tipo precursor, em que o sinal a ser utilizado como condição de contorno é gerado em outra simulação e armazenado, ou do tipo reciclador, em que as velocidades em um plano distante da entrada são reescaladas e reutilizadas como condição de contorno.

Por outro lado, os métodos sintetizadores utilizam procedimentos estocásticos e restrições físicas para que o sinal produzido possua natureza semelhante à turbulência. Os trabalhos de Tabor e Baba-Ahmadi (TABOR; BABA-AHMADI, 2010), Damasceno (DAMASCENO, 2012) e Montafarno *et al.* (MONTORFANO et al., 2013) apresentam importantes revisões e discussões a respeito da modelagem da condição de contorno de entrada.

A escolha de uma determinada metodologia deve levar em conta o custo computacional, o nível desejado de detalhes e a natureza do problema em estudo (TABOR; BABA-AHMADI, 2010). Ainda nesta direção, Brès e Lele (BRÈS; LELE, 2019) observam que a simulação detalhada do escoamento que ocorre no interior do bocal de um jato pode ser tão complexa quanto o problema objetivo, uma vez que é necessário tratar de forma cuidadosa o problema do escoamento próximo a parede do bocal.

Os resultados de Stanley e Sarker (STANLEY; SARKAR, 2000) mostram que o

desenvolvimento espacial da camada limite de jatos é bastante sensível às condições da entrada, o que vai de encontro com o observado em Bodony e Lele (BODONY; LELE, 2008). Portanto, neste trabalho as análises de desempenho dos modelos sub-malha serão realizadas para duas diferentes modelagens da condição de contorno de entrada. A primeira consiste em definir perfis de velocidades turbulentos plenamente desenvolvido sem flutuações de velocidades. Na segunda, um sinal turbulento é gerado a partir de uma técnica sintetizadora, o filtro digital de Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003), a ser descrito na próxima seção.

Para a fronteira COFLOW (Fig. 4.4), foi definido um perfil plano de velocidades a uma distância de 3 diâmetros do injetor à montante do injetor. Para a região JET-FLOW (Fig. 4.4), utilizou-se um perfil médio de escoamento turbulento plenamente desenvolvido, que para um duto circular é avaliado pela expressão do tipo *power-law* (ABRAMOVICH, 1963):

$$\frac{\tilde{u}(r)}{\tilde{u}_{max}} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/7}, \quad (4.36)$$

em que  $\tilde{u}(r)$  é a velocidade média do escoamento a uma distância  $r$  do centro do injetor,  $\tilde{u}_{max}$  é a velocidade máxima do jato.

#### 4.7.1.1 Método Sintetizador - Filtro Digital

Dentro da categoria dos métodos sintetizadores, o método mais simples consiste na inserção de um ruído branco (um número randômico) sobre uma distribuição média da grandeza que desejamos obter. A partir deste conceito tem-se que as componentes da velocidade para a fronteira de entrada são dadas por

$$u_i = \tilde{u}_i + R_{and} C_R, \quad (4.37)$$

em que  $C_R$  é um coeficiente correspondente a intensidade de turbulência e  $R_{and}$  é um número randômico (entre  $-0,5$  e  $0,5$ ). Caso a energia cinética turbulenta  $k_t$  seja conhecida, é possível reescalonar o sinal turbulento de modo que este possua sempre a energia cinética turbulenta correta,

$$u_i = \tilde{u}_i + R_{u,i} \sqrt{\frac{2}{3} k_t}, \quad (4.38)$$

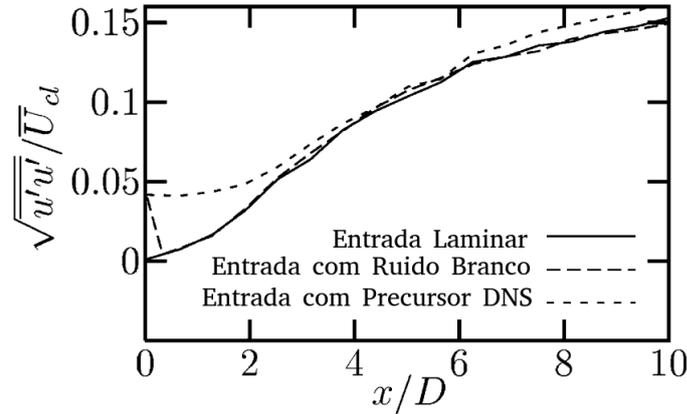


FIGURA 4.5. Resultado da utilização de um sinal de entrada gerado por um ruído branco em um jato plano, adaptado de Klein *et al.* (2003) .

$$k_t = \frac{1}{2} (u'^2 + v'^2 + w'^2), \quad (4.39)$$

$$u_i = \tilde{u}_i + R_{u,i} \sqrt{\frac{1}{3} (u'^2 + v'^2 + w'^2)}, \quad (4.40)$$

sendo  $R_{u,i}$  avaliado a partir das próprias flutuações a serem inseridas no perfil de velocidades médias. Este procedimento gera um sinal randômico capaz de reproduzir a velocidade média e a energia cinética turbulenta.

Entretanto o procedimento acima, apesar ser atraente pela simplicidade de implementação, é ineficiente, uma vez que o sinal gerado não possui nenhum tipo de correlação espacial ou temporal. A falta de correlação espacial resulta em uma distribuição de energia cinética turbulenta de forma igual para toda a faixa de números de onda.

Essa distribuição uniforme de energia sobre todo o espectro de frequências faz com que a parcela de energia cinética turbulenta adicionada aos pequenos números de onda (nos grandes vórtices) seja pequena. Como consequência o escoamento pseudo-turbulento sintetizado é rapidamente laminarizado, como pode ser visto no resultado de Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003) para um jato plano, ilustrado na Fig. 4.5.

Com o objetivo de criar um sinal que possuísse correlações espaciais, Lund *et al.* (LUND *et al.*, 1998) mostrou que a partir do tensor de tensões de Reynolds  $R_{ij}$  é possível aplicar uma transformação ( $a_{ij}$ ) baseada na decomposição de Cholesky para

reconstruir componentes de velocidade correlacionadas

$$u_i = \tilde{u}_i + R_{u,i} a_{ij}, \quad (4.41)$$

em que

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} \sqrt{R_{11}} & 0 & 0 \\ R_{21}/a_{11} & \sqrt{R_{22} - a_{21}^2} & 0 \\ R_{31}/a_{11} & (R_{23} - a_{21}a_{31})/a_{22} & \sqrt{R_{33} - a_{31}^2 - a_{32}^2} \end{pmatrix}, \quad (4.42)$$

Através deste procedimento é obtido um campo de velocidades randômico que produza um tensor de tensões desejado, caso suas características sejam conhecidas, embora ainda sem possuir correlação espacial ou temporal.

Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003) propuseram então a utilização de um filtro digital para inserir no sinal produzido as características da escala dominante. A flutuação de uma componente do campo de velocidades  $u'''(j)$  em um ponto  $j$  é então definida pela convolução

$$u'''(j) = \sum_{k=-N}^N b_k R_{and,mk}, \quad (4.43)$$

em que  $\langle R_{and,mk} \rangle = 0$ ,  $\langle R_{and,mk} R_{and,mk} \rangle = 1$  e  $b_k$  são os coeficientes do filtro.  $N$  é um parâmetro relacionado ao suporte do filtro, conforme definido em seguida. A relação entre os coeficientes do filtro e a função de correlação entre dois pontos é

$$\frac{\langle u'(j) u'(j + mk) \rangle}{\langle u'(j) u'(j) \rangle} = \frac{\sum_{k=-N+mk}^N b_k b_{k-mk}}{\sum_{k=-N+mk}^N b_k^2}, \quad (4.44)$$

A dependência temporal do sinal produzido para o plano da fronteira de entrada  $yOz$  é introduzida pela geração de um sinal randômico tridimensional  $R_{and,mk}(i, j, k)$  para cada componente  $mk$  de velocidade. Os índices do número randômico gerado representam as direções  $x$  (ou o tempo, a partir da hipótese de Taylor de turbulência congelada (MÖLLER; SILVESTRINI, 2004)),  $y$  e  $z$  respectivamente. Um filtro tridimensional  $b_{ijk}$  é obtido a partir da convolução dos três filtros unidimensionais.

$$b_{ijk} = b_i b_j b_k, \quad (4.45)$$

O filtro tridimensional da Eq. 4.45 é utilizada para filtrar  $R_{and,mk}(i, j, k)$  nas três dimensões para então obtermos

$$U_{mk}(1, j, k) = \sum_{i'=-N_x}^{N_x} \sum_{j'=-N_y}^{N_y} \sum_{k'=-N_z}^{N_z} b(i', j', k') R_{and,mk}(i', j + j', k + k'), \quad (4.46)$$

Para garantir que as flutuações de velocidades produzidas reproduzam exatamente a correlação entre dois pontos  $\langle u'(j) u'(j+m) \rangle$ , os coeficientes  $b_k$  devem ser calculados invertendo a Eq. 4.44.

Uma vez que o tensor de tensões raramente é fornecido, Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003) tiveram a idéia de propor que este têm a forma gaussiana e dependente de um único parâmetro, o comprimento de escala  $L_{IN} = n_{mk} \Delta x$ . Assim procedendo, os coeficientes do filtro podem ser calculados de forma analítica como:

$$b_k = \frac{\tilde{b}_k}{\sum_{j=-N}^N \tilde{b}_j^2} \quad (4.47)$$

$$\tilde{b}_k \equiv \exp\left(-\frac{\pi k^2}{2n_{mk}^2}\right), \quad (4.48)$$

Obtido o sinal randômico, pela Eq. 4.47, podemos então calcular a velocidade a ser introduzida na condição de contorno no plano de entrada do domínio

$$u_i = \tilde{u}_i + U_{mk}(1, j, k) a_{ij}, \quad (4.49)$$

Nota-se que o método acima descrito serve para criar um sinal turbulento para um determinado plano, portanto a utilização do mesmo garante somente que seja garantidas as correlações espaciais. Para produzir um sinal que garanta as correlações temporais Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003) e Vedovoto (VEDOVOTO, 2011) sugerem ainda o seguinte procedimento, que pode ser executado simultaneamente à solução do escoamento, ou utilizado para sintetizar um banco de dados para ser empregado a posteriori no contorno de entrada.

1. Calcular os parâmetros  $N_x$ ,  $N_y$  e  $N_z$  a partir do comprimento de escala característico definido  $L$ , de modo que  $L = n_x \Delta x$ ,  $L = n_y \Delta y$  e  $L = n_z \Delta z$ , sendo  $N_{mk} \geq 2n_{mk}$ ,  $mk = x, y, z$ .
2. Criar e armazenar três campos randômicos  $R_{mk}$ ,  $mk = x, y, z$ , de dimensão  $[-N_x : N_x, -N_y + 1 : M_y + N_y, -N_z + 1 : M_z + N_z]$ , em que  $M_y \times M_z$  denota as dimensões da malha no plano de entrada, em  $x = 1$ .
3. Calcular os coeficientes do filtro  $b_{ijk}$  através das Eq. 4.45 e Eq. 4.47.
4. Aplicar a Eq. 4.46 para  $j = 1, \dots, M_y$ ,  $k = 1, \dots, M_z$ , produzindo um vetor bidimensional de  $U_x, U_y$  e  $U_z$  espacialmente correlacionado.

5. Realizar a transformação de coordenadas  $R_{u,i}a_{ij}$  somada a componente média da velocidade, Eq. 4.43.
6. Copiar a velocidade obtida para o plano de entrada,  $u_\alpha(1, j, k)$ ,  $\alpha = x, y, z$ .
7. Descartar o primeiro plano  $y, z$  dos campos randômicos gerados no item 2 e fazer a operação de deslocamento  $R_\alpha(i, j, k) = R_\alpha(i + 1, j, k)$  para  $\alpha = x, y, z$  e então preencher o plano  $R_\alpha(N_x, j, k)$  com novos números randômicos.
8. Repetir os itens de 4 até 7 para cada novo passo de tempo.

A estratégia utilizada neste trabalho para implementar a condição de contorno turbulenta nas fronteiras de entrada foi sintetizar um sinal turbulento através do método descrito e armazená-lo em um banco de dados com 1004 planos de velocidades consecutivos, para então utilizá-lo como condição de contorno. As flutuações de velocidades armazenadas foram então somadas aos perfis de velocidades médios conhecidos para as regiões JETFLOW e COFLOW, descritos na seção anterior. A cada passo de tempo foi introduzido um plano de flutuações de velocidades diferente, de forma consecutiva de 1 até 1004 e a partir de então o plano 1 é utilizado novamente, de forma cíclica, com período de 1004 passos de tempos. O número 1004 foi escolhido por ser o número de pontos da malha na direção preferencial do escoamento.

### 4.7.2 Condições de Contorno de Saída

Quanto às condições de contorno de saída, é importante que as fronteiras do domínio de saída produzam o mínimo de reflexão acústica para o interior do domínio, a qual se manifesta como ondas de pressão. Uma das formas de reduzir a reflexão da fronteira de saída é através da utilização de métodos que dissipam os vórtices próximo ao contorno de saída, formando uma zona esponja (*sponge zone*), como pode ser observado na Fig. 4.6.

Os trabalhos de Bogey e Bailly (BOGEY; BAILLY, 2002), Uzun *et al.* (UZUN *et al.*, 2003) e Bodony e Lele (BODONY; LELE, 2008) apresentam uma interessante discussão sobre diferentes formas de implementar uma zona esponja. Neste trabalho foi

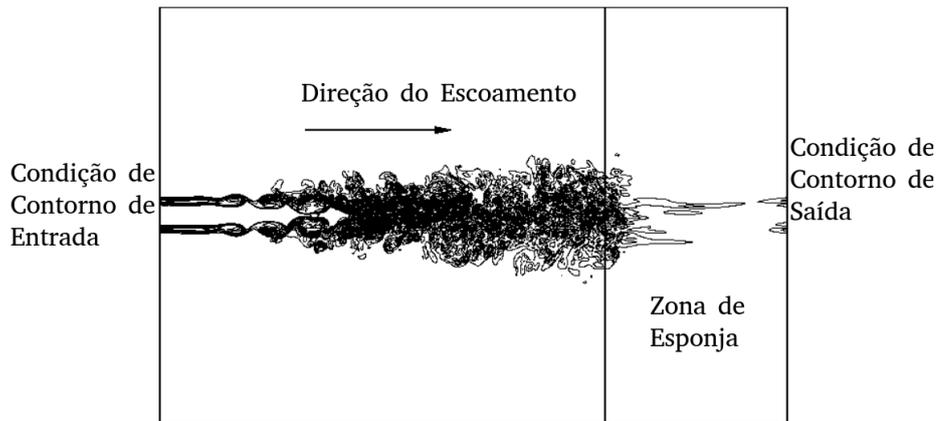


FIGURA 4.6. Ilustração da zona de esponja, adaptado de Uzun *et al.* 2003

implementada uma zona esponja, através da utilização de um modelo submalha puramente dissipativo para a região de saída, sendo escolhido o modelo submalha de Smagorinsky. Esta solução foi empregada por observarmos fortes instabilidades numéricas na fronteira de saída quando utilizados os modelos Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades para calcular a viscosidade submalha nesta região do domínio.

## 4.8 Sequência de Solução

A aplicação das técnicas de aproximação numéricas discutidas no sistema de equações diferenciais parciais que regem o problema físico resulta em um sistema linear de equações algébricas. A solução do sistema de equações resultantes pode ser obtido por diferentes estratégias de solução, as quais podem ser divididas em dois grandes grupos: a estratégia de solução acoplada e a estratégia de solução segregada.

Neste trabalho optou-se por uma estratégia de solução segregada como o objetivo de melhorar a estabilidade da solução numérica (HAFEZ *et al.*, 2010), sem a necessidade da utilização de técnicas de pré-condicionamento. Em uma metodologia de solução segregada, para cada equação do sistema admite-se que existe apenas uma variável desconhecida, como se as demais variáveis estivessem fixas, sem sofrerem

variação simultânea (CLÓVIS, 1995), tratadas como um termo fonte.

$$\begin{aligned} A_u^n u^{n+1} &= B_u^n \\ A_v^n v^{n+1} &= B_v^n \\ A_w^n w^{n+1} &= B_w^n \end{aligned} \quad (4.50)$$

em que os coeficientes  $A$  e  $B$  para a solução das equações são sempre avaliados usando informações em um passo de tempo já resolvido.

O início da marcha temporal requer a estimativa de uma condição inicial. Neste estudo foi utilizada uma estratégia conservadora, em que se admitiu um campo de pressão constante, com valor igual a pressão atmosférica e um campo de velocidades inicial nulo. Embora esta estratégia resulte em um transiente longo, para que ocorra todo o desenvolvimento do jato ela garante que o campo inicial de velocidades seja solenoidal, o que facilita a convergência da solução numérica (FORTUNA, 2000).

A sequência de solução utilizada para a solução do escoamento é a seguinte:

1. Construir uma estimativa para os campos iniciais, (no instante  $t = t_0$ ) para as componentes da velocidade e para a pressão.
2. Conhecido o campo de pressão e os campos de velocidades para o instante  $n$ , calcular (estimar) as componentes da velocidade para o instante  $n + 1$  através da integração da equação de conservação da quantidade de movimento, Eq. 3.23, utilizando o método Runge Kutta de segunda ordem nas suas três direções.
3. Utilizando o algoritmo SOLA, corrigir o campo de velocidades obtido no passo 2 (Equações 4.11 – 4.16) e atualizar o campo de pressão (Equações 4.30–4.31) até que a dilatação (Eq. 4.30) esteja em um valor abaixo da tolerância desejada;
4. Retornar ao passo 2 e repetir o processo até que a marcha temporal alcance o instante desejado.

## 4.9 Metodologia de Paralelização

A solução de escoamentos turbulentos utilizando LES, embora viável, apresenta um elevado custo computacional. Isto se deve principalmente ao fato da turbulência ser um fenômeno intrinsecamente tridimensional, e que devemos usar uma malha pequena o suficiente para que sejam resolvidas uma grande faixa de tamanhos de escalas, sendo modeladas somente as pequenas escalas. Parte-se da hipótese de que nessa ordem de grandeza o comportamento dos vórtices e flutuações de velocidade pouco deve depender das grandes escalas que definem o escoamento. Desta forma, as pequenas escalas possuem um comportamento que tende a ser homogêneo e isotrópico.

Com o objetivo de modelarmos somente as pequenas escalas devemos utilizar um tamanho de malha que seja da ordem da microescala de Taylor. Neste sentido, utilizando a definição de comprimento da microescala de Taylor (Eq. 2.12) e das grandezas características do escoamento a ser resolvido, verifica-se a necessidade de utilizar uma malha da ordem de  $1 \times 10^8$  pontos. Na seção de resultados será apresentada uma análise das escalas para o problema resolvido.

A implementação de um método iterativo envolvendo matrizes deste tamanho tornam a solução do problema desafiadora. Para viabilizar a solução do problema se fez necessário a utilização de técnicas de paralelização e uso de computadores de alto desempenho.

A computação paralela se constitui na utilização simultânea de múltiplos recursos computacionais para resolver um problema. O que se faz é dividir o problema em tarefas que podem ser resolvidas ao mesmo tempo. Em algumas aplicações específicas, os compiladores modernos são capazes de detectar e explorar o paralelismo entre vários processadores de maneira eficiente. Entretanto, na grande maioria das aplicações é preciso que o programador instrua o compilador, sobre quando e onde utilizar ações paralelas, que envolvem a replicação de dados, balanceamento entre carga de execução e comunicação.

De modo a extrair o máximo potencial do hardware disponível o código foi desenvolvido com uma arquitetura híbrida CPU-GPU. Na seção a seguir apresentaremos

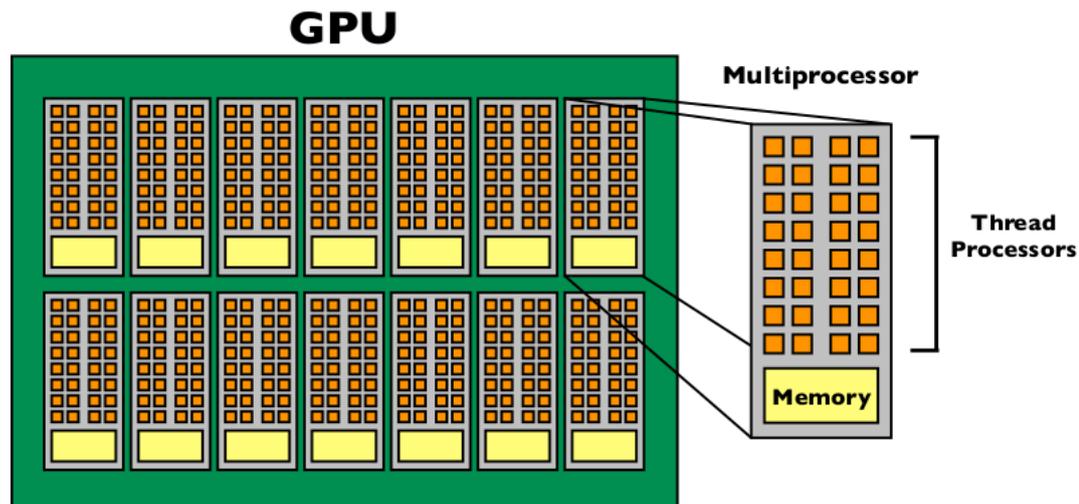


FIGURA 4.7. Representação didática da arquitetura de uma GPU, adaptado de Ruetsch e Fatica (2011).

os fundamentos necessários da implementação CUDA Fortran utilizados para o desenvolvimento do solver. Enquanto que no apêndice C é apresentada uma discussão acerca de diversas técnicas de paralelização dando um enfoque principalmente para a técnica OpenMP que também é utilizada no solver desenvolvido.

### 4.9.1 Paralelização utilizando GPU

A arquitetura das GPU's é baseada em um conjunto de *Stream Multiprocessors*, que chamaremos aqui de multiprocessadores. Os multiprocessadores são constituídos por um número escalável de *threads* definido de acordo com as configurações de determinada execução. A Fig. 4.7 ilustra de forma simplista e didática a arquitetura de uma GPU e de um multiprocessador.

Quando a GPU é invocada para executar um programa, de acordo com a configuração de execução, ela cria um certo número de multiprocessadores, que irão gerenciar um determinado número de *threads*. A execução das *threads* fica a cargo dos *cuda-cores*, que são as entidades que efetivamente realizam o processamento. O número de multiprocessadores criados pela GPU também é definido pelas configurações de execução.

Os multiprocessadores podem executar diferentes conjuntos de instruções, de

forma análoga a uma CPU convencional. Enquanto que as *threads* que compõe um multiprocessador somente executam um mesmo conjunto de instruções definidas pelo *kernel* (nomenclatura para uma subrotina CUDA). Desta forma, as *threads* que compõe um multiprocessador atuam de acordo com o modelo SIMD (*Single Instruction Multiple Data*) definido por Flynn (FLYNN, 1966).

Uma vez que a execução de cada multiprocessador é independente da execução dos demais, enquanto um multiprocessador lança um bloco de *threads* para executar um *kernel* outro multiprocessador pode lançar outro bloco diferente, ou até mesmo igual, de *threads* para executar outro conjunto de instruções. Esta característica de paralelização das GPU's introduziu um novo conceito de programação paralela conhecido como SIMT (*Single Instruction Multiple Thread*).

Ainda com relação a arquitetura das GPU's tem-se que as *threads* que compõe um multiprocessador são organizadas em grupo de 32 *threads* compondo um *warp*. Toda gestão de dados e instruções do multiprocessador com relação as *threads* se dá por meio dos *warps*. Então se faz necessário o programador sempre tentar configurar as execuções de modo a utilizar blocos de *threads* que sejam múltiplos de 32, pois isto tem grande influência no ganho de performance. Os trabalhos (RUETSCH; FATICA, 2011; QUADROS, 2016; GROUP et al., 2018a) apresentam orientações detalhadas sobre como definir as configurações de execução visando uma performance ótima.

CUDA é uma arquitetura de programação paralela desenvolvida com o objetivo de permitir o uso de GPU sem que o programador tenha conhecimento em programação gráfica (RUETSCH; FATICA, 2011; GROUP et al., 2018a). Inicialmente o CUDA surgiu como uma expansão da linguagem C, permitindo a programação direta nas GPUs em linguagem de alto nível.

A partir de um trabalho conjunto da NVIDIA e PGI (*The Portland Group*), a partir de 2010 foi publicado o *CUDA Fortran Compiler* que é um compilador FORTRAN com extensões CUDA capaz de utilizar as GPUs. As extensões permitem a declaração e alocação de variáveis na memória da GPU, cópia de dados entre variáveis do *host* (que é a CPU onde a GPU está instalada) e da GPU, e vice-versa, e a invocação de *kernels* a partir do *host*.



FIGURA 4.8. CUDA Fortran - Um modelo de programação híbrido , adaptado de Hassan (2014).

A programação CUDA Fortran é um modelo de programação híbrida, de modo que parte do código deverá ser executado pela CPU (*host*) e parte será executado pela GPU (*device*). A idéia é que o programador particione o programa em blocos de granularidade grande que possam ser executados em paralelo. Cada bloco então será particionado em outros de pequena granularidade a serem executados pelas *threads* em paralelo, como ilustrado na Fig. 4.8.

Uma vez que a linguagem FORTRAN possui sintaxe bem definida e rígida, a estrutura de um programa escrito em CUDA Fortran desenvolvido para utilizar GPU pouco muda com relação a estrutura de um programa desenvolvido para execução exclusiva em CPU. As similaridades e diferenças básicas são bem evidenciadas pelos trechos de códigos didáticos das Figuras 4.9 e 4.10.

No início do programa principal sempre deve ser invocado o uso do módulo **cudafor**, para que sejam carregadas as variáveis e tipos derivados necessários a utilização das GPUs. Na seção do código dedicada a declaração das variáveis, as variáveis que serão armazenadas na memória da GPU devem ser declaradas, o que é feito com a simples adição do atributo *device* em suas declarações. A alocação das variáveis é realizada da mesma forma, como podemos ver na Fig. 4.9, que mostra um exemplo de código que invoca um *kernel* didático, em que sua função é adicionar a cada posição da variável a soma de seus índices.

As variáveis **grid1** e **tBlock1** foram declaradas como "**dim3**", que é um tipo derivado definido módulo **cudafor** bastante útil para definição das configurações de

```

PROGRAM teste_GPU

USE cudafor
USE kernel teste_GPU
  IMPLICIT NONE

INTEGER,PARAMETER ::ni=200, nj=100, nk=100
REAL(8),DIMENSION(:,:,:), ALLOCATABLE, PINNED ::u
REAL(8),DIMENSION(:,:,:), ALLOCATABLE, DEVICE ::u_d

type ( dim3 ) :: grid1,tBlock1

ALLOCATE (u(ni,nj,nk),u_d(ni,nj,nk))

tBlock1 = dim3(32,2,2)
grid1=dim3(CEILING(real(ni)/tBlock1%x),CEILING(real(nj)/tBlock1%y),CEILING(real(nk)/tBlock1%z))

u=1.d0
u_d=u

CALL kernel_GPU<<<grid1,tBlock1>>>(ni,nj,nk,u_d)

u=u_d

DO k=1,nk
  DO j=1,nj
    DO i=1,ni
      WRITE(*,*)(i+j+k),u(i,j,k)-1
    END DO
  END DO
END DO

END PROGRAM teste_GPU

```

FIGURA 4.9. Programa didático ilustrando um programa CUDA Fortran

execução. A variável **tBlock1** refere-se a definição do tamanho de cada bloco de *threads*, enquanto que a variável **grid1** refere-se a configuração do *grid* de blocos de *threads* que será criado para a execução do *Kernel*. A definição adequada do tamanho do bloco de *threads* tem bastante influência no ganho de performance, visto que uma escolha inadequada pode ocasionar que alguns *cuda-cores* fiquem ociosos durante a execução do *kernel*. Por outro lado a definição adequada do *grid* de blocos de *threads* assegura que seja criado o número mínimo de *threads* necessárias para percorrer todos os índices da variável em cada direção. A movimentação de dados da memória do *host* para o *device* e vice-versa pode ser feita a partir da atribuição direta das variáveis.

A invocação do *kernel* a ser executado na GPU é feito de forma semelhante a chamada de uma subrotina normal de CPU, a não ser pela adição do símbolos  $\lll \mathbf{a}, \mathbf{b} \ggg$ . As variáveis **a** e **b** são as configurações de execução do referido *kernel* e correspondem ao tamanho do *grid* de blocos *thread* e tamanho do bloco de *thread*, respectivamente. Para saber a forma adequada de definir os parâmetros de execução o leitor deve consultar a bibliografia indicada, pois esta explanação sai do escopo deste trabalho.

```

MODULE kernel_teste_GPU
CONTAINS

ATTRIBUTES (GLOBAL) SUBROUTINE kernel_GPU(ni,nj,nk,u_d)
IMPLICIT NONE

INTEGER,VALUE      ::ni,nj,nk           !Variável Global
REAL(8),DIMENSION(ni,nj,nk), INTENT(INOUT)::u_d !Variável Global
INTEGER            ::i,j,k             !Variável muda

i = (blockIdx%x-1)*blockDim%x+threadIdx%x
j = (blockIdx%y-1)*blockDim%y+threadIdx%y
k = (blockIdx%z-1)*blockDim%z+threadIdx%z

IF (i <=(ni) .AND. j <=(nj) .AND. k<=(nk)) THEN

  u_d(i,j,k)=u_d(i,j,k)+i+j+k

END IF

END SUBROUTINE eq_movimento_x_1_GPU

END MODULE kernel_teste_GPU

```

FIGURA 4.10. Kernel didático ilustrando um programa CUDA Fortran

A Fig. 4.10 mostra a sintaxe do kernel criado para executar a operação proposta. Pode-se observar a grande semelhança com uma subrotina convencional de execução em CPU. A diferença maior entre o CUDA Fortran e Fortran está na forma com que cada *thread* identifica os valores dos índices  $i, j, k$  para a execução de um laço. Enquanto que na programação Fortran é utilizado comando **DO**, em CUDA Fortran o que se faz é atribuir o valor dos índices de acordo com a identificação de cada *thread* dentro do bloco de *threads* e a identificação do bloco o qual a *threads* pertence.

O tamanho de cada bloco de *threads* é função do número de pontos que o domínio computacional possui. Entretanto, podem ocorrer situações em que o número de pontos do domínio não é um múltiplo do tamanho do bloco, de modo que se faz necessária a utilização do controlador de fluxo **IF** para evitar que alguma *thread* tente executar as instruções do *kernel* em um ponto fora da malha.

A estrutura do programa desenvolvido para resolver os escoamentos turbulento deste estudo é apresentado de forma esquemática na Fig. 4.11. Como pode ser observado, trata-se de um programa híbrido, em que todas as operações definidas pela cor azul são realizadas pelo *host*, enquanto que as operações em verde são realizadas pelas GPU's.

A parte inicial do programa é realizada no *host*, que é a CPU, mais especificamente, a declaração, a alocação e a inicialização das variáveis. A partir do início do

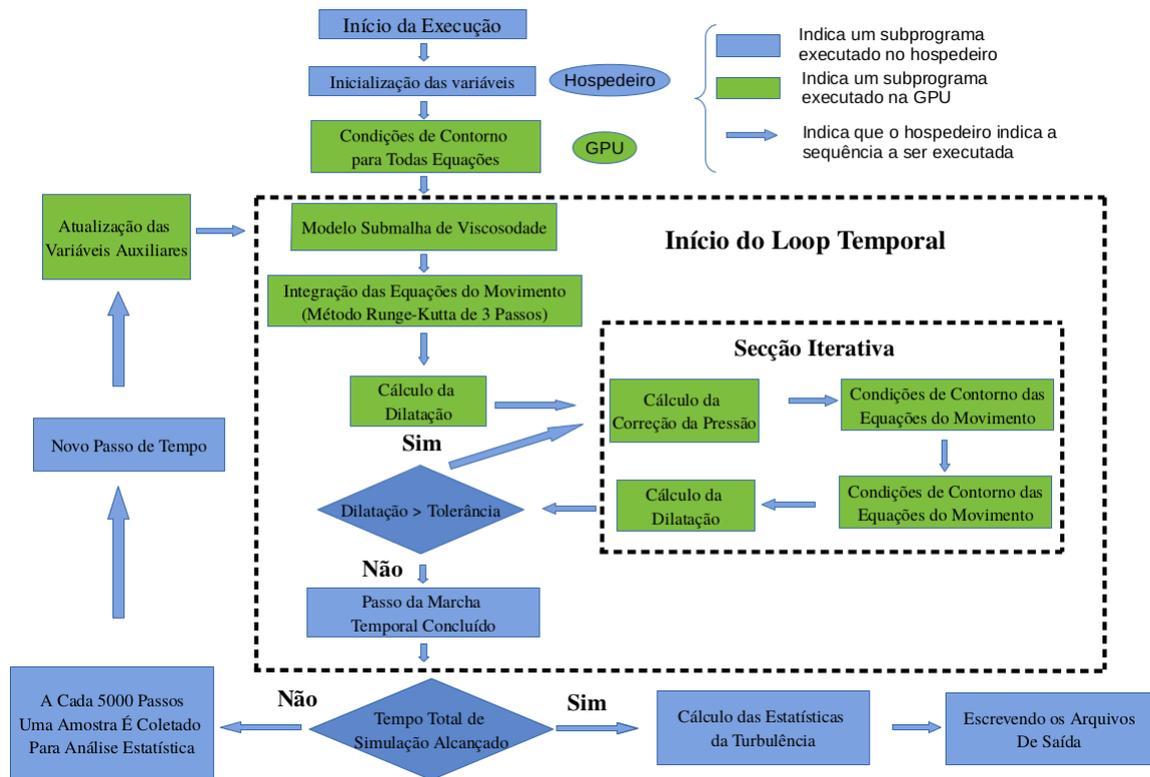


FIGURA 4.11. Fluxograma do código desenvolvido

loop temporal, podemos ver as caixas verdes e as setas que encaminham o fluxo em azul, representando então a característica híbrida do código. Cada caixa verde representa um subprograma (um *kernel*), que é executado pela GPU, mas a sequência de invocação e as eventuais sincronizações necessárias são todas executadas pela CPU. Após o loop temporal, a geração dos arquivos de saída foi realizada somente pela CPU.

## 4.10 Definição do Problema Teste e Malha

A escolha do problema teste foi realizada de acordo com as sugestões de Morgans *et al.* (MORGANS *et al.*, 1999):

1. Disponibilidade de dados experimentais, referentes a características do perfil de velocidade e características da turbulência no contorno.
2. Sensibilidade do escoamento com relação a variações nas condições de contorno, seja calculada ou observada.

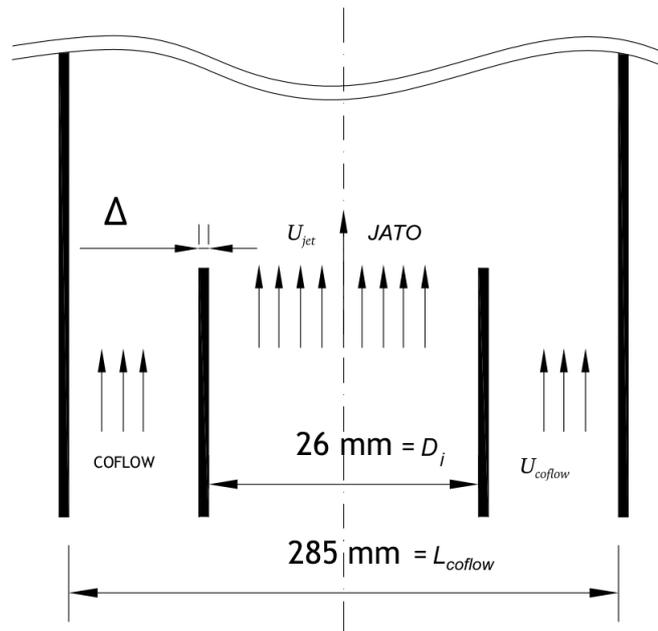


FIGURA 4.12. Comprimentos característicos para a geometria do jato em estudo.

### 3. Viabilidade de obtenção da solução numérica.

Seguindo estas especificações, os estudos experimentais de Amielh *et al.* (AMI-ELH *et al.*, 1996) e Djeridane *et al.* (DJERIDANE *et al.*, 1996) foram escolhidos. Estes trabalhos referem-se ao mesmo experimento e fornecem informações detalhadas dos perfis de velocidades para diferentes configurações de jatos coaxiais turbulentos. A Fig. 4.12 ilustra de forma esquemática a configuração da região de entrada do aparato experimental.

A geometria do bocal do jato é circular e possui um diâmetro interno de  $D_j = 26 \text{ mm}$ , enquanto que a região de entrada do escoamento externo, chamada de *Coflow* possui seção transversal quadrada com comprimento  $L_{coflow} = 285 \text{ mm}$ . Com este arranjo, este jato foi classificado por Amielh *et al.* (AMI-ELH *et al.*, 1996) e Djeridane *et al.* (DJERIDANE *et al.*, 1996) como um jato fracamente confinado, uma vez que a razão entre as áreas de seção transversal  $A_{coflow}/A_{Jato}$  é maior que 120.

Esta última característica é de grande importância para sua utilização como referência em um processo de validação, uma vez que sendo os efeitos de confinamento desprezíveis, podemos considerar que as interações entre o escoamento externo e as paredes do duto externo exercerão pouca ou nenhuma influência na análise realizada.

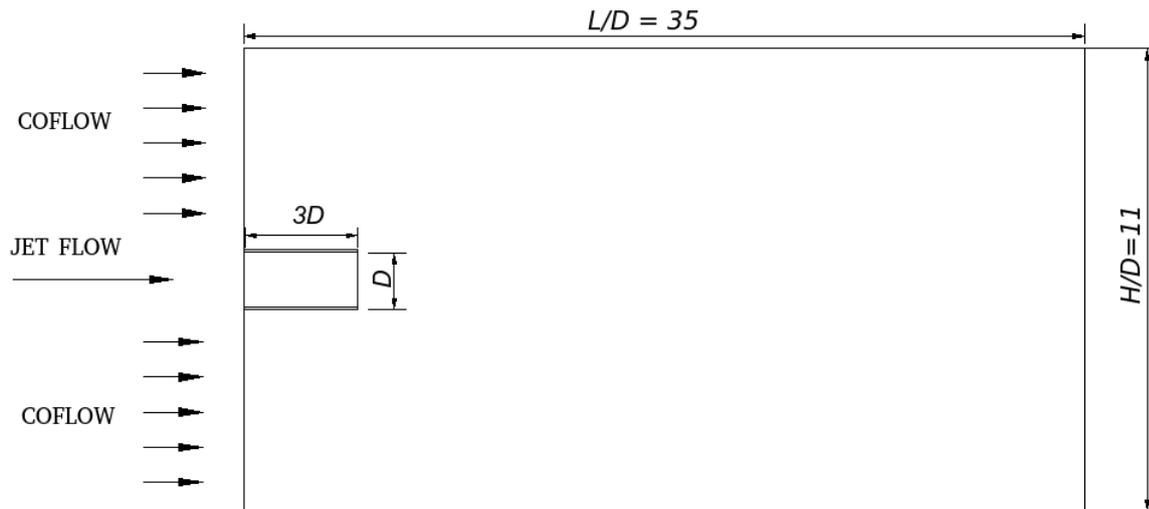


FIGURA 4.13. Representação esquemática da geometria utilizada nas simulações e dimensões características.

Este aspecto é importante de ser considerado, pelo fato do tratamento particular que deve ser dado em LES na região próxima às paredes conforme discutido no Cap. 2, o que poderia aumentar o custo computacional de forma considerável.

A Fig. 4.13 é similar à Fig. 4.4, utilizada anteriormente para explicar os tratamentos empregados para as condições de contorno, repetida aqui para que possamos visualizar de forma mais clara a geometria do experimento e domínio computacional utilizado.

Outra característica importante dos trabalhos de Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996) e Djeridane *et al.* (DJERIDANE *et al.*, 1996) é que além de dados para escoamentos  $AR - AR$  (ar é o fluido do jato interno e do escoamento externo coaxial), são apresentadas medições para configurações de jatos com fluidos com diferentes massas específicas ( $s = \rho_{jet}/\rho_{coflow} \neq 1$ ). As outras condições experimentais para as quais são apresentados resultados detalhados são jatos  $CO_2-AR$  ( $s = 1,5$ ) e  $He-AR$  ( $s = 0,14$ ), os quais serão utilizados em trabalhos futuros para estudos de sensibilidade em relação a modelagem do fluxo escalar submalha.

Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996) e Djeridane *et al.* (DJERIDANE *et al.*, 1996) mencionam que em todos os experimentos foram utilizados acessórios na instalação que garantiam que, tanto o escoamento na região de entrada do jato como na região de entrada do *coflow*, já se encontrassem plenamente desenvolvidos, sendo a intensidade

TABELA 4.2. **Velocidades características do experimento e propriedades termofísicas do fluido.**

Jato	$U_{jet} [m/s]$	$U_{coflow} [m/s]$	$\rho [kg/m^3]$	$\mu [Pa \times s]$
AR-AR	12,00	0,090	1,225	$1,82 \times 10^{-5}$

TABELA 4.3. **Números adimensionais de interesse**

Jato	$Re_j$	$L_K^*$	$\tau_K^*$	$L_\lambda^*$	$\tau_\lambda^*$
AR-AR	20650	$5,77 \times 10^{-4}$	$6,92 \times 10^{-5}$	$2,19 \times 10^{-2}$	$2,68 \times 10^{-2}$

de turbulência observada em 4%. Para a configuração de interesse neste trabalho (o experimento *AR – AR*), as velocidades e propriedades do escoamento, assim como os números adimensionais de interesse são apresentados nas tabelas 4.2 e 4.3, respectivamente.

Os parâmetros adimensionais apresentados na Tab. 4.3 são calculados a partir dos parâmetros descritos na Tab. 4.2, onde  $U_{jet}$  indica a velocidade de injeção do jato e  $U_{coflow}$  a velocidade média de injeção do escoamento *coflow*. Os parâmetros  $L_K^*$  e  $\tau_K^*$  são o comprimento e tempo relativos à escala dissipativa de Kolmogorov, os quais deveriam ser utilizados para a obtenção de uma solução do tipo DNS. Já os parâmetros  $L_\lambda^*$  e  $\tau_\lambda^*$  referem-se a micro escala de Taylor, os quais são uma estimativa conservadora para o tamanho do filtro de malha em LES (SAGAUT, 2006).

A definição da malha computacional utilizada nas simulações se deu tomando como base a ordem de grandeza de  $L_\lambda^*$  e a capacidade computacional de uma placa GPU Nvidia Tesla K40 GPU do Cluster SDumont, do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC). A descrição detalhada dos recursos computacionais utilizados será realizada na Seção 5.4. As características do domínio e malha computacional utilizados nas simulações para a análise do impacto da modelagem submalha e da condição de contorno na entrada são descritos na Tab. 4.4. A Fig 4.14 mostra a região próxima ao injetor para uma das malhas utilizadas.

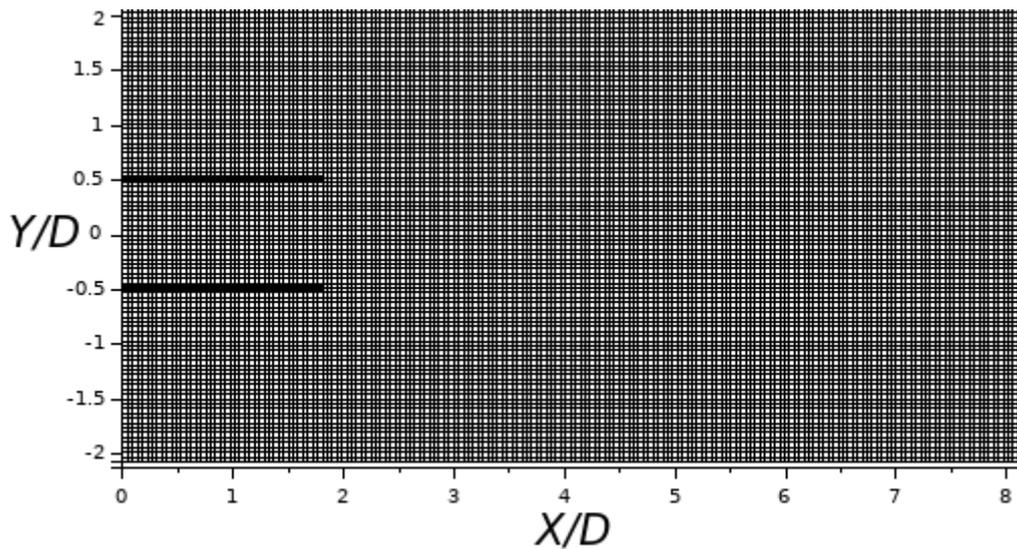


FIGURA 4.14. Detalhe da malha regular próximo ao injetor.

TABELA 4.4. **Características da malha estudada.** ( $N_x$ ,  $N_y$  e  $N_z$  são os números de pontos nas direções  $x$ ,  $y$ , e  $z$ , respectivamente.)

$L/D \times H/D \times H/D$	$N_x$	$N_y$	$N_z$	$\Delta$	Nº de pontos
$35 \times 11 \times 11$	1004	317	317	$3,49 \times 10^{-2}$	100890956

## 4.11 Planejamento das Simulações

Os objetivos desta tese são estudar os efeitos da utilização de diferentes modelos para o tensor de tensões submalha (modelo de Smagorinsky, Modelo Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades) e avaliar a sensibilidade destes à diferentes modelagem da condição de contorno na fronteira de entrada em LES de jatos turbulentos coaxiais. Para alcançar estes objetivos, foi planejada a realização de dois grupos de simulações, GRUPO1 e GRUPO2. Os resultados de ambos os grupos de simulações são comparados com dados experimentais e resultados disponíveis na literatura para o mesmo problema teste.

Os dois grupos foram definidos com o objetivo de isolar o efeito da utilização de diferentes condições de contorno na entrada, portanto a diferença entre os grupos GRUPO1 e GRUPO2 consiste na utilização de uma condição de contorno de entrada sem a descrição das flutuações turbulentas no primeiro caso, enquanto uma condição de contorno de entrada com uma intensidade de turbulência de 4% (conforme dados

experimentais de Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996) e Djeridane *et al.* (DJERIDANE *et al.*, 1996)) é imposta no segundo. As flutuações para as velocidades no contorno de entrada foram criadas utilizando um método sintetizador de turbulência, o filtro digital de Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003).

Dentro de cada grupo de simulações, antes de realizar a comparação entre os três diferentes modelos submalha, foi necessário avaliar o efeito da constante de Smagorinsky na solução do problema teste. Como discutido na Seção 3.4.1, não existe na literatura um consenso sobre um valor universal da constante  $C_s$  para jatos turbulentos. A não existência de um valor único a ser utilizado na prática se deve ao modelo impor ao escoamento uma viscosidade artificial, de modo que o valor de dissipação adequado a ser produzido pelo modelo acaba também sendo função das características dissipativas do arranjo numérico. Para jatos turbulentos, tipicamente utiliza-se na literatura valores de  $C_s$  na faixa de 0,055-0,170, como discutido na Seção 3.4.1.

Neste trabalho inicialmente foram utilizados valores para a constante  $C_s$  na faixa de 0,10 – 0,12, conforme a sugestão de Kuo e Acharya (KUO; ACHARYA, 2012) para escoamentos cisalhantes. Entretanto, verificamos que as instabilidades de Kelvin-Helmholtz, responsáveis pelos primeiros vórtices que avançam na direção preferencial do escoamento degenerando-se em turbulência, eram dissipadas rapidamente. Então, de modo a reduzir o efeito dissipativo do modelo, a faixa de  $C_s$  utilizado foi reduzida para 0,055 – 0,070, contemplando os valores mínimos recomendados na literatura (FERZIGER; PERIC, 2012). Para ilustrar esse efeito, a Fig. 4.15 apresenta as discrepâncias observadas no perfil de velocidade adimensional ao longo da linha axial central, provocadas pela utilização de  $C_s = 0,120$  (após  $1 \times 10^6$  passos de tempo, utilizando como condição inicial uma simulação desenvolvida com  $C_s = 0,060$ ), resultantes do excesso de dissipação.

O solver desenvolvido para as análises foi batizado como PMLES (*Pinho Muniz Large Eddy Simulation*) e ao longo do seu desenvolvimento foi submetido à diversos procedimentos de verificação para a busca por erros de implementação. Alguns dos principais testes realizados nas etapas de verificação do código são apresentados no Apêndice D. Já a validação do código desenvolvido para simulação de jatos turbulentos, antes de avaliar o efeito de diferentes modelos submalha e condições de contorno,

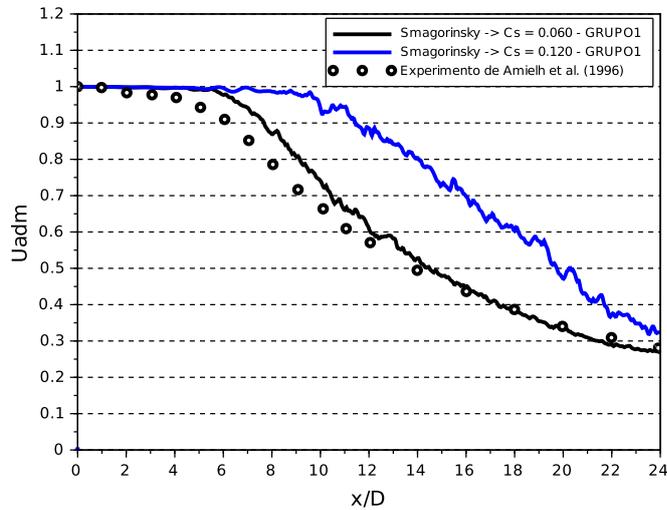


FIGURA 4.15. Perfis de velocidade adimensional ao longo da linha axial em um jato obtidos por diferentes valores da constante de Smagorinsky, demonstrando o excesso de dissipação provocado pelo uso de um valor inadequado para  $C_s$ .

foi realizada utilizando o modelo de Smagorinsky. Para tanto foram conduzidas simulações para o problema teste descrito na seção anterior, utilizando uma condição de contorno para entrada sem flutuações turbulentas e utilizando o modelo submalha para o tensor de tensões de Smagorinsky com  $C_s = 0,065$ . Os resultados desta validação inicial foram publicados na revista *Journal of Applied Fluid Mechanics* (PINHO; MUNIZ, 2020) e encontra-se em anexo no apêndice E.

Portanto cada grupo de simulações possui simulações considerando as formas a seguir de para descrever tensor de tensões submalha:

- Modelo submalha de Smagorinsky, para a constante *ad hoc*  $C_s = 0,055$ ,  $C_s = 0,060$ ,  $C_s = 0,065$  e  $C_s = 0,070$ ;
- Modelo Dinâmico de Germano;
- Modelo Função Estrutura de Velocidade.

Os resultados das simulações realizadas foram comparados com os resultados do experimento de referência de Amielh e colaboradores (AMIELH et al., 1996), com o resultado LES de Wang e colaboradores (WANG et al., 2008), que estudou o mesmo problema experimental, e com a Lei de Similaridade de Chen e Rodi (CHEN; RODI,

1980). As comparações foram realizadas para perfis de velocidades médias e perfis de intensidade de turbulência adimensionais. Para a velocidade média as comparações foram realizadas em termos de duas adimensionalizações frequentemente usadas na análise de jatos turbulentos  $U_{adm}$  e  $U_{sim}$  (AMIELH et al., 1996; CHASSAING et al., 1994; WANG et al., 2008), definidas como

$$U_{adm} = (U_L - U_{coflow}) / (U_{jet} - U_{coflow}) \quad (4.51)$$

$$U_{sim} = (U_{jet} - U_{coflow}) / (U_L - U_{coflow}), \quad (4.52)$$

Enquanto que para a realização das comparações da intensidade de turbulência foi utilizada em termos da intensidade de turbulência adimensional  $u'_{adm}$ , definida como

$$u'_{adm} = u'_{rms} / (U_L - U_{coflow}), \quad (4.53)$$

em que

$$U_L = \frac{\sum_{a=1}^N u_a}{N} \quad (4.54)$$

$$u'_{rms} = \sqrt{\frac{\sum_{a=1}^N (u_a - U_L)^2}{N}}, \quad (4.55)$$

onde  $U_L$  é a velocidade média local (componente axial),  $U_{jet}$  a velocidade de injeção do jato e  $U_{coflow}$  a velocidade de entrada do escoamento externo, ilustradas na Fig. 4.12 e especificadas na Tab. 4.2.,  $u'_{rms}$  é a velocidade *rms* (*root mean square*),  $u_a$  é uma amostra da componente axial da velocidade instantânea e  $N$  o número de amostras para o cálculo de uma velocidade média. Para o cálculo das grandezas médias foram utilizadas 300 amostras, sendo cada amostra de  $u_a$  coletada a cada 10000 passos de tempo, de modo que o valor de  $U_L$  representa uma média para  $3 \times 10^6$  de passos de tempo, que representam 1,137 segundos de simulação.

Em geral as velocidades adimensionais em jatos são expressas em termos da diferença de velocidade entre o jato e o escoamento externo. A utilização da diferença de velocidades ( $U_{jet} - U_{coflow}$ ) como parâmetro de adimensionalização é uma escolha sensata, uma vez que a relação entre as quantidades de movimento do jato e do escoamento externo é o parâmetro dominante no desenvolvimento da dinâmica do jato. Portanto este tipo de adimensionalização acaba sendo indicado por facilitar a comparação de resultados de diferentes jatos (RICOU; SPALDING, 1961; PITTS, 1986). A

adimensionalização  $U_{adm}$  apresenta um resultado intuitivo, de fácil interpretação, uma vez que sua variação indica decaimento ou aumento da velocidade em relação ao jato na entrada. Por outro lado, o parâmetro  $U_{sim}$  permite observar a taxa de decaimento da velocidade. A análise de  $U_{sim}$  facilita a identificação de similaridade entre diferentes jatos.

O cálculo dos perfis médios dos adimensionais descritos acima foi realizado após as simulações terem atingido o regime estatisticamente estacionário. O regime estatisticamente estacionário foi admitido após o cálculo do erro quadrático médio EQM1 de três perfis axiais consecutivos e o desvio destes com relação ao valor médio dos três foi menor do que 5% em ambas as direções da média. O erro quadrático médio para o perfil axial médio de velocidades foi definido em termos de  $U_{adm}$  com relação aos dados experimentais de Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996)

$$EQM1 \left( \widehat{U}_{adm} \right) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \left[ \left( \widehat{U}_{adm} \right)_a - (U_{adm})_a \right]^2 \quad (4.56)$$

em que  $\left( \widehat{U}_{adm} \right)_a$  e  $(U_{adm})_a$  correspondem respectivamente aos valores da velocidade média adimensional na posição "a" e o equivalente mensurado no trabalho experimental.

O erro quadrático médio EQM1 também foi utilizado como métrica quantitativa para comparação entre as simulações realizadas. Com o objetivo de realizar uma comparação quantitativa com relação as características turbulentas resultantes do escoamento foi também definido o erro quadrático médio EQM2. O EQM2 é avaliado em termos da intensidade de turbulência adimensional calculada nas simulações com relação às medições de Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996), de modo que

$$EQM2 \left( \widehat{u}'_{adm} \right) = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \left[ \left( \widehat{u}'_{adm} \right)_a - \left( u'_{adm} \right)_a \right]^2, \quad (4.57)$$

sendo  $\left( \widehat{u}'_{adm} \right)_a$  o valor médio da intensidade de turbulência adimensional local na posição "a" e  $\left( u'_{adm} \right)_a$  o valor equivalente mensurado no trabalho experimental.

Para o cálculo destes  $3 \times 10^6$  passos de tempo, o tempo de simulação é de aproximadamente 144 horas utilizando um nó do Cluster Fermi, instalado no Centro Nacional de Supercomputação (CESUP/UFRGS) e cerca de 432 horas utilizando um nó

do Cluster SDumont localizado no Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC).

Antes de realizar a comparação entre os três diferentes modelos submalha foi necessário avaliar o efeito da constante de Smagorinsky na solução do problema teste e então selecionar o valor da constante  $C_s$  a ser utilizado para comparação com os demais modelos. Como discutido na Seção 3.4.1, não existe na literatura um consenso sobre um valor universal da constante  $C_s$  para jatos turbulentos. A não existência de um valor único a ser utilizado na prática se deve ao modelo impor ao escoamento uma viscosidade artificial, de modo que o valor de dissipação adequado a ser produzido pelo modelo acaba também sendo função das características dissipativas do arranjo numérico. Para jatos turbulentos, tipicamente utiliza-se na literatura valores de  $C_s$  na faixa de 0.055-0.170, como discutido na Seção 3.4.1.

As simulações para os modelos Dinâmico de Germano e modelo Função Estrutura de Velocidades foram iniciadas utilizando o modelo submalha de Smagorinsky. Portanto, o modelo de Smagorinsky foi usado para simular o transiente inicial em todos os casos, devido a sua maior estabilidade numérica e seu mais baixo custo computacional. A substituição do modelo submalha de Smagorinsky para o modelo a ser testado se deu a partir de  $6 \times 10^6$  passos de tempo.

Para a realização das simulações do GRUPO2 foi necessário produzir o sinal turbulento a ser somado aos perfis médios de velocidades do contorno de entrada. A metodologia para geração do sinal turbulento que possua correlações espaciais e temporais foi apresentada na seção 4.7.1.1. Como visto, as únicas informações que precisamos inserir no modelo para obter o sinal turbulento é a intensidade de turbulência  $I_n$  e o comprimento de escala característico para os vórtices na entrada do domínio. Para a intensidade de turbulência foi definido 4% (devido à natureza dos dados experimentais usados na comparação, como já discutido), e o comprimento de escala característico foi definido como  $L_{IN}/D = 1/2$ . A escolha deste comprimento característico, para o tamanho de malha utilizado, resulta em  $N_{mk} = 30$ , que já seria um número de pontos superior a recomendação mínima de Vedovoto (VEDOVOTO, 2011), que é de 10 pontos e próximo à análise realizada por Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003), que é

$L_{IN}/D = 4/6$ . A intensidade de turbulência  $I_n$  utilizada foi definida como

$$I_n = \frac{u'_{rms}}{U_L} \quad (4.58)$$

Utilizando o filtro digital de Klein, foi criado um sinal turbulento com o mesmo tamanho (número de pontos) do domínio computacional utilizado para as simulações do GRUPO2. Estas flutuações nas três componentes de velocidade ao longo da seção transversal são apresentadas na Fig. 4.16. Utilizando a hipótese de turbulência congelada de Taylor (POPE, 2000), a cada instante da marcha temporal um plano adjacente é inserido como condição de contorno. Como foram armazenados somente 1004 planos, a cada 1004 iterações as condições de contorno passam a ser repetidas, o que incorpora à modelagem da condição de contorno um comportamento periódico.

Como consequência da utilização da hipótese de Taylor na modelagem da condição de contorno de entrada não podemos utilizar um passo de tempo variável, por ser incompatível com a hipótese de uma velocidade média transportando as estruturas turbulentas. Portanto, foi utilizado um passo de tempo constante  $\Delta t = 1,75 \times 10^{-4}$ , que corresponde a  $3,79 \times 10^{-7}$  segundos. Este valor atende as restrições de estabilidade tanto para as simulações do GRUPO1 quanto para o GRUPO2, considerando  $CF L_{critico} = 0,69$ , conforme Tab. 4.1.

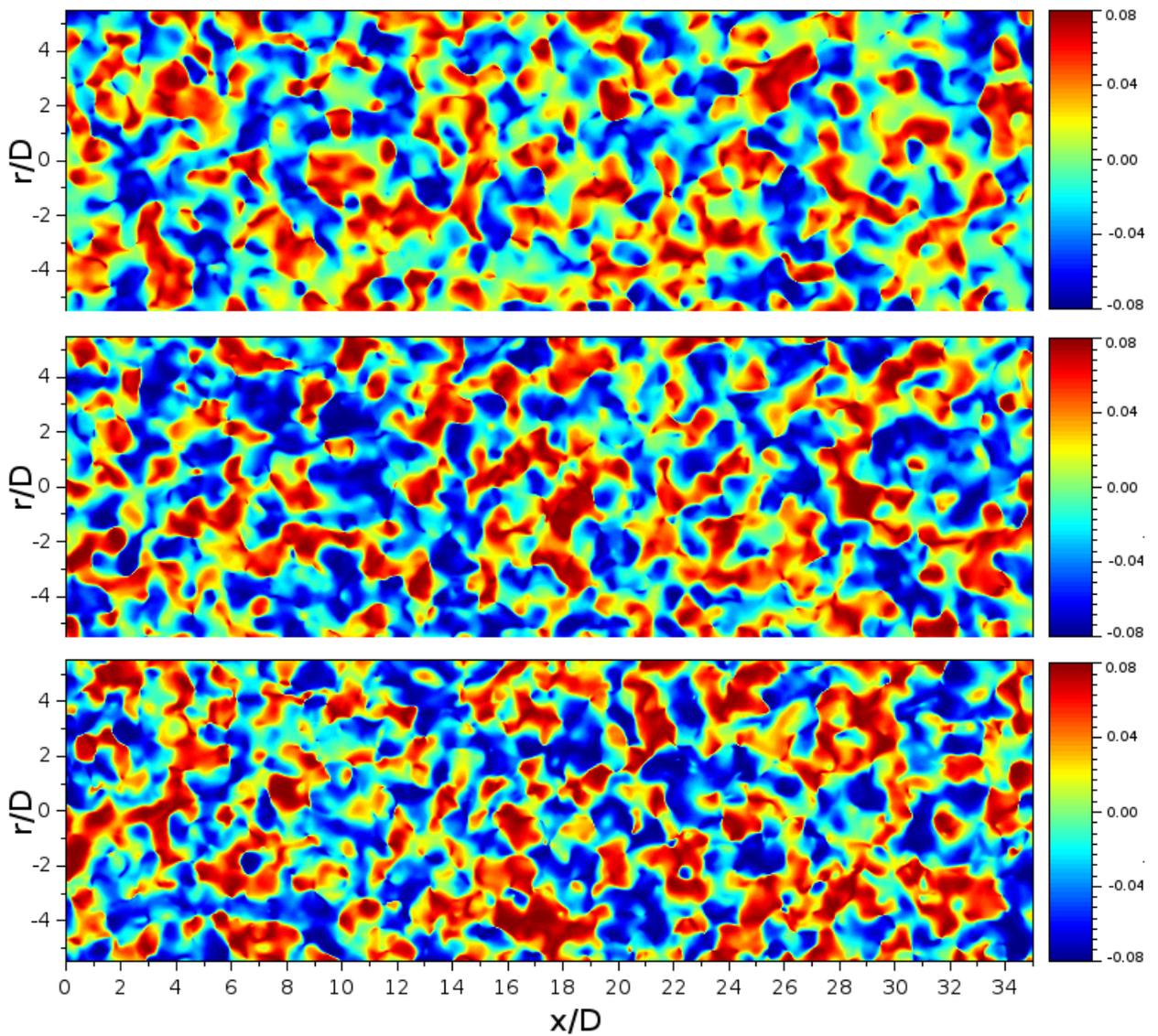


FIGURA 4.16. Campo das flutuações de velocidades produzidas pelo método de Klein *et al.* para um instante " $t$ " para as componentes  $u$ ,  $v$  e  $w$ , respectivamente.



# Capítulo 5

## Resultados

De modo a facilitar o entendimento do problema físico resolvido e do efeito da utilização dos diferentes modelos submalha para o tensor de tensões submalhas, assim como o efeito das diferentes abordagens para descrever as condições de contorno na fronteira de entrada, este capítulo de resultados foi organizado nas seguintes seções:

- Resultados das simulações para o GRUPO1 - análise do coeficiente de Smagorinsky;
- Resultados das simulações para o GRUPO1 - comparação entre os modelos submalha;
- Resultados das simulações para o GRUPO2 - análise do coeficiente de Smagorinsky;
- Resultados das simulações para o GRUPO2 - comparação entre os modelos submalha;
- Análise comparativa do efeito da condição de contorno de entrada (para determinado modelo submalha);
- Ganhos de desempenho;

## 5.1 Resultados das simulações do GRUPO1 - Análise do coeficiente de Smagorinsky

Conforme já descrito, nas simulações do GRUPO1 não são consideradas as flutuações nas condições de contorno de entrada, tanto para a região do jato quanto para a região *coflow*. São apresentados na Fig. 5.1 os campos médios de velocidades, flutuações de velocidades e viscosidade efetiva representativos de simulações com o modelo de Smagorinsky para descrição do tensor de tensões submalha, tomados no plano central ao domínio. Mais especificamente, os resultados desta figura correspondem a um valor de  $C_s = 0,060$ , e não apresentam diferenças qualitativas significativas em relação aos resultados obtidos na faixa de  $C_s$  explorado (portanto não serão mostrados). Enquanto que a Fig. 5.2 apresenta um campo instantâneo da componente axial de velocidades e a Fig. 5.3 o perfil instantâneo da componente axial da velocidade, nas quais pode ser observada a complexidade do escoamento em estudo.

Os campos médios apresentados na Fig. 5.1 permitem observar que os jatos simulados apresentam a estrutura típica esperada e ilustrada na Fig. 2.2, formada por uma zona potencial, uma zona de transição e uma zona completamente desenvolvida. Pode-se a partir destes estimar o comprimento da região potencial prevista (onde as velocidades são mais altas, coloridas em vermelho), e visualizar (do ponto de vista qualitativo) o desenvolvimento da turbulência e o espalhamento do jato à medida em que se afasta do bocal. Entretanto, comparações entre resultados são melhor conduzidas do ponto de vista quantitativo usando perfis unidimensionais, especialmente no que diz respeito a diferenciação da qualidade dos resultados.

A Figura 5.4 apresenta os resultados obtidos para o decaimento da componente axial de velocidade adimensional  $U_{adm}$  ao longo do eixo central do domínio, para os quatro valores de  $C_s$  estudados. Junto aos resultados das simulações também são plotados os dados experimentais reportados por Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996), os resultados numéricos obtidos por LES de Wang *et al.* (WANG *et al.*, 2008) e o resultado obtido pela utilização da Lei de Similaridade de Chen e Rodi (CHEN; RODI, 1980).

Analisando a Fig. 5.4, podemos observar que as curvas para  $C_s \leq 0,065$  são praticamente coincidentes, com pequenas discrepâncias para  $C_s = 0,070$ . Este compor-

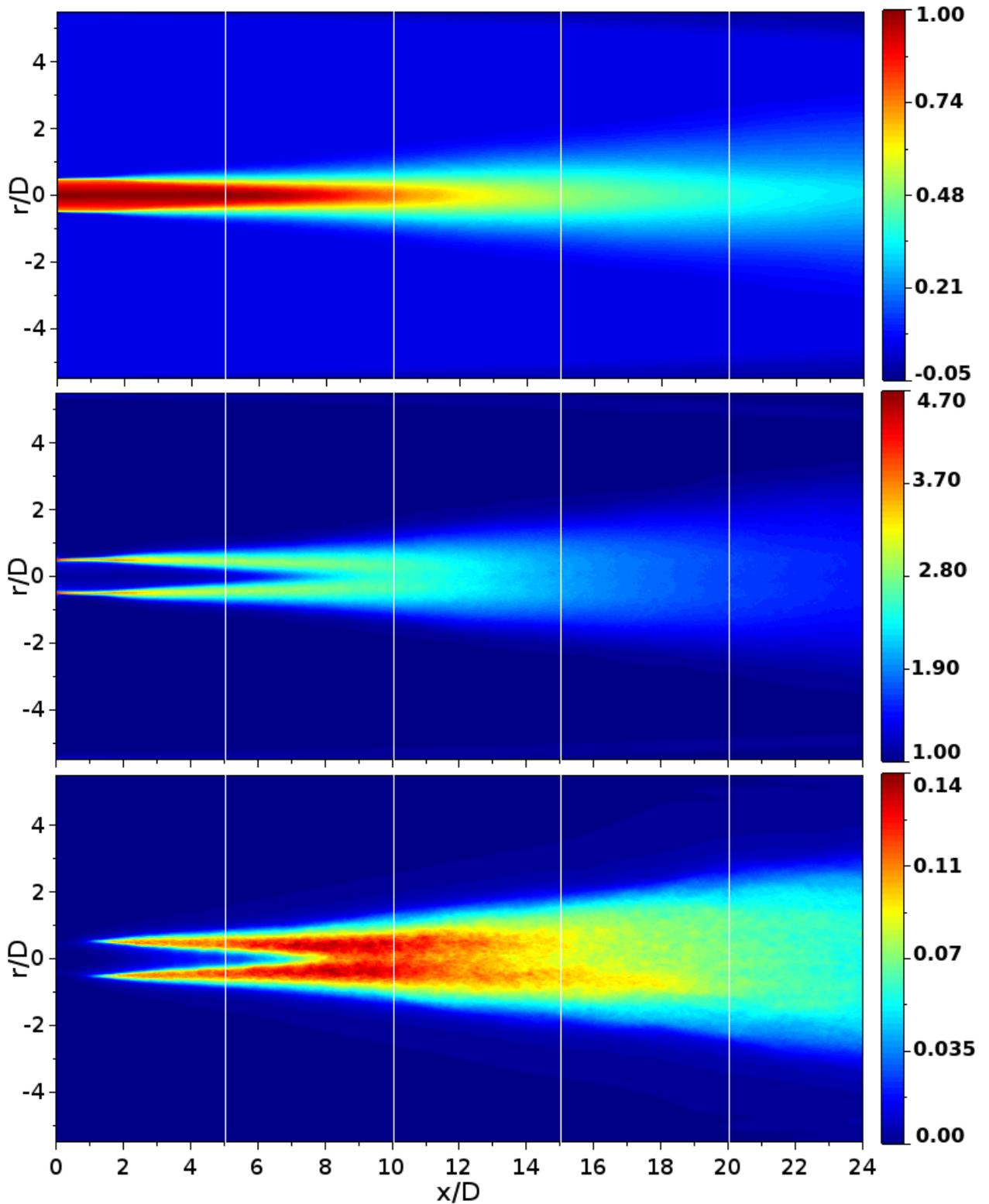


FIGURA 5.1. Campos de velocidade, viscosidade efetiva e flutuações de velocidades tomados no plano central para uma simulação com o modelo de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ).

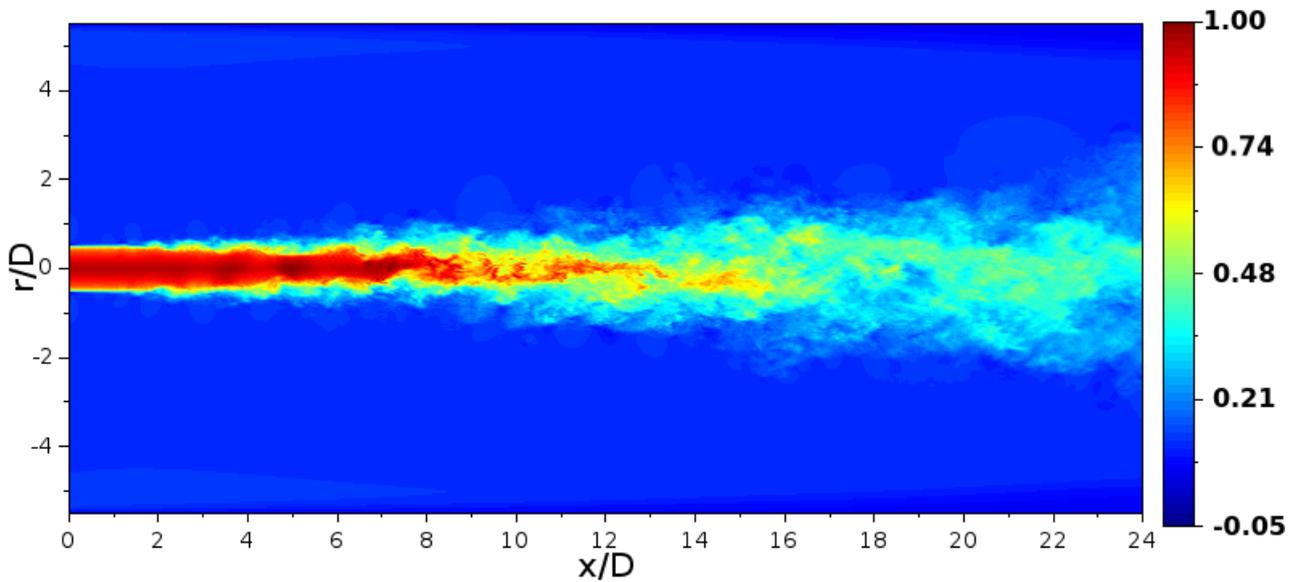


FIGURA 5.2. Campos de velocidade instantânea tomados no plano central para uma simulação com o modelo de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ).

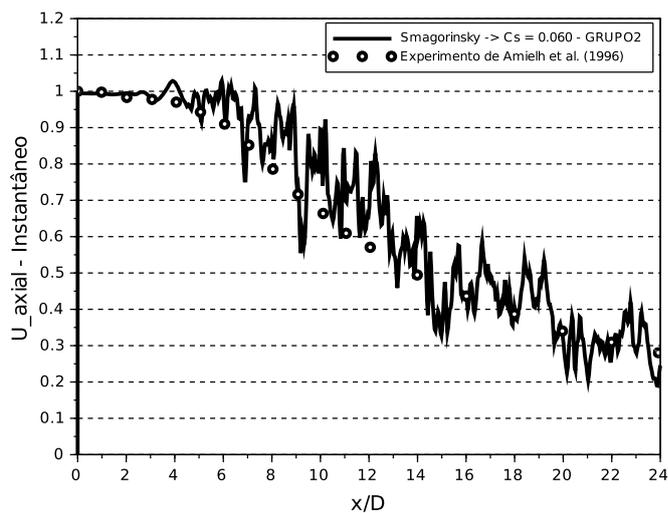


FIGURA 5.3. Perfil instantâneo da componente axial da velocidade obtido com o modelo de Smagorinsky  $C_s = 0,060$ , comparado com dados experimentais de velocidade média.

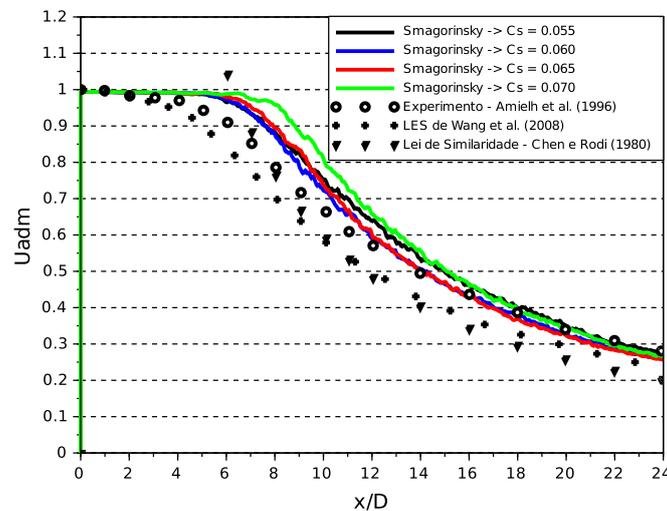


FIGURA 5.4. Perfis axiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados a dados da literatura.

tamento indica que a sensibilidade do modelo submalha de Smagorinsky é pequena para  $C_s < 0,070$  para esta variável. Para  $C_s \geq 0,070$  o tensor de tensões submalha torna-se muito dissipativo, de modo que a transição para a turbulência é atrasada como discutido anteriormente, e visualizado na Fig. 4.15. O atraso na transição se deve a dissipação excessiva das instabilidades de Kelvin-Helmholtz que são responsáveis pela transição de regimes dos jatos coaxiais. Este comportamento também foi observado no trabalho de Hällqvist (HÄLLQVIST, 2006)

A Fig. 5.5 apresenta o mesmo resultado da Fig. 5.4 expresso pela adimensionalização  $U_{sim}$ . Este gráfico evidencia claramente a taxa de decaimento da velocidade na linha de centro e o comportamento assintótico que existe na região de jato desenvolvido. Podemos também observar novamente uma grande concordância entre os resultados obtidos para  $C_s = 0,055$  e  $C_s = 0,060$ , e destes com os valores experimentais para maiores  $x/D$ . Novamente nota-se que na medida em que a constante de Smagorinsky  $C_s$  é aumentada, o comprimento potencial do jato previsto pela simulação também aumenta, evidenciado pelas curvas para  $C_s = 0.065$  e  $0.070$  (em  $x/D \sim 8$ ).

As Figuras 5.6-5.9 apresentam os perfis radiais de  $U_{adm}$  para diferentes distâncias  $x/D$  do bocal (iguais a 5, 10, 15 e 20, marcadas com linhas brancas verticais na Fig. 5.1). Estes resultados mostram que o comportamento da distribuição radial da

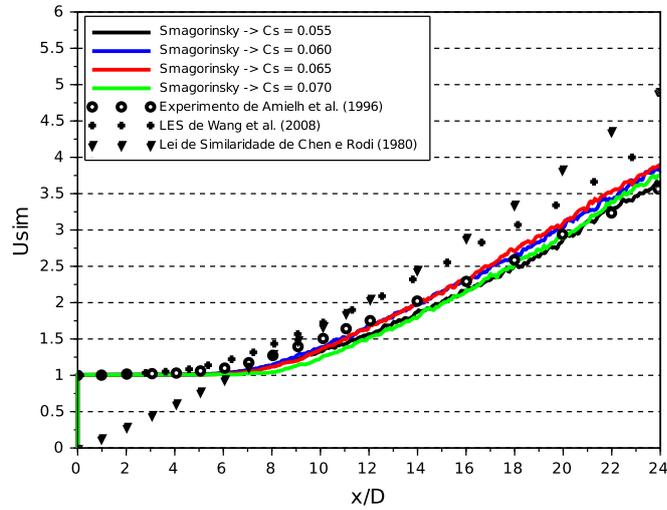


FIGURA 5.5. Perfis axiais de  $U_{sim}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados a dados da literatura.

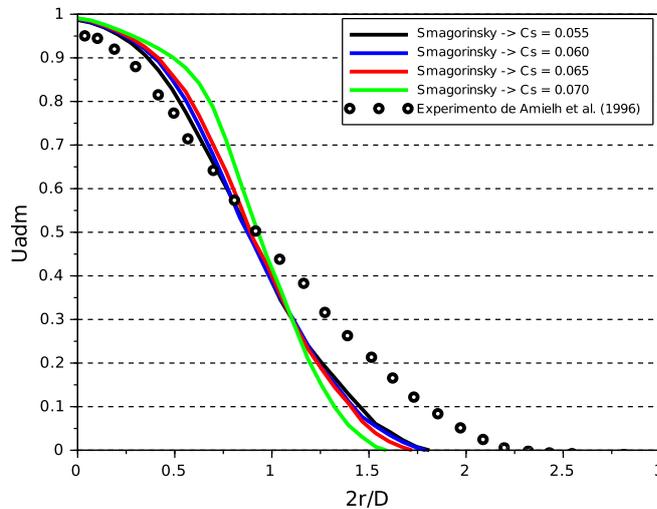


FIGURA 5.6. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 5$ .

velocidade axial é relativamente bem capturado, porém alguns desvios com relação aos resultados experimentais de Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996) são observados, em maior magnitude para seções transversais mais próximas ao bocal do jato (menores valores de  $x/D$ ).

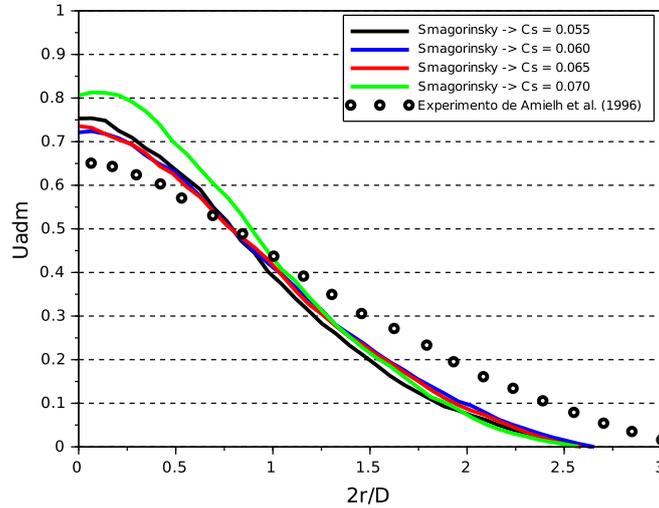


FIGURA 5.7. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 10$ .

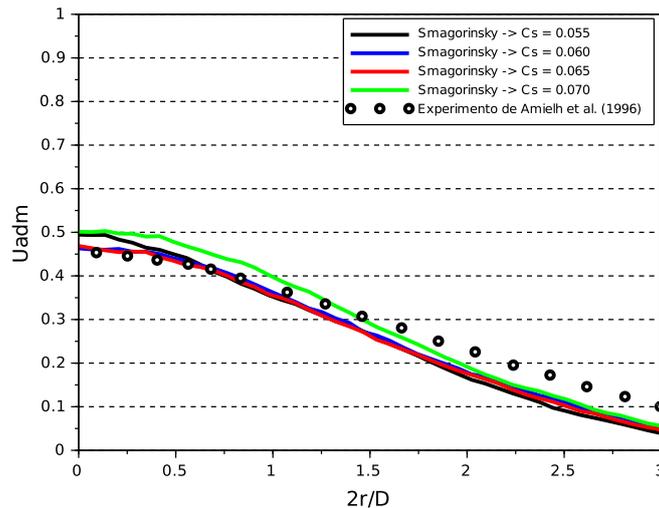


FIGURA 5.8. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 15$ .

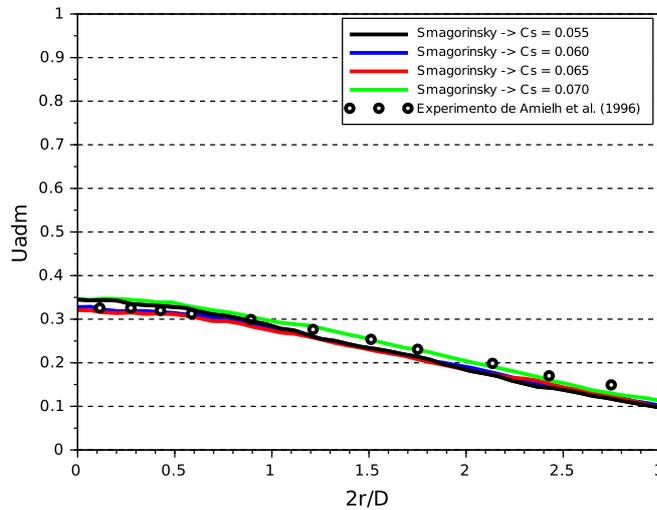


FIGURA 5.9. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 20$ .

A Fig. 5.6 apresenta a distribuição radial da velocidade  $U_{adm}$  na seção transversal  $x/D = 5$ . Pode ser verificado que para maiores distâncias com relação a linha de centro do domínio o desvio foi maior. Os desvios observados neste perfil radial, em  $x/D = 5$ , estão de acordo com os desvios observados para os perfis axiais de velocidade, uma vez que a esta distância do bocal os jatos simulados apresentaram menor espalhamento comparado ao jato experimental, conforme visto na Fig. 5.4. Para as simulações realizadas com os diferentes valores da constante  $C_s$ , verifica-se que as curvas para  $C_s = 0,055$  e  $C_s = 0,060$  são praticamente coincidentes. A curva obtida para  $C_s = 0,065$  é muito próxima destas, enquanto que a curva para  $C_s = 0,070$  apresenta os maiores desvios, pois é a que produziu o jato com maior comprimento potencial.

Deve-se ressaltar que os desvios nos perfis radiais em  $x/D = 5$  (Fig. 5.6) são os maiores observados comparado aos obtidos em diferentes valores de  $x/D$ . Esta observação é consistente com os resultados mostrados nas Figuras 5.4 e 5.5, visto que um atraso no desenvolvimento da região de transição resulta em um menor espalhamento do jato para regiões próximas ao bocal. Levando em conta que o atraso na transição é de comprimento da ordem de 2 diâmetros, seria até estranho que o perfil radial da velocidade axial média apresentasse boa concordância para  $x/D = 5$ . Nesse ponto, o jato experimental já passou da zona potencial para a zona de transição (conforme explicado

na Fig. 2.2), enquanto que para os jatos obtidos nas simulações esta transição está apenas iniciando, portanto estando ainda na zona potencial. Isto provavelmente se deve ao fato de usarmos uma CC laminar na entrada. Portanto estão sendo comparados resultados de jatos que encontram-se localmente em diferentes regimes.

As mesmas tendências descritas acima para a Fig. 5.6 são também observadas para as Figs. 5.7 e 5.8. Entretanto, os desvios entre os dados experimentais e as simulações são menores, uma vez que em  $x/D = 10$  e  $x/D = 15$  tanto o jato experimental quanto os jatos das simulações já se encontram na zona de transição. A Fig. 5.9 apresenta os resultados para a seção  $x/D = 20$ . Percebe-se que a esta distância do bocal os resultados para as quatro simulações que utilizam o modelo de Smagorinsky apresentam bons resultados.

Considerando que as condições de contorno de entrada para as simulações do GRUPO1 são laminares, o solver precisa simular o fenômeno de transição à turbulência como um todo, uma vez que ela não é introduzida com fluido no contorno. No estudo experimental de Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996), o escoamento na saída do bocal é turbulento e completamente desenvolvido, apresentando uma intensidade da flutuação de velocidade da ordem de 4 % do valor de seu valor médio. O efeito da utilização de uma condição de contorno com essas flutuações de velocidades será apresentado nas simulações do GRUPO2 (próxima seção).

A capacidade do método de prever adequadamente a transição à turbulência pode ser também avaliada nas Figs. 5.1 e 5.10. Interessante observar que os perfis obtidos nas simulações são qualitativamente muito similares ao experimental (como se estivessem deslocadas verticalmente para baixo). Após o término da região potencial, há uma acentuada redução no desvio entre  $u'_{adm}$  calculada com relação aos dados experimentais, permanecendo estes abaixo de 10%. Este resultado nos mostra ainda que as menores intensidades de turbulência ocorrem para  $C_s = 0,070$ , uma vez que esta simulação é a que dissipa a maior quantidade de energia cinética turbulenta.

Para realizar a comparação dos resultados obtidos com a utilização do modelo de Smagorinsky com os obtidos por outros modelos submalha, é necessário selecionar os de melhor qualidade considerando os diferentes  $C_s$  utilizados. A escolha da simulação que irá representar o desempenho do modelo de Smagorinsky foi realizada a partir

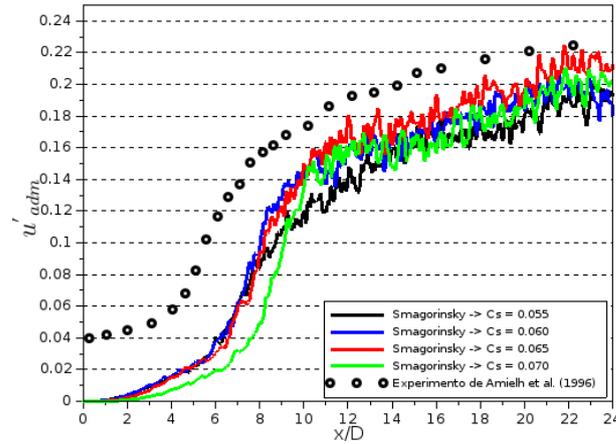


FIGURA 5.10. Perfis axiais de  $u'_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

TABELA 5.1. Comparação entre os erros quadráticos médios produzidos com o uso de diferentes valores da constante de Smagorinsky.

$C_s$	EQM1	EQM2
0,055	0,00287	0,00305
0,060	0,00165	0,00231
0,065	0,00277	0,00248
0,070	0,00647	0,00414

da análise do Erro Quadrático Médio (EQM) dos resultados obtidos. Foram definidos na Seção 4.11 para o perfil axial de velocidades médios adimensional  $U_{adm}$  o  $EQM1$ , e para o perfil de intensidade de turbulência adimensional  $u'_{adm}$  o  $EQM2$ .

A Tab. 5.1 apresenta os valores de  $EQM1$  e  $EQM2$  calculados para os perfis axiais de  $U_{adm}$  e  $u'_{adm}$  plotados na Fig. 5.4 e Fig. 5.10, respectivamente. Verifica-se que os menores valores para  $EQM1$  e  $EQM2$  com relação aos resultados experimentais foram obtidos para  $C_s = 0,060$ . Portanto os resultados da simulação com  $C_s = 0,060$  serão utilizados na próxima seção para comparações do modelo de Smagorinsky com os demais (Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidade), de modo a avaliar o efeito da modelagem submalha nos resultados de LES de jatos turbulentos.

## 5.2 Resultados das simulações para o GRUPO1 - Comparação entre os modelos submalha

Nesta seção são comparados os desempenhos dos diferentes modelos para o tensor de tensões submalha (Smagorinsky, Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades) na simulação do jato. Para iniciar as comparações, são apresentados na Fig. 5.11 os campos de velocidades médios obtidos pela utilização dos três modelos. Estes resultados nos possibilitam realizar uma análise qualitativa do desempenho dos três modelos. Em primeiro lugar, é interessante observar que as simulações realizadas utilizando os três modelos apresentam a estrutura típica de jatos turbulentos - zona potencial, zona de transição e zona completamente desenvolvida - conforme mostrado na Fig. 2.2. Entretanto, embora os três modelos tenham a capacidade de reproduzir a estrutura típica de um jato turbulento, existem diferenças quantitativas significativas entre os resultados produzidos.

Visualmente pode ser observado que o comprimento potencial dos três jatos da Fig. 5.11, (a parte vermelha escura indicando velocidades mais altas e azul indicando as velocidades mais baixas) é similar, terminando próximo a primeira linha branca, em  $x/D = 5$ . Após o término da zona potencial o comportamento resultante da utilização de cada um dos três modelos submalha estudados passa a ser distinto. Nota-se que o jato previsto pelo modelo Dinâmico de Germano é o mais curto, enquanto o jato previsto pelo modelo Função Estrutura de Velocidades produziu o jato mais alongado. Pode ser observado que as velocidades observadas em  $x/D = 10$  na simulação com o modelo de Germano é comparável ao observado em  $x/D = 15$  na simulação realizada com o modelo Função Estrutura de Velocidades. Verifica-se portanto, que o comprimento da região de transição previsto pelo modelo Função Estrutura de Velocidades é cerca de duas vezes maior comparado ao previsto pelo modelo Dinâmico de Germano.

A simulação realizada com o modelo de Smagorinsky produziu um jato com comprimento intermediário. As diferenças entre os resultados obtidos pelos três modelos estão relacionadas às variações observadas no comportamento previsto para a zona de transição do jato, atreladas por sua vez à taxa de espalhamento prevista pela utilização de cada modelo submalha. O espalhamento do jato está relacionado dire-

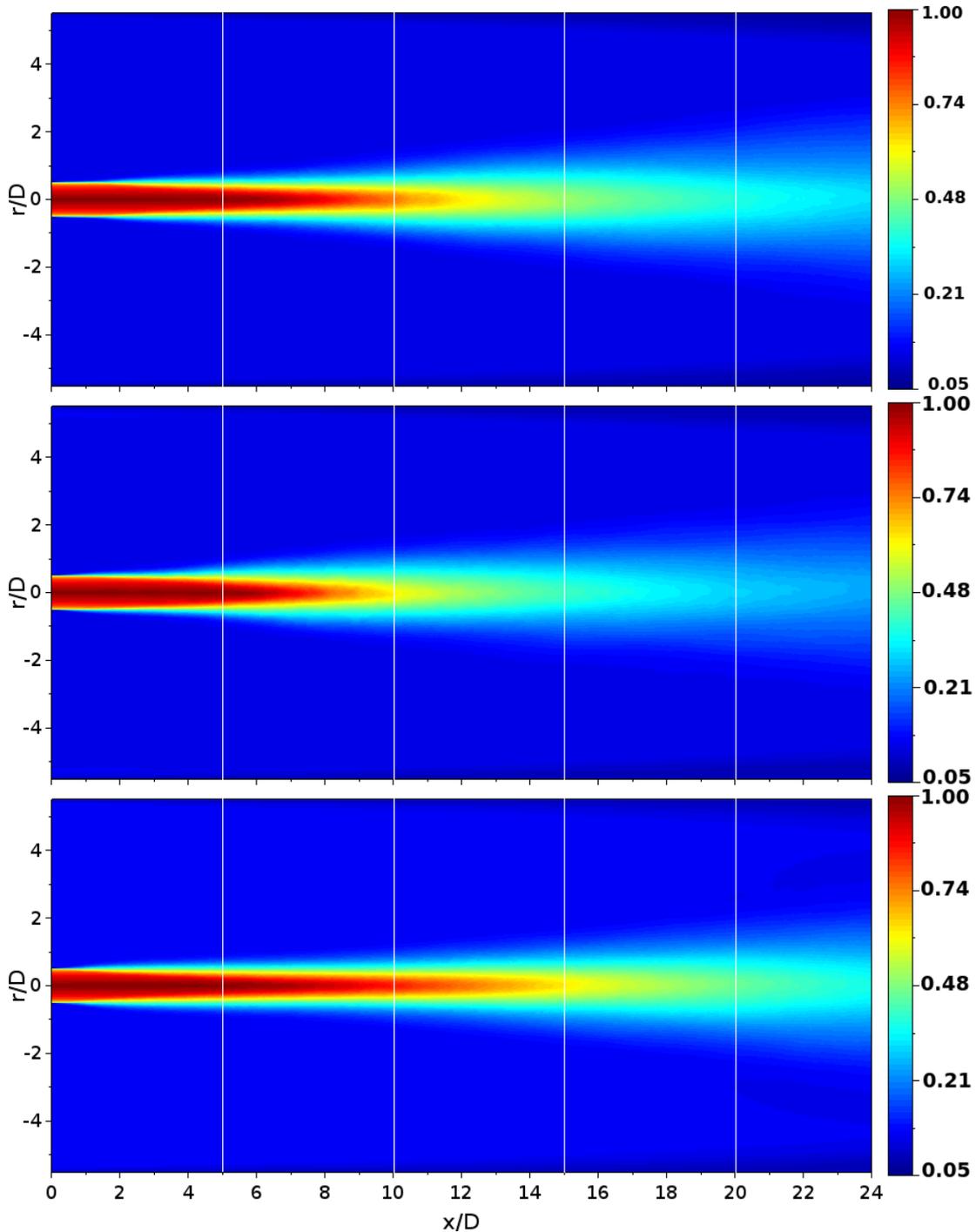


FIGURA 5.11. Campos de velocidade média axial tomados no plano central, obtidos com a utilização dos modelos de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ), Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades, respectivamente.

tamente com o efeito de dissipação, que no sistema de equações se dá no termo de viscosidade efetiva, uma vez que essa é a grandeza responsável pela difusão de quantidade de movimento.

A partir da Eq. 3.26, verifica-se que a viscosidade efetiva  $\mu_e$  é diretamente influenciada pela viscosidade turbulenta  $\mu_t$ . Os campos médios de viscosidade efetiva produzidos por cada um dos modelos analisados são mostrados na Fig. 5.12. Estes campos, analisados em conjunto com os apresentados na Fig. 5.11, mostram que existe uma relação entre a viscosidade efetiva resultante da utilização de determinado modelo e o comprimento potencial do jato. De imediato, pode ser visto na Fig. 5.12 que o campo de viscosidade efetiva produzido pelo modelo de Smagorinsky possui valores absolutos na ordem de duas vezes superior aos obtidos pela utilização do modelo Função Estrutura de Velocidades, e relação semelhante é observada entre os campos obtidos pelo modelo Dinâmico de Germano e o de Smagorinsky.

Verifica-se portanto, que a utilização do modelo Dinâmico de Germano, o mais dissipativo segundo os campos da Fig. 5.12, produziu o jato mais curto, enquanto o jato produzido na simulação com o modelo Função Estrutura de Velocidades (menos dissipativo) foi o mais longo. Já a simulação que utilizou o modelo de Smagorinsky, produziu um campo de viscosidade com intensidades intermediárias aos dois anteriores, resultando em um jato com comprimento intermediário. Portanto, apesar do comprimento potencial dos três jatos simulados ser semelhante, nota-se que após a transição de regime o decaimento de velocidade para o modelo Dinâmico de Germano é mais intenso que para os demais. Deve-se destacar também que os valores máximos para a viscosidade efetiva são observados junto ao final da região potencial do jato em todos os casos.

Outra análise qualitativa interessante pode ser feita a partir da Fig. 5.13, que apresenta os campos das flutuações de velocidade  $u'_{rms}$ . Nestas figuras, o desenvolvimento da turbulência e a degradação do cone potencial podem ser bem visualizados. Além das diferenças na zona de transição para cada modelo submalha, podemos observar uma diferença no comportamento das flutuações de velocidade junto às bordas do bocal. Bodony e Lele (BODONY; LELE, 2008) relatam a importância da modelagem dos bocais em simulações LES por ser uma região que gera reflexão de ondas de

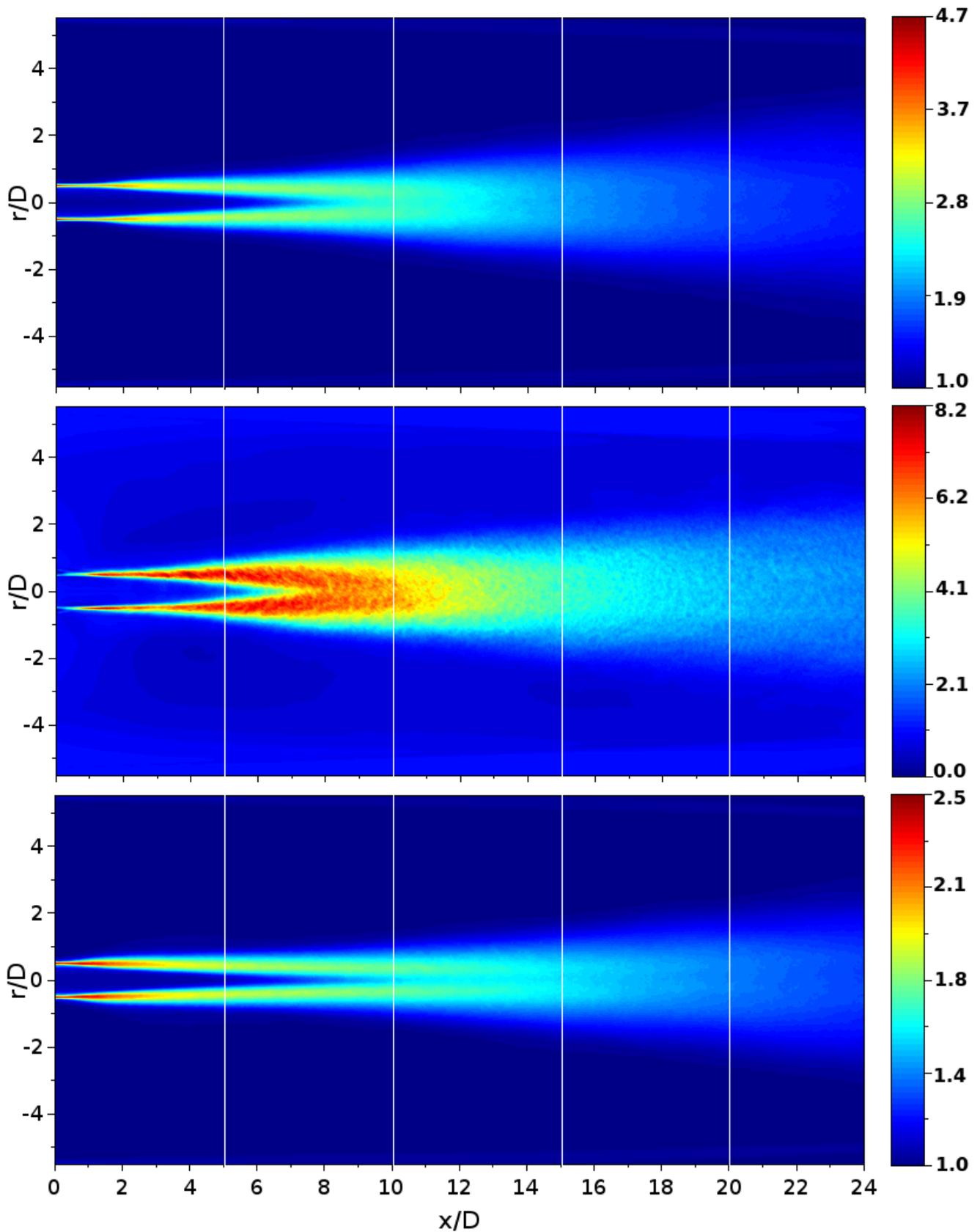


FIGURA 5.12. Campos de viscosidade efetiva  $\mu_e$  tomados no plano central, obtidos com a utilização dos modelos de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ), Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades, respectivamente.

pressão, e por ser responsável por definir a espessura inicial da camada cisalhante.

A partir da Fig. 5.13 pode ser verificado que para as simulações que utilizaram os modelos de Smagorinsky e Dinâmico de Germano, as regiões onde ocorrem os maiores níveis de turbulência coincidem com as regiões onde os modelos produzem os maiores valores de viscosidade efetiva. Quanto à simulação realizada com o modelo Função Estrutura de Velocidade, verifica-se que mesmo após ocorrerem os maiores valores de viscosidade turbulenta, os níveis de intensidade turbulenta continuam grandes. Por se tratar de uma análise qualitativa, não podemos tirar conclusões definitivas, mas ao que parece isso ocorre devido ao modelo dissipar pouca energia cinética turbulenta, de modo que a região onde existem elevados níveis de energia cinética turbulenta seja mais extensa.

Como já comentado, comparações quantitativas são melhor conduzidas empregando perfis unidimensionais de variáveis de interesse. Os mesmos tipos de perfis utilizados na análise do efeito do coeficiente  $C_s$  do modelo de Smagorinsky serão usados para avaliar as diferenças entre as previsões trazidas pelos diferentes modelos submalha.

A Fig. 5.14 mostra os resultados obtidos para a distribuição da componente da velocidade axial ao longo do eixo central (na forma adimensional  $U_{adm}$ ) para os três modelos submalha em questão. De forma geral, podemos observar que os três modelos prevêem uma região potencial do jato com comprimento similar, de modo que a região de transição se inicia na posição axial  $x/D = 5$  para todos os modelos analisados. Por outro lado, como já visualizado na Fig. 5.11 e discutido para os campos de velocidade, nota-se que cada modelo representa a região de transição de forma distinta, sendo o modelo Dinâmico de Germano o que apresenta maior espalhamento do jato (ou seja, redução mais significativa de  $U_{adm}$  na linha central). O modelo Função Estrutura de Velocidade apresenta a menor taxa de espalhamento. O modelo de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ) apresenta um comportamento intermediário, e perfis mais próximos aos experimentais reportados por Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996), o que é comprovado pelo menor  $EQM1$  produzido por este modelo comparado aos demais, mostrado na Tab. 5.2.

Os perfis de velocidade ao longo da linha de centro do domínio obtido com os

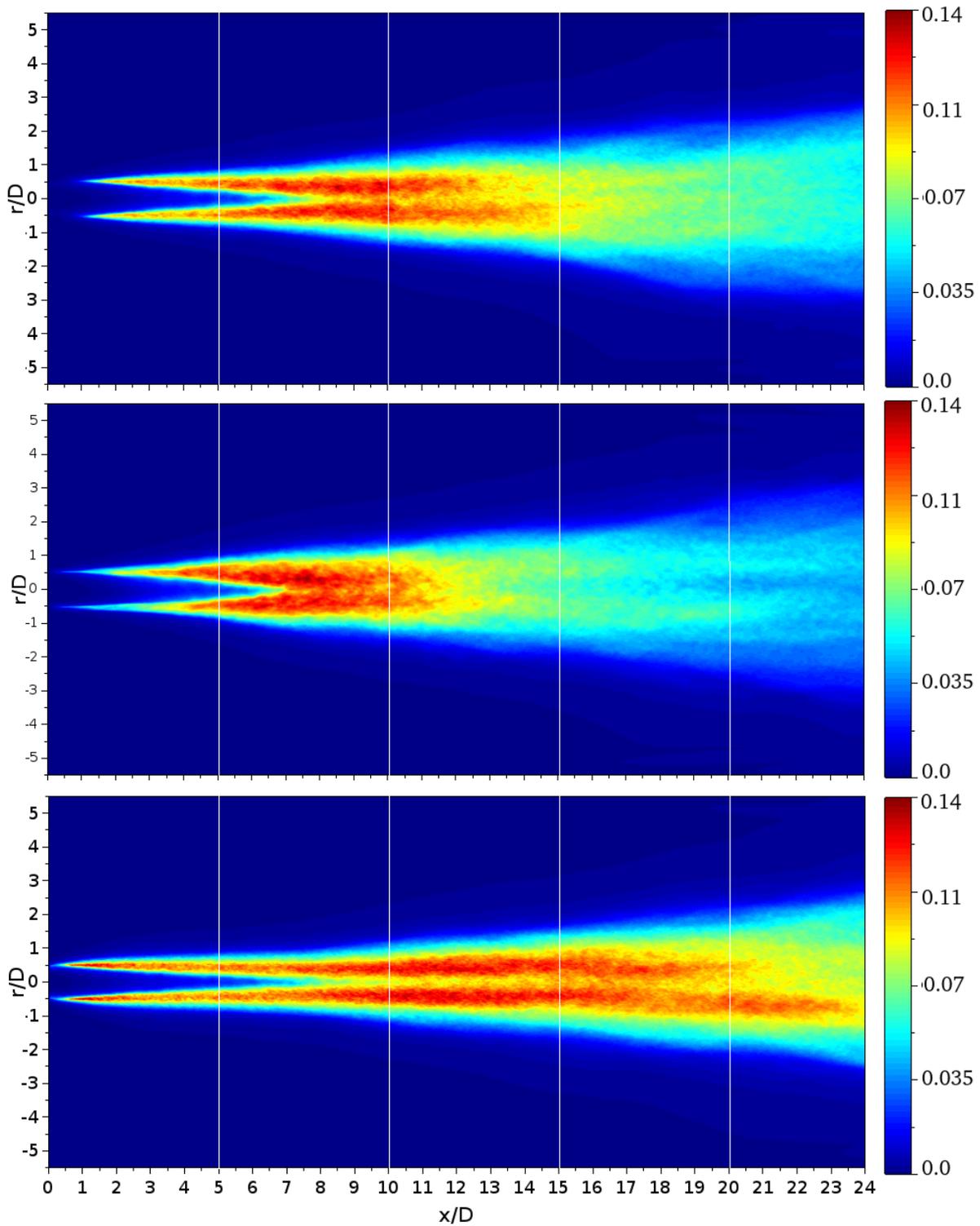


FIGURA 5.13. Campos de intensidade de turbulência adimensional  $u'_{rms}$  tomados no plano central, obtidos com a utilização dos modelos de Smagorinsky ( $C_s = 0,060$ ), Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades, respectivamente.

TABELA 5.2. Comparação entre erros quadráticos médios produzidos pelos modelos

Modelo Submalha	EQM1	EQM2
Smagorinsky - $C_s = 0,060$	0,00165	0,00231
Dinâmico de Germano	0,00472	0,00105
Função Estrutura de Velocidades	0,01030	0,00540

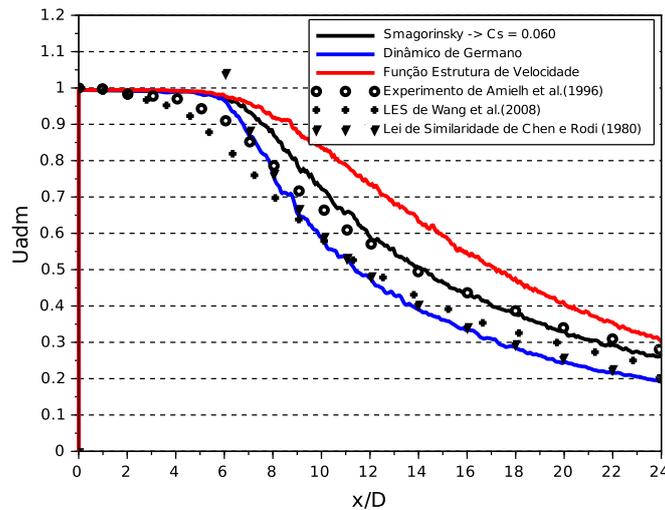


FIGURA 5.14. Perfis axiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura.

diferentes modelos expresso pela adimensionalização  $U_{sim}$  são apresentados na Fig. 5.15. Estes resultados permitem observações importantes. A primeira é de que o modelo submalha de Smagorinsky, apesar de ser o mais simples e computacionalmente mais barato, apresenta muito bons resultados (os melhores nesta comparação), quando utilizado um coeficiente adequado às características numéricas do solver e do escoamento a ser resolvido (mesmo para valores não tão próximos do adequado, como mostrado na Fig. 5.5).

Outra observação importante da Fig. 5.15 é que apesar das simulações do GRUPO1 não preverem precisamente o ponto em que termina a região potencial e inicia a transição, o resultado obtido com o Modelo Dinâmico de Germano está muito próximo ao resultado obtido proposto pela Lei de Similaridade de Chen e Rodi (CHEN; RODI, 1980), a qual é proposta a partir da análise de diversos jatos experimentais diferentes.

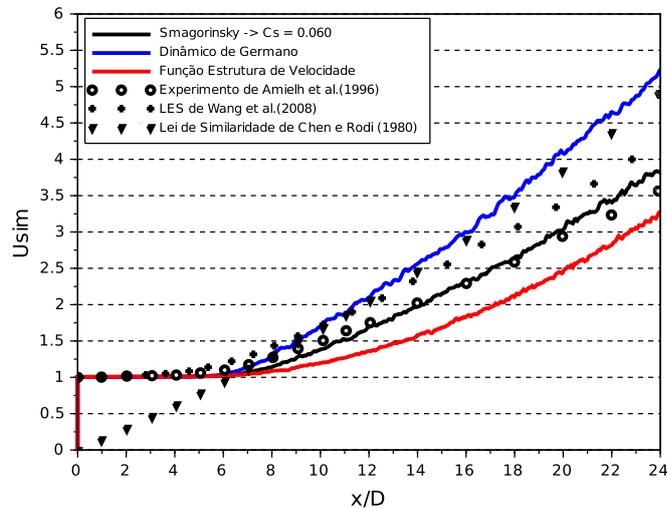


FIGURA 5.15. Perfis axiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura.

Pode ser notado que o Modelo Função Estrutura de Velocidade foi o que apresentou menor capacidade para prever a transição à turbulência, necessária nas simulações do GRUPO1. Entretanto após o desenvolvimento da turbulência, a taxa de decaimento da velocidade média parece ser bem descrita, sendo similar a taxa de decaimento dos resultados experimentais de referência.

Os perfis radiais de  $U_{adm}$  e  $U_{sim}$  em diferentes posições axiais ( $x/D$ ) são apresentados respectivamente nas Figuras 5.16, 5.18, 5.20 e 5.22 e Figuras 5.17, 5.19, 5.21 e 5.23. Uma vez que os três modelos submalha prevêm comprimentos similares para a região potencial do jato, observa-se que as três curvas para a posição  $x/D = 5$  mostradas nas Fig. 5.16 e 5.17 são praticamente coincidentes. Verifica-se também um desvio acentuado com relação aos dados experimentais, principalmente para regiões longe do centro, por conta das diferenças de regime entre o jato experimental e o previsto nas simulações para esta seção. Enquanto que em  $x/D = 5$  o jato experimental já sofreu a mudança de regime, da zona potencial para a de transição, os jatos previstos pelas simulações ainda experimentam a zona potencial, ou o final desta.

Os perfis radiais para a seção  $x/D = 10$  são apresentados nas Figs. 5.18 e 5.19, onde podemos notar que após o término da região potencial, já na zona de transição, cada um dos três modelos previu comportamentos distintos, como já havia sido obser-

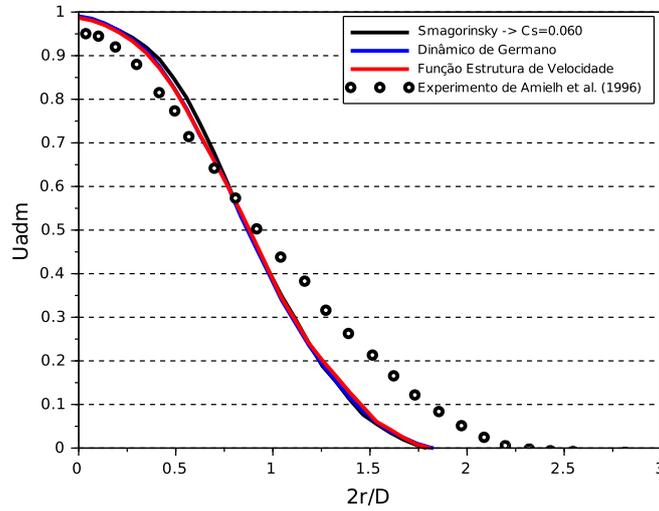


FIGURA 5.16. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 5$ .

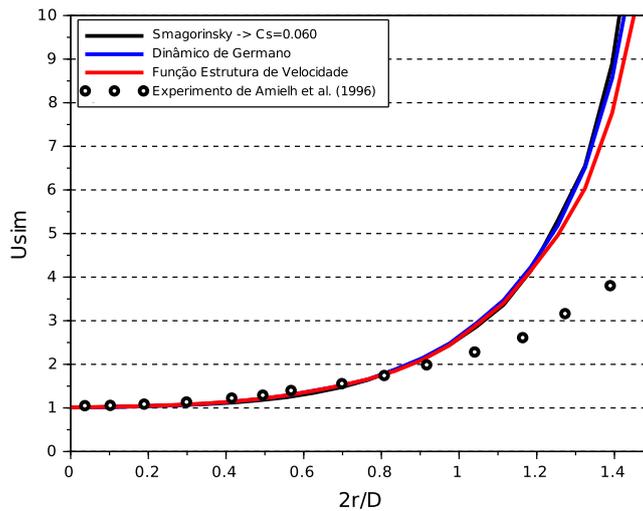


FIGURA 5.17. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 5$ .

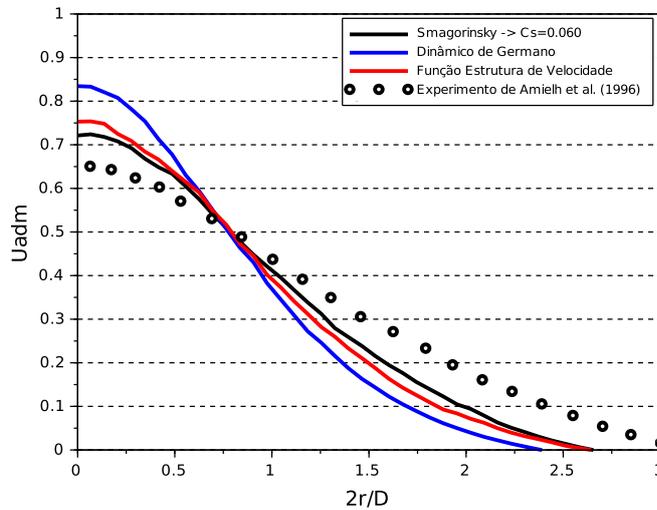


FIGURA 5.18. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 10$ .

vado na análise dos campos de velocidades e perfis axiais. A diferença entre os perfis radiais previstos pelos três modelos estão de acordo com o observado na Fig. 5.14, em que o modelo Função Estrutura de Velocidades, por ser menos dissipativo ainda preserva traços do perfil potencial, os quais são menores para o perfil previsto pelo modelo de Smagorinsky. Por outro lado os perfis previstos pelo modelo Dinâmico de Germano nesta seção são muito bons, sendo um indicador de que o modelo tem uma boa capacidade de prever o fenômeno de transição à turbulência.

Analisando os perfis radiais nas seções  $x/D = 15$  e  $x/D = 20$  (Figs. 5.20 e 5.22 e Figs. 5.21 e 5.23) percebe-se que já ocorreu a transição de regimes para os jatos das três simulações. Quanto a qualidade dos resultados observamos que o Modelo Dinâmico de Germano é o que captura melhor a estrutura do jato e os comportamentos de decaimentos para todas as seções, enquanto que os resultados obtidos com o modelo de Smagorinsky são os que apresentam os menores desvios absolutos. Por outro lado, a análise dos perfis radiais deixou bastante evidente a dificuldade do modelo Função Estrutura de Velocidades em capturar a transição entre a zona potencial e a zona de transição. De fato este fenômeno de transição é complexo, apresentando elevados gradientes das propriedades, e essa dificuldade já havia sido observada na Fig. 5.14.

De forma geral, o comportamento dos três modelos submalha em relação ao es-

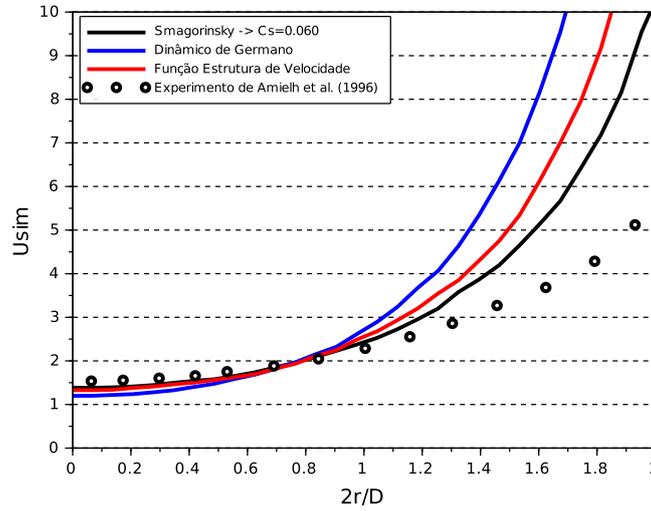


FIGURA 5.19. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 10$ .

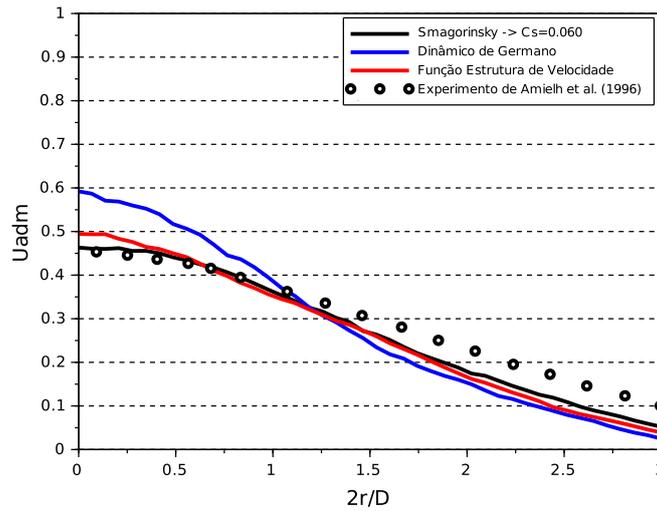


FIGURA 5.20. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 15$ .

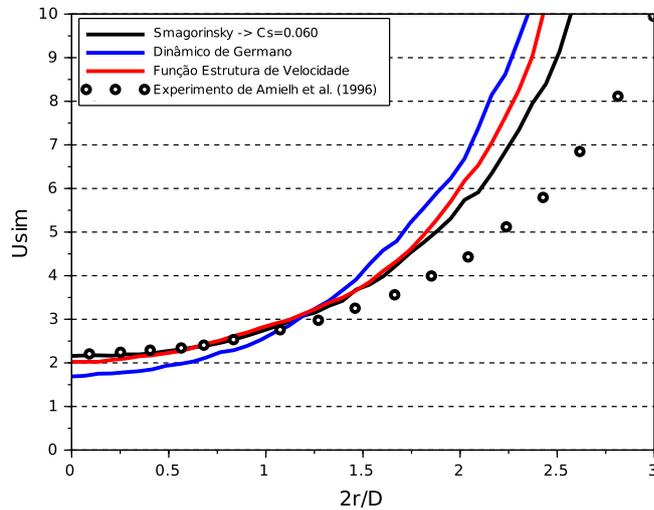


FIGURA 5.21. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 15$ .

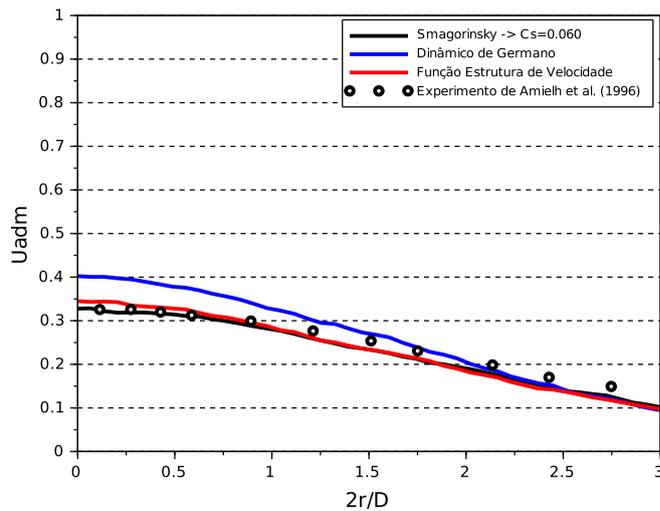


FIGURA 5.22. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 20$ .

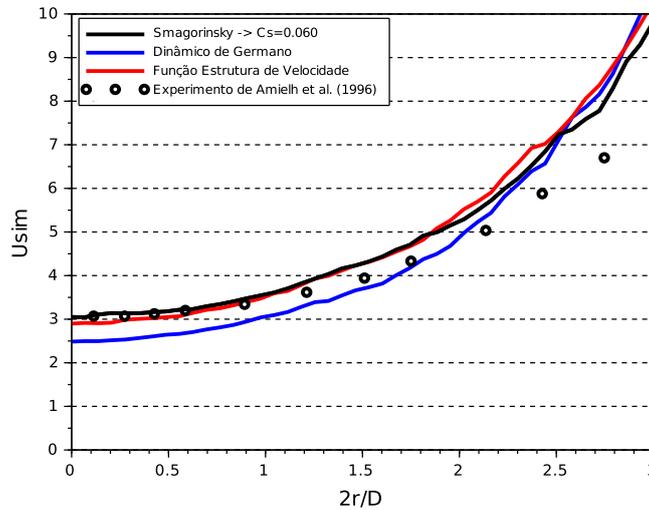


FIGURA 5.23. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 20$ .

palhamento do jato observado nas análises qualitativas discutidas no início da seção, é corroborado pelos resultados acima. Ao analisarmos os perfis em seções mais distantes do bocal ( $x/D > 10$ ), verifica-se que os modelos Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidade apresentam a maior e menor taxa de espalhamento, respectivamente. O modelo de Smagorinsky, por outro lado, apresenta comportamento intermediário, como verificado também nas análises dos perfis axiais.

Os resultados da Fig. 5.24 apresentam os perfis axiais da intensidade de turbulência adimensional  $u'_{adm}$ . Verifica-se que o Modelo de Germano foi capaz de desenvolver a turbulência antes que os demais, apresentando resultados absolutos mais próximos dos resultados experimentais, produzindo, portanto o menor  $EQM2$ , como visto na Tab. 5.2. Por outro lado, de uma forma qualitativa, verificamos que o Modelo de Smagorinsky representa melhor a transição para a turbulência. O modelo Função Estrutura de Velocidades apresentou a menor taxa de espalhamento, sendo menos dissipativo, foi o que mais demorou a desenvolver a turbulência.

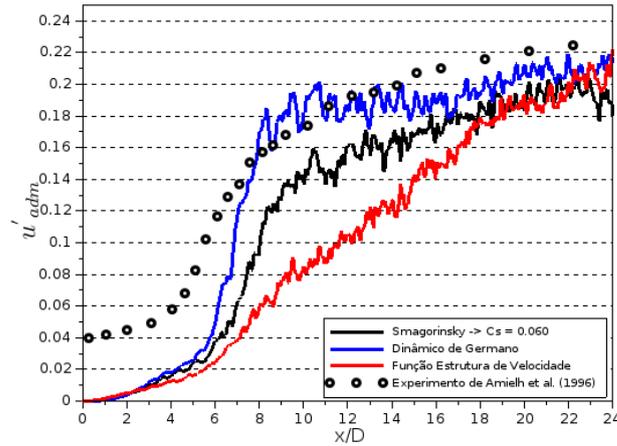


FIGURA 5.24. Perfis axiais de  $u'_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

### 5.3 Resultados das simulações do GRUPO2 - Análise do coeficiente de Smagorinsky

Para as simulações do GRUPO2, os campos de velocidades, flutuação de velocidades e viscosidade turbulenta médios são bastante similares aos campos de velocidades obtidos para o GRUPO1 (mostrados nas Figs. 5.11-5.13), apresentando as mesmas tendências. Levando-se em conta que sua visualização permite apenas análises qualitativas, estes não são plotados nesta seção.

Definida a condição de contorno de entrada turbulenta foi então realizada a análise do coeficiente  $C_s$  a ser utilizado para esta nova situação. A Fig. 5.25 apresenta os perfis axiais adimensionais  $U_{adm}$  para os quatro valores da constantes  $C_s$  analisados. A tendência de comportamento das quatro curvas é similar à observada para o GRUPO1. Através de uma análise mais cuidadosa pode ser percebido entretanto, uma pequena redução da zona potencial para as quatro simulações comparado ao GRUPO1.

A Fig. 5.26 apresenta os perfis equivalentes para a velocidade  $U_{sim}$ . A partir deste resultado pode ser verificado que as curvas correspondentes a  $C_s = 0,055$ ,  $C_s = 0,060$  e  $C_s = 0,065$  são praticamente coincidentes, havendo uma pequena diferença para a curva de  $C_s = 0,065$ , que captura melhor o decaimento de velocidades para regiões distantes do bocal. Podemos notar também, de maneira similar as simulações do GRUPO1, que a utilização de  $C_s = 0,070$ , produziu um comprimento potencial

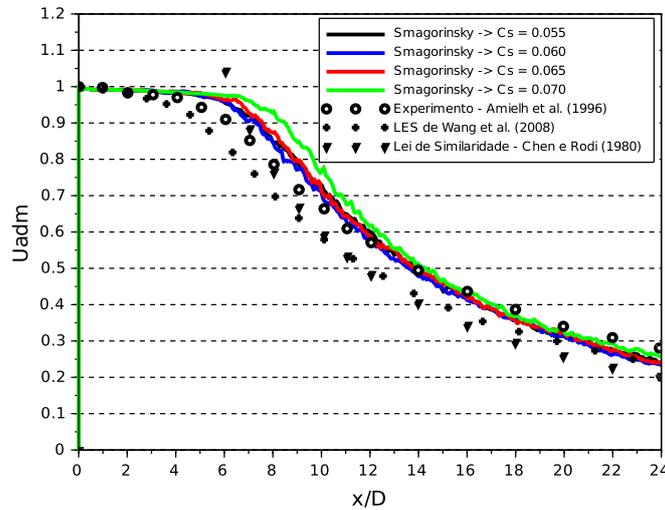


FIGURA 5.25. Perfis axiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados a dados da literatura.

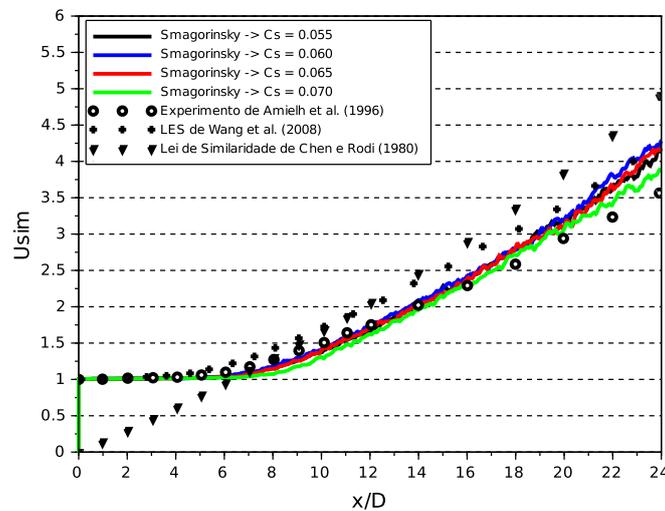


FIGURA 5.26. Perfis axiais de  $U_{sim}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados a dados da literatura.

mais longo. Pode ser notado que, de maneira geral houve uma pequena antecipação da transição de regime, sendo portanto o comprimento potencial para as simulações do GRUPO2 menor do que aquele obtido nas simulações do GRUPO1. Uma análise mais apurada comparando o efeito especificamente da utilização da condição de contorno será realizada na próxima seção.

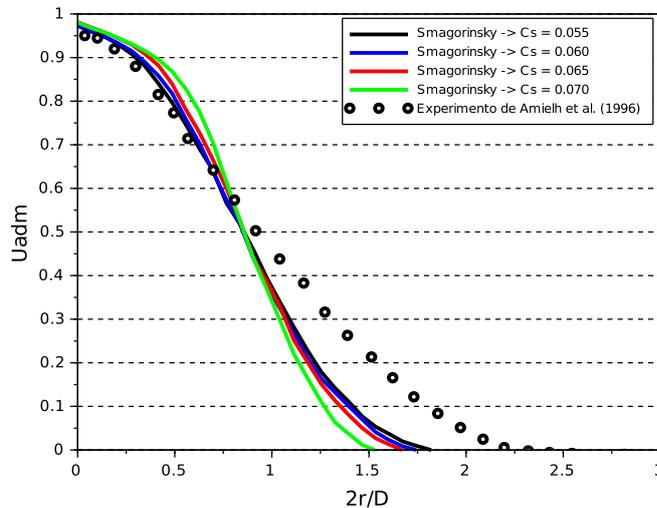


FIGURA 5.27. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 5$ .

As Figuras 5.27-5.30 mostram os perfis radiais de  $U_{adm}$  em diferentes posições axiais, obtidos com a utilização dos diferentes valores da constante de Smagorinsky  $C_s$ . A Fig. 5.27 apresenta os resultados para a seção  $x/D = 5$ , em que novamente pode ser verificado que para esta seção as soluções obtidas não são boas, analogamente aos resultados obtidos para as simulações do GRUPO1. A qualidade inferior destes resultados se deve ao fato de que, como argumentado na seção anterior e ilustrado pela Fig. 2.2, a esta distância do bocal o jato estudado por Amielh *et al.* (AMIELH *et al.*, 1996) já ter experimentado a mudança de regime estando na zona de transição, enquanto os jatos simulados ainda estarem na zona potencial, como observado nos perfis axiais apresentados na Fig. 5.25.

Novamente, as curvas para  $C_s < 0,065$  em  $x/D = 10$  são muito próximas, sendo que o desvio da curva  $C_s = 0,070$  na região central se deve à previsão do cone potencial mais longo, como também observado na Fig. 5.25. Se retornarmos à Fig. 5.7, podemos notar que a utilização das condições de contorno turbulentas melhorou a qualidade dos resultados nesta seção, uma vez que os desvios já são menores do que os observados na Fig. 5.6. Portanto verificamos uma melhor representação da região de transição. As Figuras 5.29 e 5.30 apresentam os perfis radiais de  $U_{adm}$  em  $x/D = 15$  e 20. Através da visualização destes resultados, percebe-se que após a transição todas as quatro

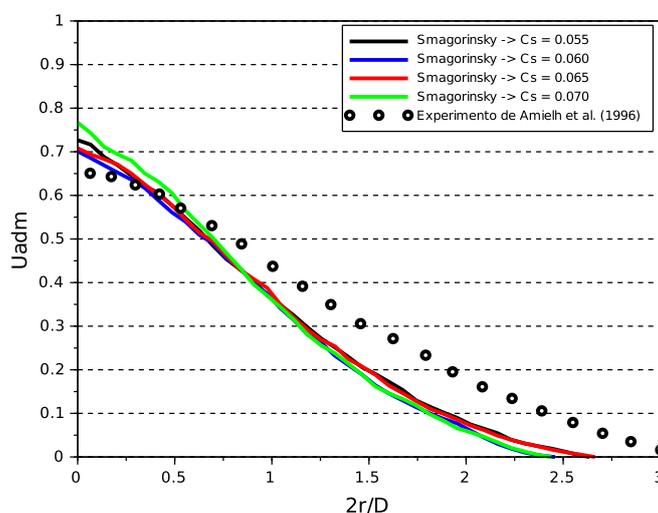


FIGURA 5.28. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 10$ .

curvas representam bem a tendência dos resultados experimentais. Na mesma direção do observado na Fig. 5.26 para estas duas seções mais distantes do bocal, verificamos que a curva para  $C_s = 0,065$  foi a que mais se aproximou dos resultados experimentais, enquanto que para regiões próximas ao bocal a curva para  $C_s = 0,060$  é a que apresenta melhor concordância.

A Figura 5.31 apresenta os perfis da intensidade de turbulência adimensionalizado  $u'_{adm}$  para a faixa de  $C_s$  analisada. Nesta imagem pode ser notado o efeito da modelagem da condição de contorno turbulenta, uma vez que  $u'_{adm}$  não parte do valor zero, como verificado na Fig. 5.24 que representou o perfil de  $u'_{adm}$  para as simulações do GRUPO1. Entretanto verifica-se que, embora o valor de  $u'_{adm}$  na Fig. 5.31 inicie com  $\approx 0,04$ , a intensidade de turbulência adimensional rapidamente cai a valores da ordem de  $\approx 0,0067$ , antes do início da região de transição, onde começa a crescer novamente. Os possíveis motivos deste decaimento inicial da intensidade de turbulência serão discutidos a seguir, após a visualização dos demais resultados.

Novamente, para realizar a comparação entre os resultados das simulações com os diferentes modelos submalha, precisamos escolher qual o valor ideal de  $C_s$  para o modelo de Smagorinsky. Da mesma forma que realizado na seção anterior, foi calcu-

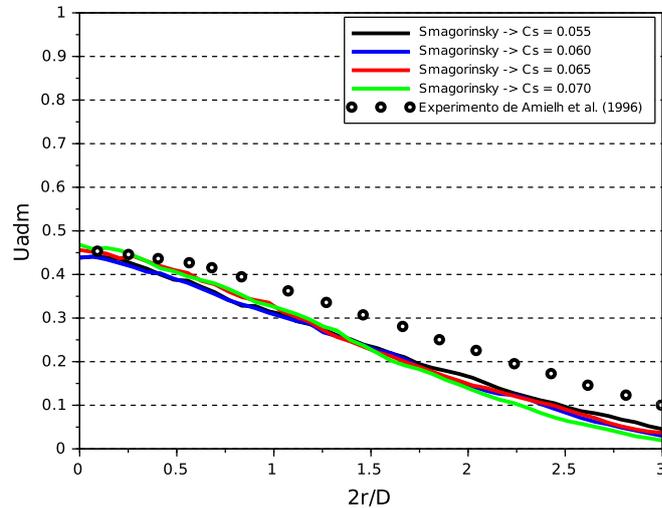


FIGURA 5.29. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 15$ .

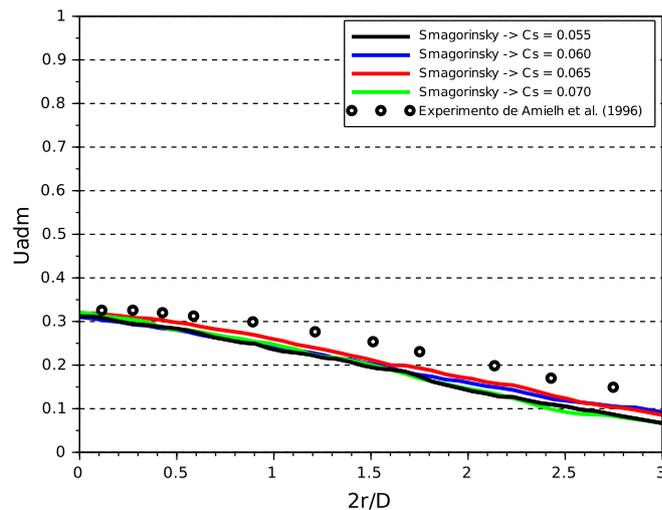


FIGURA 5.30. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 20$ .

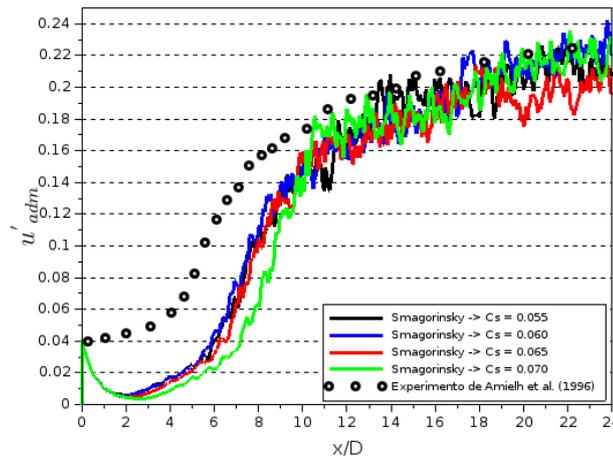


FIGURA 5.31. Perfis axiais de  $u'_{adm}$  obtidos com modelo de Smagorinsky para diversos valores da constante  $C_s$ , comparados com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

TABELA 5.3. Comparação entre os erros quadráticos médios produzidos com o uso de diferentes valores da constante de Smagorinsky  $C_s$ .

$C_s$	EQM1	EQM2
0,055	0,00140	0,00185
0,060	0,00108	0,00170
0,065	0,00166	0,00221
0,070	0,00408	0,00303

lado o  $EQM1$  e  $EQM2$  para os perfis axiais de  $U_{adm}$  e de  $u'_{adm}$ , os quais são apresentados na Tab. 5.3.

A análise dos resultados da Tab. 5.3 fornece uma constatação interessante, visto que para o GRUPO2 os resultados produzidos pelos diferentes coeficientes de Smagorinsky são muito próximos, principalmente os gerados por  $C_s = 0,055$  e  $C_s = 0,060$ . Este evidencia portanto, que o desempenho dos modelos submalha pode ser influenciado pelas condições do escoamento, corroborando com as análises anteriores de que não existe um valor universal para o coeficiente de Smagorinsky a ser utilizado em LES. De forma similar a análise para o  $C_s$  a ser utilizado no GRUPO1, a comparação entre o desempenho dos diferentes modelos submalha a ser apresentada na próxima seção foi realizada utilizando a simulação com  $C_s = 0,060$ .

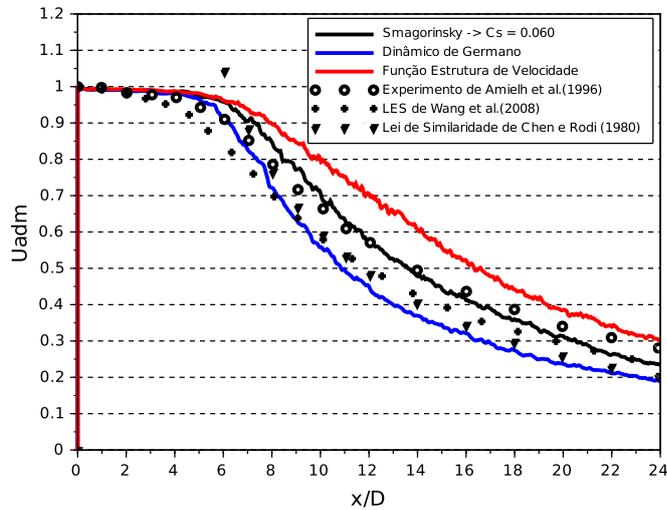


FIGURA 5.32. Perfis axiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura.

## 5.4 Resultados das simulações para o GRUPO2 - Comparação entre os modelos submalha

Os perfis axiais da velocidade adimensional  $U_{adm}$  obtidos com os três modelos do tensor de tensões submalha para as simulações que utilizam a condição de entrada com flutuações de velocidades são apresentados na Fig. 5.32. Pode ser notado que de forma geral, houve uma redução do comprimento potencial, melhorando a qualidade dos resultados, comparado aos mostrados na Fig. 5.14. Observa-se que o modelo Dinâmico de Germano captura muito bem a transição entre a zona potencial e a zona de transição. Destaca-se também uma melhoria dos resultados produzidos pelo modelo Função Estrutura de Velocidade, que com a utilização da condição turbulenta, previu um comprimento potencial mais curto comparado ao caso anterior (GRUPO1, quando a condição de contorno foi definida como laminar), como verificado na Figura 5.14.

A Figura 5.33 apresenta os mesmos resultados expressos pela adimensionalização de velocidade  $U_{sim}$ . Neste resultado fica evidente a redução do comprimento potencial comparado ao apresentado pelas simulações do GRUPO1, visto que todas as curvas estão levemente deslocadas para cima, quando comparadas às curvas da Fig. 5.15. Aqui verificamos que, apesar do modelo Dinâmico de Germano prever corre-

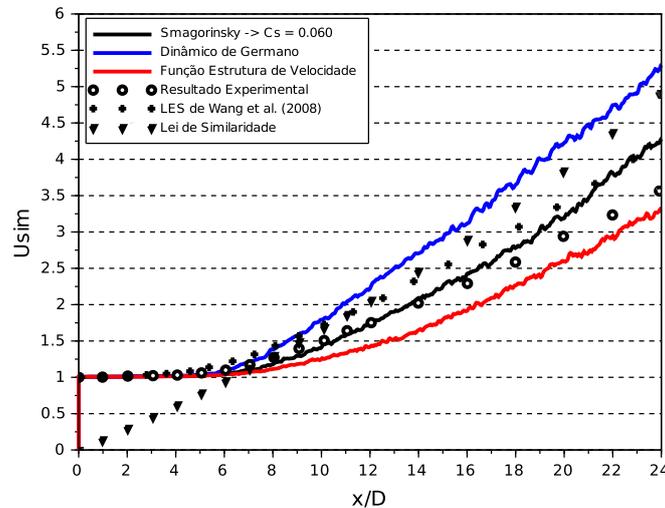


FIGURA 5.33. Perfis axiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com a dados da literatura.

tamente o final do cone potencial, previu de forma inadequada o comportamento da zona de transição, provavelmente por desenvolver uma dissipação excessiva, como pode ser visto na Fig. 5.12.

Os perfis radiais de  $U_{adm}$  e  $U_{sim}$  são apresentados respectivamente nas Figuras 5.34, 5.36, 5.38 e 5.40 e Figuras 5.35, 5.37, 5.39 e 5.41 para as seções transversais a direção principal do escoamento em distâncias do bocal em  $x/D = 5, 10, 15$  e  $20$ , conforme as marcações na Fig. 5.11. Uma vez que a transição entre regimes do jato iniciou em regiões mais próximas às verificadas experimentalmente, pode ser verificado que os perfis radiais obtidos apresentaram uma concordância melhor com os experimentais dos que os obtidos nas simulações do GRUPO1 (Figuras 5.16, 5.18, 5.20 e 5.22 e Figuras 5.17, 5.19, 5.21 e 5.23).

As Figuras 5.34 e 5.35 apresentam os perfis radiais de  $U_{adm}$  e  $U_{sim}$ , respectivamente para a seção  $x/D = 5$ . Por conta da redução do comprimento potencial das simulações do GRUPO2, os perfis de velocidades para esta seção apresentam qualidade superior àqueles obtidos para as simulações do GRUPO1. Isto se deve ao fato de que para o GRUPO2, em  $x/D = 5$  as simulações já estão no início da zona de transição, assim como o jato experimental. Portanto, nesta seção comparamos jatos que encontram-se no mesmo regime, conforme Fig. 2.2, de modo que é verificada uma boa

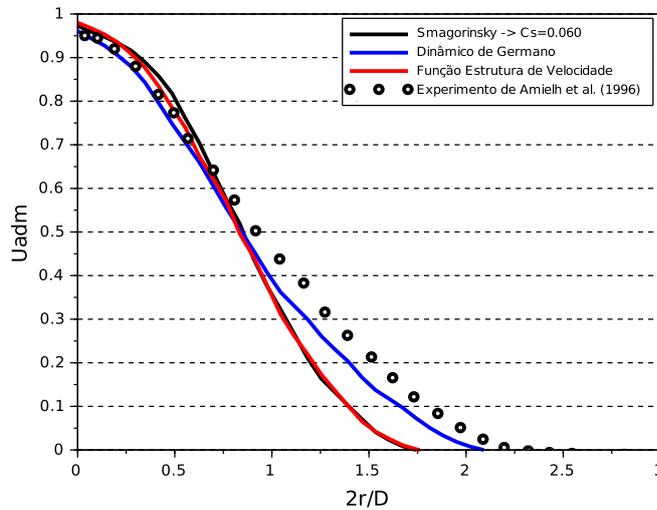


FIGURA 5.34. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 5$ .

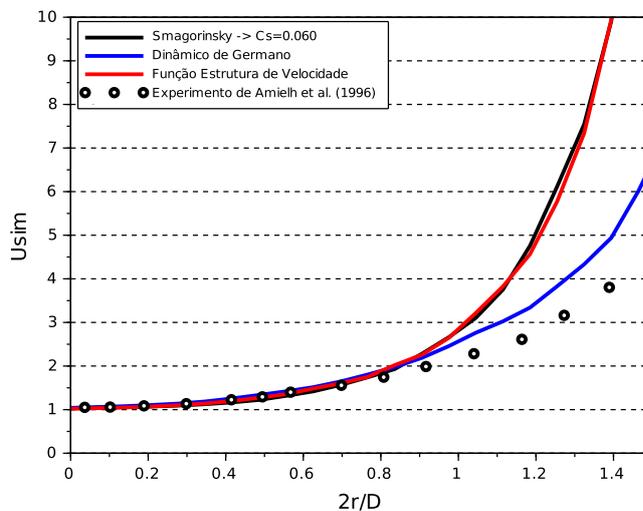


FIGURA 5.35. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 5$ .

aderência entre os perfis das simulações e os dados experimentais.

Para a seção transversal  $x/D = 10$ , os resultados são apresentados nas Fig. 5.36 e Fig. 5.37. A partir destes gráficos verificamos que, similarmente ao discutido em relação aos perfis axiais, as simulações do GRUPO2 os modelos de Smagorinsky e Função Estrutura de Velocidades capturam razoavelmente bem a fenomenologia do

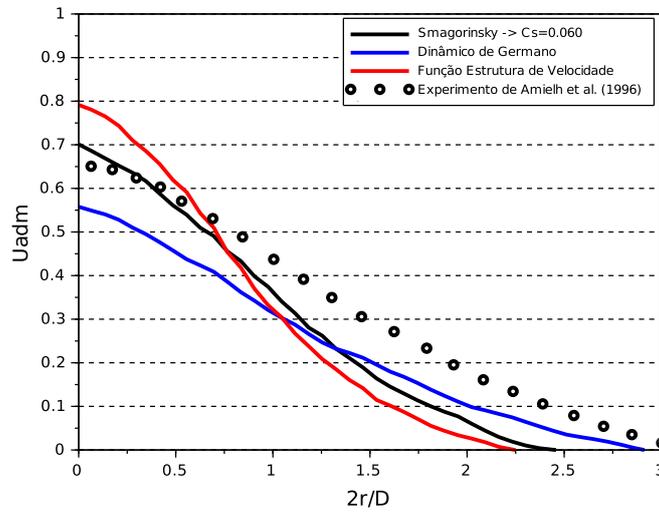


FIGURA 5.36. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 10$ .

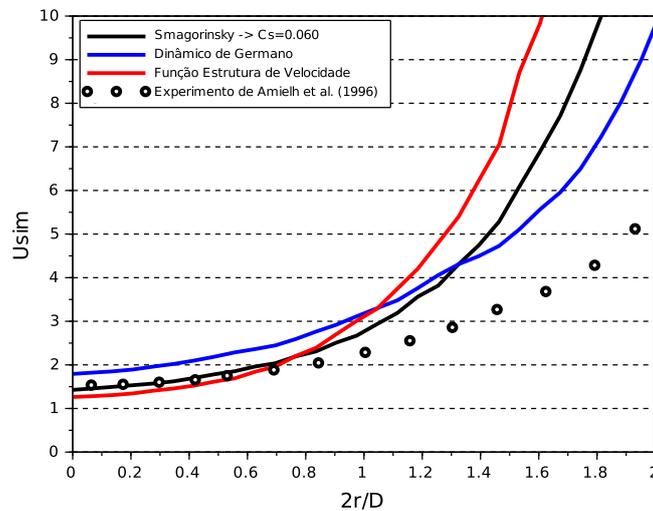


FIGURA 5.37. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 10$ .

espalhamento do jato, e que as curvas correspondentes são quase concidentes em regiões próximas do centro para a análise de  $U_{sim}$  em Fig. 5.37. Por outro lado o modelo Dinâmico de Germano não reproduz o comportamento com a mesma qualidade que os outros modelos, uma vez que sua utilização resultou em uma taxa de espalhamento mais elevada.

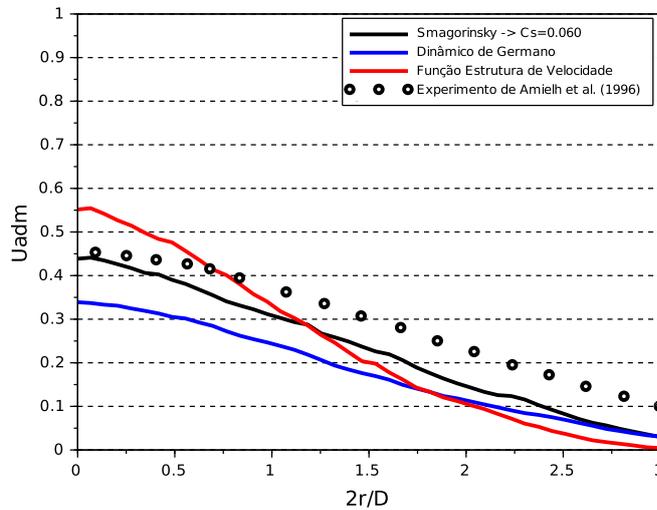


FIGURA 5.38. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 15$ .

Os resultados para as seções  $x/D = 15$  e  $x/D = 20$ , ilustrados nas Figuras 5.38, 5.39, 5.40 e 5.41 mostram que os modelos de Smagorinsky e Função Estrutura de Velocidades capturam de forma mais adequada a dinâmica do jato a medida que analisamos pontos mais distantes, indicando uma taxa de dissipação de energia cinética turbulenta adequada. O modelo de Germano entretanto apresentou uma piora nos resultados em termos absolutos. Porém, de forma qualitativa, os perfis radiais produzidos pelo modelo de Germano apresentam um desvio praticamente constante em relação aos dados experimentais em todas seções analisadas, o que indica que a estrutura do jato é bem reproduzida.

A Figura 5.42 apresenta os perfis da intensidade de turbulência adimensional  $u'_{adm}$  para os três modelos de viscosidade turbulenta avaliados. Pode-se verificar um atraso na transição à turbulência da simulação que utiliza o modelo Função Estrutura de Velocidades. Podemos perceber também para este modelo, que além de um comprimento da zona potencial maior, a transição de regimes do jato é mais suave comparado às simulações que utilizam o modelo de Smagorinsky e modelo de Germano. Podemos observar ainda que o desenvolvimento da turbulência se deu antes e de forma mais intensa para a utilização do modelo Dinâmico de Germano, sendo seu valor após a transição muito próximo do observado no experimento.

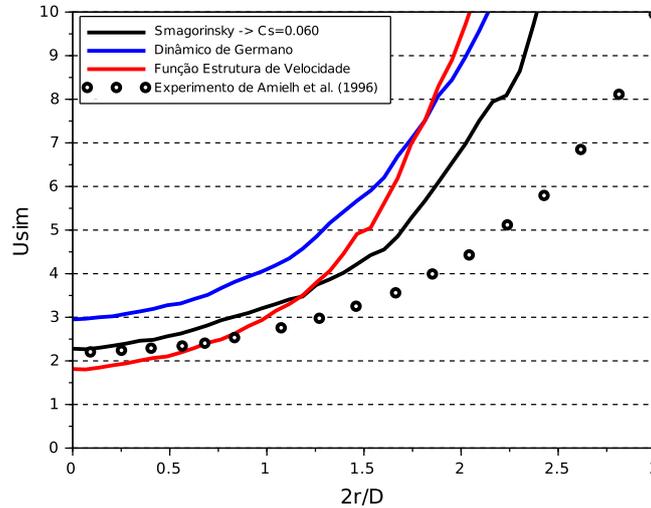


FIGURA 5.39. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 15$ .

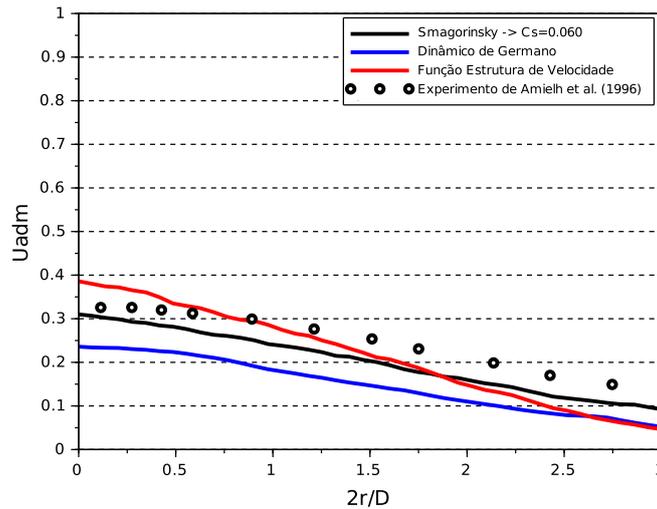


FIGURA 5.40. Perfis radiais de  $U_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 20$ .

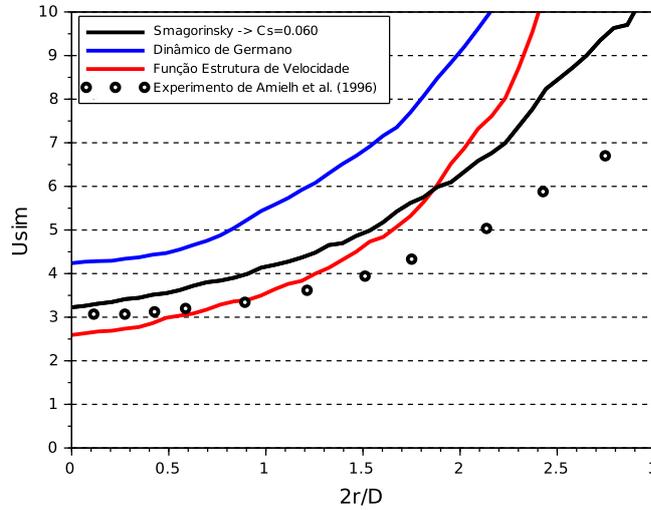


FIGURA 5.41. Perfis radiais de  $U_{sim}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996) em  $x/D = 20$ .

Um dos motivos que podem ter ocasionado este comportamento para o modelo Dinâmico de Germano é o fato deste possibilitar a produção de energia cinética turbulenta, através da cascata de energia reversa. Matematicamente, este efeito é desenvolvido pelo modelo através uma viscosidade submalha negativa, que é possível quando o tensor de Leonard filtrado (ou Identidade de Germano) definido pela Eq. 3.41, que considera o efeito submalha das escalas resolvidas, assume valores negativos. Em nossa implementação este efeito foi limitado até  $\mu_t = -\mu_r$ , que resulta em  $\mu_e = 0$ . Esta limitação se deu por questões de estabilidade numérica, como recomendado por Sagaut (SAGAUT, 2006).

Os erros quadráticos médios  $EQM1$  e  $EQM2$  para as simulações do GRUPO2 são apresentados na Tab. 5.4. O menor valor para  $EQM1$  foi produzido pelas simulações que utiliza o modelo de Smagorinsky com  $C_s = 0,060$  enquanto que o menor valor para  $EQM2$  foi produzido pelo modelo Dinâmico de Germano. Entretanto, como a diferença entre  $EQM2$  produzidos pelo modelo de Smagorinsky e pelo modelo de Germano é muito pequena e levando em conta uma análise qualitativa dos perfis radiais, concluímos que as simulações com o modelo de Smagorinsky foram as que apresentaram os melhores resultados.

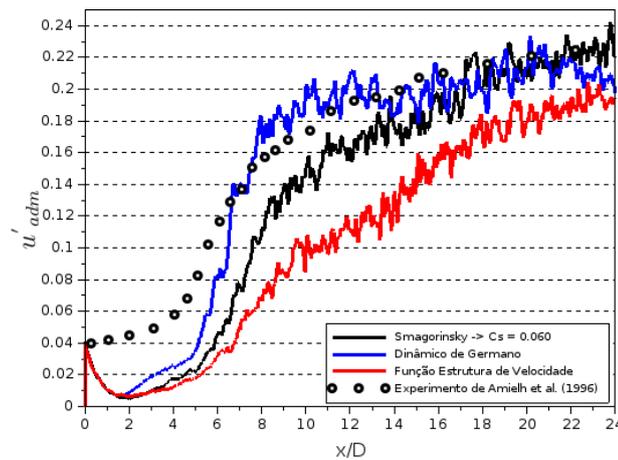


FIGURA 5.42. Perfis axiais de  $u'_{adm}$  obtidos para os três modelos de viscosidade submalha comparados com dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

TABELA 5.4. Comparação entre erros quadráticos médios produzidos pelos avaliados

Modelo Submalha	EQM1	EQM2
Smagorinsky - $C_s = 0,060$	0,00108	0,00170
Dinâmico de Germano	0,00659	0,00056
Função Estrutura de Velocidades	0,00641	0,00441

## 5.5 Análise Direta do Efeito da Condição de Contorno

As análises das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2, de forma independente servem para avaliar o efeito da modelagem do tensor de tensões. Esta seção tem por objetivo avaliar melhor o efeito da modelagem da turbulência no contorno de entrada (o que foi feito de forma parcial na Seção 5.3). Para avaliar melhor este efeito, os resultados das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 que utilizam o mesmo modelo para o tensor de tensões submalha serão plotados conjuntamente em um mesmo gráfico.

As Figuras 5.43 e 5.44 apresentam os perfis de velocidades adimensionais na direção axial obtidos com a utilização do modelo submalha de Smagorinsky. Para as comparações relativas ao modelo submalha para o modelo de Smagorinsky, foram comparadas as simulações do GRUPO1 e GRUPO2 que utilizam  $C_s = 0,060$ , conforme análises do erro quadrático médio realizadas nas seção anteriores .

Para as simulações que utilizam o modelo submalha de Smagorinsky, observa-se um pequeno encurtamento da zona potencial do jato, como verificado na Fig. 5.43,

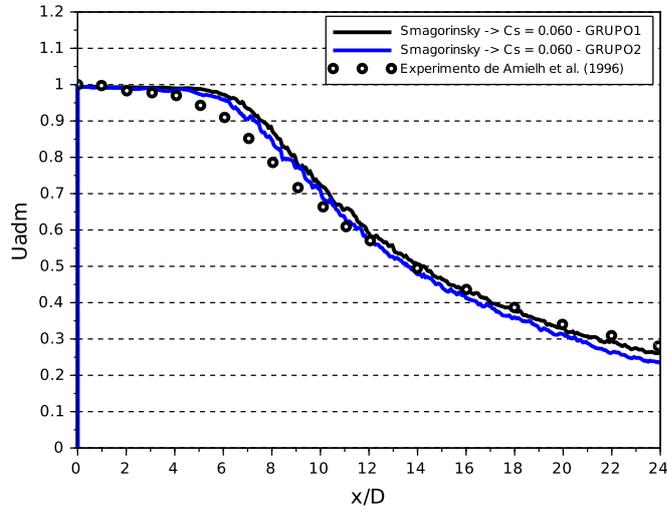


FIGURA 5.43. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $U_{adm}$  obtidos com o modelo de Smagorinsky para  $C_s = 0,060$  e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

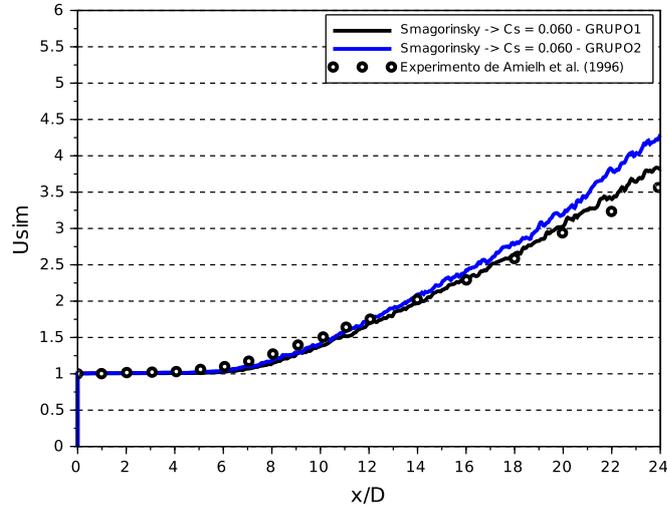


FIGURA 5.44. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $U_{sim}$  obtidos com o modelo de Smagorinsky para  $C_s = 0,060$  e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

de modo que a transição de regime é levemente antecipada. É interessante notar que exceto esta antecipação, o comportamento geral observado foi praticamente o mesmo, sendo o decaimento da velocidade axial muito similar em ambos os casos (i.e., as curvas seguem de forma praticamente paralelas para altos valores de  $x/D$ ).

A análise do efeito da modelagem da condição de contorno para as simulações que utilizaram o modelo submalha de Germano pode ser feita através das Fig. 5.45 e Fig. 5.46. Estes gráficos mostram tendências similares às observadas com a utilização do modelo de Smagorinsky. Entretanto verifica-se que a redução do comprimento potencial neste caso foi mais acentuada comparado ao uso do modelo de Smagorinsky. Um dos possíveis motivos para essa diferença possa ser entendido através da análise do campo de viscosidade efetiva gerado por cada um destes modelos mostrados na Fig. 5.12.

Os campos de viscosidade efetiva da Fig. 5.12 mostram que próximo as paredes do bocal, o modelo submalha de Smagorinsky apresenta valores elevados de viscosidade efetiva. Estes elevados valores de viscosidade efetiva podem dissipar parcela da energia cinética turbulenta inserida no contorno, principalmente as flutuações inseridas que provocariam as maiores instabilidades na camada cisalhante. Comportamento similar pode ser observado no campo de viscosidade efetiva produzido pelo modelo Função Estrutura de Velocidades, entretanto em menor intensidade, uma vez que as viscosidades efetivas produzidas por este último correspondem aproximadamente à metade daquelas produzida pelo modelo de Smagorinsky.

Tratando-se do modelo de Dinâmico de Germano, próximo ao bocal surgem regiões com viscosidade efetiva menor do que a unidade, promovendo uma menor dissipação comparada à utilização dos outros modelos. Nessas regiões ocorre geração de energia cinética turbulenta, devido a interação entre as diferentes escalas resolvidas, o que resulta em uma mais rápida transição de regime para o jato. Para as simulações do GRUPO1, por existirem menos diversidades de escalas com quantidade relevante de energia, este efeito ocorre com menor intensidade. Em tempo devemos notar, que após o início da zona de transição o comportamento das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 foi bastante similar, uma vez que os desvios entre as curvas são praticamente constantes ao longo do desenvolvimento do jato.

Os resultados do efeito da condição de contorno turbulenta nas simulações com o modelo Função Estrutura de Velocidades são mostrados nas Figuras 5.47 e 5.48. Este modelo submalha foi o que apresentou o pior desempenho para as simulações do GRUPO1, conforme pode ser visto na Tabela 5.6 e nas Figuras 5.14 e 5.15. Entretanto,

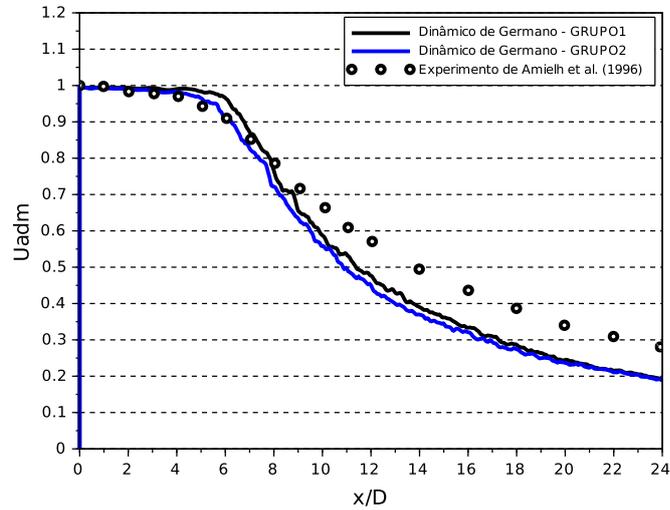


FIGURA 5.45. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $U_{adm}$  obtidos com o modelo Dinâmico de Germano e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

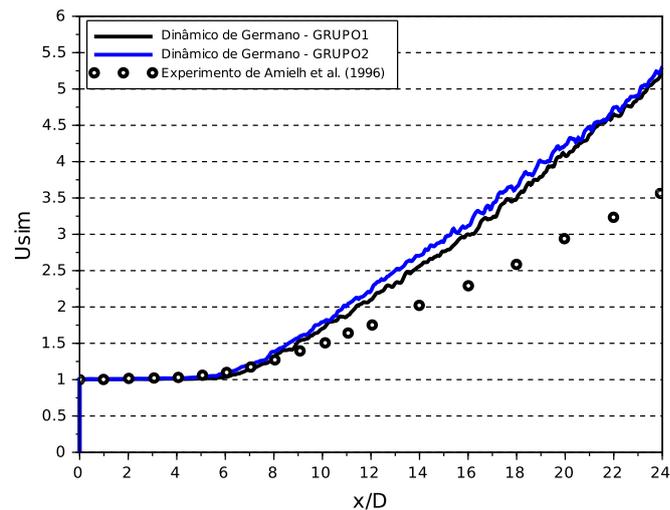


FIGURA 5.46. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $U_{sim}$  obtidos com o modelo Dinâmico de Germano e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

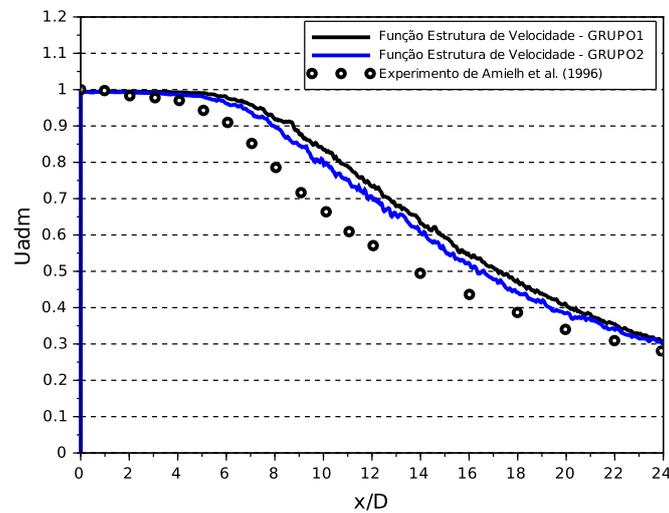


FIGURA 5.47. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $U_{adm}$  obtidos com o modelo Função Estrutura de Velocidades e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

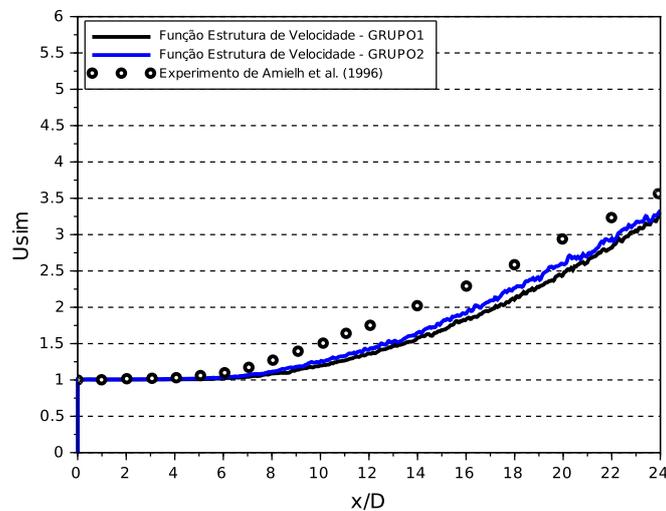


FIGURA 5.48. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $U_{sim}$  obtidos com o modelo Função Estrutura de Velocidades e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

para o GRUPO2 ele se tornou competitivo, apresentando resultados para as outras variáveis monitoradas com melhor concordância com os dados experimentais.

Os erros quadráticos médios  $EQM1$  correspondente aos desvios observados entre os perfis de velocidades  $U_{adm}$  calculados com e sem a modelagem da condição de

TABELA 5.5.  $EQM1$  com modelo de Smagorinsky para diferentes valores da constante  $C_s$ 

$C_s$	GRUPO1	GRUPO2
0,055	0,00287	0,00140
0,060	0,00165	0,00108
0,065	0,00277	0,00166
0,070	0,00647	0,00408

TABELA 5.6.  $EQM1$  para os três modelos avaliados.

Modelo Submalha	GRUPO1	GRUPO2
Smagorinsky $C_s = 0,060$	0,00165	0,00108
Dinâmico de Germano	0,00472	0,00659
Função Estrutura de Velocidade	0,01030	0,00641

contorno turbulenta, são apresentados na Tab. 5.5 para o modelo de Smagorinsky com diferentes valores de  $C_s$  e na Tab. 5.6 para cada um dos três modelos avaliados. Podemos verificar de forma geral que o erro quadrático médio para as simulações do GRUPO2 reduziu praticamente pela metade, sendo a única exceção o modelo Dinâmico de Germano, para o qual  $EQM1$  foi maior para a simulação pertencente ao GRUPO2.

As Figuras 5.49-5.51 apresentam os perfis axiais da intensidade de turbulência adimensional  $u'_{adm}$  comparados (GRUPO1 X GRUPO 2), para os três modelos em questão. Estes resultados mostram de forma geral uma melhoria na qualidade dos resultados obtidos nas simulações com a utilização das condições de contorno turbulentas.

Para o problema físico estudado neste trabalho verifica-se nas Figuras 5.49, 5.50 e 5.51, que o efeito da condição de contorno turbulenta foi importante para a melhoria da qualidade dos resultados previstos, principalmente para previsão do comprimento potencial. Deve-se destacar que para os modelos de Smagorinsky e Dinâmico de Germano, após o término da zona potencial, os perfis de velocidades  $u'_{adm}$  apresentam comportamento similar para ambos os grupos de simulações. Para o modelo Função Estrutura de Velocidades, na simulação do GRUPO1 verificou-se que  $u'_{adm}$  não atingia seu valor máximo dentro do domínio em análise, enquanto que para o GRUPO2 este foi alcançado, inclusive próximo ao valor máximo experimental .

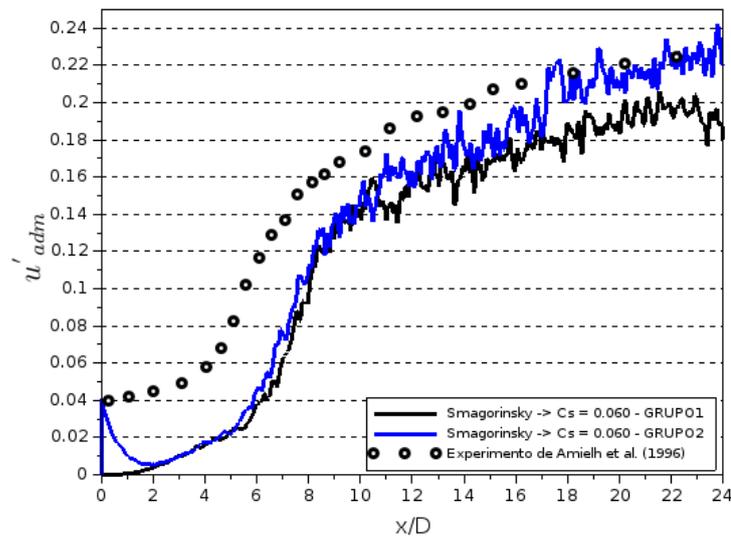


FIGURA 5.49. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $u'_{adm}$  obtidos com o modelo de Smagorinsky para  $C_s = 0,060$  e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

Deve-se ressaltar que já era esperada uma melhora na qualidade dos resultados para as simulações do GRUPO2, pelo fato de que a definição de um escoamento turbulento já na entrada é mais próxima da realidade, além de diminuir a complexidade da simulação. Esta redução de complexidade se deve ao fato de não ser necessário que o solver desenvolva e amplifique as primeiras instabilidades que irão degenerar-se em turbulência, fenômeno que é naturalmente complexo.

Para todas as simulações do GRUPO2, pode ser observado um decaimento das flutuações de velocidades junto ao bocal antes de terminar a região potencial. Este comportamento também foi verificado nos trabalhos de Bogey e Bailly (BOGEY; BAILLY, 2003a) e Andersson *et al.* (ANDERSSON *et al.*, 2005). Andersson *et al.* (ANDERSSON *et al.*, 2005) atribuem este decaimento a diversos fatores, como falta de capacidade numérica, resolução espacial e temporal de suas simulações, e a deficiência do método usado em capturar as características turbulentas junto ao bocal. Por outro lado, o estudo de Bogey e Bailly (BOGEY; BAILLY, 2003a) verificou este decaimento somente em simulações que utilizaram uma condição de contorno turbulenta produzida por um método sintetizador. Entretanto, este decaimento não foi observado em simulações que utilizaram condições de contorno produzidas por outra simulação, chamado de método de mapeamento (ver Sec. 4.7.1). Este poderá ser testado em trabalhos futuros.

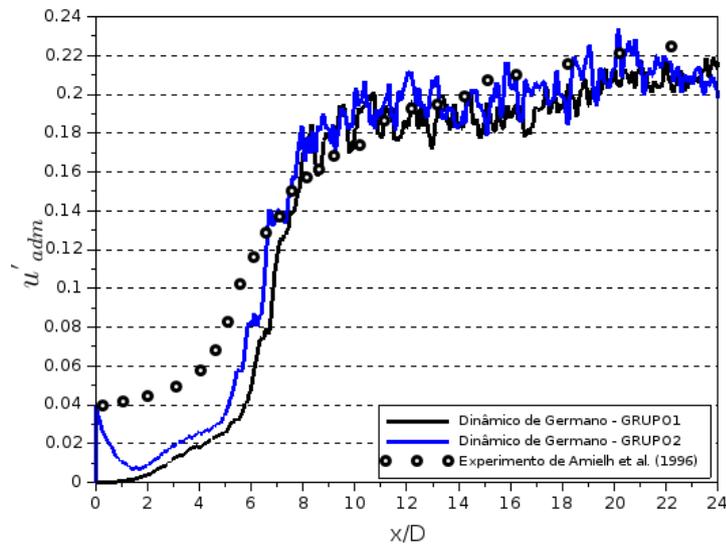


FIGURA 5.50. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $u'_{adm}$  obtidos com o modelo Dinâmico de Germano e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

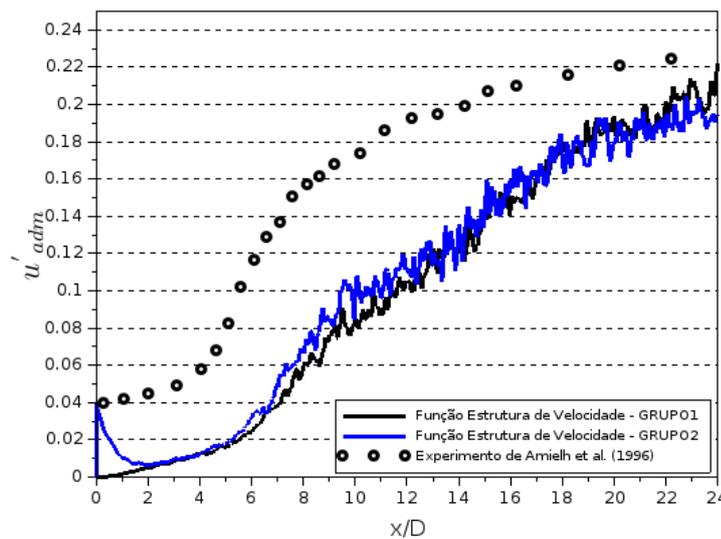


FIGURA 5.51. Comparação entre os perfis axiais das simulações dos GRUPO1 e GRUPO2 de  $u'_{adm}$  obtidos com o modelo Função Estrutura de Velocidades e com os dados experimentais de Amielh *et al.* (1996).

TABELA 5.7. *EQM2* com modelo de Smagorinsky para diferentes valores da constante  $C_s$

$C_s$	GRUPO1	GRUPO2
0,055	0,00305	0,00185
0,060	0,00231	0,00170
0,065	0,00248	0,00221
0,070	0,00414	0,00303

TABELA 5.8. *EQM2* para os três modelos avaliados.

<b>Modelo Submalha</b>	<b>GRUPO1</b>	<b>GRUPO2</b>
Smagorinsky - $C_s = 0,060$	0,00231	0,00170
Dinâmico de Germano	0,00105	0,00056
Função Estrutura de Velocidade	0,00540	0,00441

Os resultados apresentados nesta seção são uma importante evidência de que o desempenho dos modelos submalhas são influenciados pelas condições do escoamento. Fica evidenciado também que alguns modelos têm seu desempenho mais influenciado do que outros, como é o caso do modelo de Smagorinsky, que pouco foi afetado pela modelagem das condições de contorno turbulentas. Essas diferentes sensibilidades dos modelos submalha são decorrentes das grandes não linearidades que existem no sistema de equações que rege o problema físico e nos fundamentos físicos de onde partem as deduções dos modelos submalha.

## 5.6 Ganhos de Desempenho Computacional

O solver PMLES desenvolvido neste trabalho possui uma versão totalmente paralelizada utilizando OpenMP (BOARD et al., 2013), que pode ser executada de forma serial, através da não invocação das bibliotecas OpenMP na etapa de compilação do código e uma versão híbrida OpenMP CUDA Fortran (GROUP et al., 2018b). As simulações para verificação dos ganhos de performance foram realizadas no Cluster SDumont.

Cada nó computacional do Cluster Sdumont em que foram executadas os testes possui 2 processadores Intel Xeon E5-2695v2 Ivy Bridge de 2,4 GHz, com doze processadores cada um, 64 GB DDR3 de memória RAM e 2 placas Nvidia Tesla K40. Cada uma das placas Nvidia Tesla K40 possui 2280 cuda cores com *clock* base de 745 MHz e 12 GB de memória DDR5. Já cada nó do Cluster Fermi, onde foram realizadas as simulações aqui apresentadas, possui 96 GB de memória RAM e dois processadores dodecacore Intel Xeon Silver 4116 de 2,1 GHz de frequência e suporte à *hyper threading*, mais duas GPUs Nvidia Pascal P100 de 16GB de Memória RAM cada uma com 3584 cuda cores com *clock* de referência de 1328 MHz.

TABELA 5.9. Ganhos de desempenho para as técnicas utilizadas

Versão do Código	tempo de simulação (s)	<i>Speedup</i>
Serial - sem GPU	890.0	1.00
OpenMP com 12 <i>threads</i> - sem GPU	104.3	8.5
OpenMP com 24 <i>threads</i> - sem GPU	53.5	16.6
OpenMP CUDA com 24 <i>threads</i> - com GPU	16.2	55.1

Ainda que os ganhos de desempenho não sejam lineares com o número de processadores, pois nem todas as operações podem ser feitas por múltiplos processadores (como as instruções de tomada de decisão por exemplo (GUSTAFSON, 1988)), os ganhos de performance obtidos pela utilização das técnicas discutidas acima foram excelentes. Os resultados de ganhos de performance são apresentados na Tab. 5.9.

Quanto ao custo computacional referente ao uso de cada um dos modelos submalha avaliados, verificamos que o tempo de simulação para os modelos Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidade são similares, sendo ambos  $\sim 21\%$  mais caros do que o modelo submalha de Smagorinsky.

Além do código computacional de simulação PMLES, também foi desenvolvido um código computacional para geração das condições de contorno turbulentas a partir do filtro digital proposto por Klein *et al.* (KLEIN *et al.*, 2003) batizado de *INLETGENERATOR*. Este último foi implementado em Fortran, visando execução paralela por meio de diretivas OpenMP, utilizando apenas recursos de CPU.

O *INLETGENERATOR* não foi implementado em GPU devido à sua alta complexidade em relação às necessidades de sincronização em diversas operações de redução e geração de grandes vetores de números randômicos. Outro aspecto consiste na geração de números randômicos em GPU, que ainda é um desafio tecnológico a ser superado. Por estes motivos, apesar do método de geração de sinal turbulento ser sintetizador, ele não é executado de forma simultânea ao PMLES. Devido ao seu elevado custo computacional, a geração de um plano de condição de contorno em um nó do cluster FERMI demora cerca de 1 minuto. Este custo inviabilizaria as simulações.

Portanto a solução adotada foi gerar um banco de condições de contorno com 1004 planos de entrada adjacentes e utilizá-los de forma periódica, como descrito an-

teriormente no texto. Este conjunto de dados utilizados como condição de contorno foram calculados utilizando um Desktop equipado com processador Intel i7 4790 3.6 GHz e 16 GB de memória RAM. O tempo de execução para obtenção destes dados foi de 22 horas utilizando 8 núcleos. Uma vez gerado o conjunto de dados a ser utilizado como condição de contorno turbulenta, este é carregado pelo PMLES no início de sua execução e utilizado como descrito anteriormente. O custo computacional associado ao uso da condição de contorno turbulenta aumenta o tempo de simulação em 20%, comparado ao uso da CC laminar.

As últimas simulações deste tese foram todas realizadas no cluster FERMI. Para uma simulação configurada para a utilização de 12 CPU e uma GPU, o cálculo de  $2 \times 10^6$  passos de tempo para uma simulação do GRUPO1, utilizando o modelo submalha de Smagorinsky, demora cerca de 110 horas, enquanto que a simulação correspondente para o GRUPO2 demora 132 horas.

O pós-processamento foi realizado utilizando programas também de desenvolvimento próprio e foi dividido em duas etapas, a primeira o pós-processamento primário, que realiza a leitura dos dados de saída do PMLES, que são binários para reduzir seu volume e tempos de escrita, é realizado por um código também desenvolvido em FORTRAN, o PLOTGENERATOR que também possui estrutura e implementação paralela utilizando OpenMP. Este último realiza a manipulação de arquivos em formato binário, tarefa que é facilitada dentro uma mesma linguagem e gera os arquivos no formato ASCII que serão utilizados em softwares de visualização.

A segunda etapa de pós processamento, já envolvendo menor volume de dados e com objetivo de gerar os gráficos, foi realizada por programas desenvolvidos em Scilab 5.5.2. Todo o pós processamento foi realizado em notebook pessoal, por praticidade, demandando algumas vezes a redução do número de *threads* na execução do PLOTGENERATOR por limitações de memória deste tipo de equipamento.



# Capítulo 6

## Conclusões e Trabalhos Futuros

O objetivo principal deste trabalho foi avaliar o efeito da modelagem submalha em LES de jatos turbulentos coaxiais, visando o futuro desenvolvimento de um código para simulação de escoamentos reativos e de massa específica variável. Para alcançar este objetivo, foi desenvolvido um *solver* LES de arquitetura híbrida OpenMP CUDA que chamamos de PMLES, que pode empregar diferentes modelos para descrição do tensor das tensões submalha (Smagorinsky, Dinâmico de Germano e Função Estrutura de Velocidades). Estes modelos apresentam diferentes bases teóricas, complexidade variada, e distintos custos computacionais. Para a realização deste estudo, fez-se uma análise comparativa entre os resultados obtidos por cada modelo para um problema teste, frente a dados experimentais (AMIELH et al., 1996; DJERIDANE et al., 1996).

A escolha do modelo que produz os resultados mais satisfatórios foi feita através da análise comparativa entre perfis de variáveis representativas (velocidades médias, flutuações de velocidade) ao longo das direções axial e radial e de erros quadráticos médios em relação aos dados experimentais. Em nossos resultados, verificamos que houve variações nos desvios observados para cada modelo. Baseado nestes critérios, o modelo submalha de Smagorinsky com  $C_s = 0,060$  foi o que apresentou os melhores resultados para o problema estudado. Isso nos leva a uma das conclusões importantes desta tese, de que nem sempre o modelo mais caro e mais complexo é o melhor.

É claro que até chegarmos nessa qualidade de resultados para o modelo de Smagorinsky, o modelo foi "calibrado" para a solução de jato turbulento coaxial. Foi mostrado que valores inadequados de  $C_s$ , mesmo dentro da faixa proposta na literatura, levaram à soluções muito discrepantes das esperadas. Foi verificado anteriormente

(UZUN et al., 2003; ILYUSHIN; KRASINSKY, 2006; BODONY; LELE, 2008; BRÈS; LELE, 2019) e discutido no texto, que o valor adequado de  $C_s$  a ser utilizado é função das características numéricas do solver e do problema em estudo. Uma interpretação que podemos fazer deste resultado é que o modelo submalha de Smagorinsky, apesar de mais simples e menos custoso comparado aos demais testados, tem condições de simular jatos turbulentos coaxiais de massa específica constante, desde que um valor apropriado para a constante seja usado.

Acreditamos que este resultado deva motivar estudos adicionais sobre a utilização do modelo submalha de Smagorinsky em estudos sistemáticos similares para variados problemas, utilizando o mesmo arranjo numérico, mesma descrição de condição de contorno e de preferência o mesmo *solver*, como sugerido por Brès *et al.* (BRÈS; LELE, 2019). Seguindo esta metodologia, será possível avaliar a sensibilidade do ajuste da constante  $C_s$  para problemas de interesse na engenharia, como por exemplo, escoamentos com misturas de fluidos de diferentes massas específicas e escoamentos reativos. Infelizmente, com base nos resultados obtidos, não podemos afirmar com certeza que a mesma qualidade de resultados seria obtida para outros jatos turbulentos para o mesmo valor de  $C_s$ , ainda que isotérmicos e de massa específica constante. Em escoamentos de massa específica variável e reativos existem mais efeitos influenciando a mecânica do jato, o que pode tornar ainda mais complexo a definição de um valor para  $C_s$ .

Verifica-se que a maioria de simulações LES para jatos com variação de massa específica e jatos reativos na literatura utilizam o modelo Dinâmico de Germano, assumindo que este produzirá resultados de qualidade. O modelo Dinâmico de Germano possui diversas características positivas, sendo a principal não necessitar da definição de uma constante *ad hoc*. Por outro lado, os erros quadráticos médios apresentados para o problema em questão mostram que esta escolha pode não ser adequada frente a qualidade dos resultados obtidos, além de computacionalmente mais cara. Porém deve-se ressaltar que os resultados produzidos pelo modelo Dinâmico de Germano são razoáveis do ponto de vista quantitativo, mas bons do ponto de vista qualitativo. Por exemplo, ao analisar o perfil da Intensidade de turbulência adimensional, verificamos que este modelo produziu os melhores resultados, apresentando uma boa capacidade de capturar o fenômeno de transição para turbulência. Através de sua utilização fo-

ram obtidos os resultados com maior taxa de espalhamento, similares aos propostos pela lei de Similaridade de Chen e Rodi (CHEN; RODI, 1980). Existem aspectos de implementação discutidos por Sagaut (SAGAUT, 2006), em particular quanto aos limites máximos e mínimos para o coeficiente  $C(\mathbf{x}, t)$  (na Eq. 3.47) produzido pelo modelo, que talvez possam melhorar a qualidade destes resultados. Também, resultados com melhor concordância frente aos dados experimentais poderiam ser obtidos através de uma melhor descrição da CC de entrada, a ser avaliada futuramente.

Comportamento oposto foi observado a partir das simulações obtidas com a utilização do modelo Função Estrutura de Velocidades. Embora, segundo Lesieur (LESIEUR et al., 2005), este seja indicado para simular escoamentos onde há a transição à turbulência, em nossas simulações o modelo não apresentou boa capacidade de capturar esta transição e conseqüentemente a transição de regimes do jato. Entretanto, nas simulações que empregaram a condição de contorno turbulenta, a qualidade dos seus resultados melhoraram, e o modelo passou a ser competitivo, apresentando-se como uma opção interessante ao modelo Dinâmico de Germano, sendo este de implementação mais fácil. Analogamente ao que foi comentado no parágrafo anterior, uma melhora da descrição da CC de entrada pode levar a resultados de melhor qualidade. Outro ponto que chama a atenção com relação ao modelo Função Estrutura de Velocidades, é que este não tem sido usado na literatura para simulação de jatos. Portanto, somente com os resultados deste trabalho é arriscado uma conclusão definitiva. Concluímos sim que vale apenas estudar o desempenho do modelo em outros problemas, seja de jatos e outros escoamentos cisalhantes.

Diante dos resultados deste trabalho e estudos prévios da literatura com relação ao efeito da modelagem submalha na simulação de jatos, sugere-se que para um problema desconhecido, que envolva transição de escoamento laminar para turbulento, utilize-se o modelo Dinâmico de Germano. Quando o objetivo seja obter uma simulação de boa qualidade visando estudar um determinado fenômeno em particular, talvez valha a pena buscar um valor adequado da constante  $C_s$  de Smagorinsky antes da sua aplicação.

Com relação à aplicação das condições de contorno turbulenta na entrada, verificamos uma melhora sensível na qualidade dos resultados, embora exista discussão

sobre a real necessidade da inserção destas flutuações de velocidade, como discutido em Bonody e Lele (BODONY; LELE, 2008). O decaimento inicial da intensidade de turbulência adimensional observado para todos os perfis axiais de  $u'_{adm}$  parece ser uma limitação dos métodos sintetizadores de turbulência, uma vez que este comportamento foi observado também em outros trabalhos empregando o mesmo método (KLEIN et al., 2003) ou outros métodos sintetizadores (ANDERSSON et al., 2005; PAYRI et al., 2016). Acreditamos que conforme discutido em Brès *et al.* (BRÈS; LELE, 2019), a modelagem detalhada do escoamento na geometria da entrada poderá ter uma influência maior na qualidade dos resultados. Outros métodos e formas de implementação poderão ser testados em trabalhos futuros.

Outra análise e conclusão importante deste trabalho refere-se à utilização da computação paralela em arquitetura híbrida CPU-GPU. Verificamos que com a utilização de apenas uma GPU, o ganho de *speedup* foi 3 vezes maior comparado a uma simulação que utilizou somente recursos de CPU. O interessante é que este ganho de capacidade de cálculo é obtido com um acréscimo de investimento relativamente baixo, tanto que esta estratégia tem sido aplicada para a expansão da capacidade computacional em diversos centros de computação no mundo. Esta capacidade de cálculo a um relativamente baixo custo viabiliza a utilização de metodologias com custo computacional intermediário como a LES em aplicações industriais, uma vez que, com uma única workstation (devidamente projetada), é possível resolver problemas de grande relevância para a engenharia.

Por outro lado, os códigos abertos (como o OpenFoam por exemplo) ainda não estão adaptados a utilização deste tipo de recurso, e mesmo pacotes comerciais possuem limitações. Essas limitações se devem à complexidade em adequar os códigos existentes para execução em GPU, sendo muitas vezes necessário desenvolver uma nova estratégia de implementação adequada às características das GPU's. Para superarmos esta dificuldade, é necessário que mais profissionais de engenharia familiarizem-se com a programação neste tipo de arquitetura.

De forma geral consideramos que os resultados obtidos neste trabalho foram positivos. Boas previsões das características do jato turbulento em estudo foram obtidas nas simulações, considerando que este é um problema complexo em mecânica dos

fluidos, e vem desafiando pesquisadores há muitos anos. Reforça nosso sentimento a análise feita por Bonody e Lele (BODONY; LELE, 2008), de que, devido às incertezas associadas ao papel dos modelos submalha e às condições de contorno de entrada, as simulações de grandes escalas possui capacidade de predição limitada. De qualquer forma, a utilização da técnica LES em arquiteturas híbridas, seja com GPU's ou aceleradores de computação, pode se tornar de uso corrente no projeto e otimização de processos e equipamentos em um futuro próximo, apresentando um bom equilíbrio entre acurácia e custo computacional.

## 6.1 Trabalhos Futuros

Ao longo do desenvolvimento deste trabalho muitas portas de conhecimento foram abertas e exploradas. Algumas não foram documentadas neste trabalho por não apresentarem contribuições diretas. Outras muitas exploramos até o ponto necessário para resolver o problema de interesse. Ao longo deste processo, portanto, muitas oportunidades de contribuições científicas relacionadas a continuação deste trabalho foram observadas, sendo as principais delas citadas a seguir:

- Analisar a sensibilidade das simulações e análises realizadas quanto ao refinamento de malha.
- Estudar o efeito da resolução da malha junto ao lábio do bocal do jato, uma vez que este tem influência direta na espessura e no desenvolvimento inicial da camada cisalhante e surgimento das primeiras instabilidades.
- Klein *et al.* (2003) (KLEIN et al., 2003) observou diferentes amplitudes deste decaimento para diferentes comprimentos característicos das estruturas turbulentas do sinal modelado. Portanto é possível que o decaimento da intensidade de turbulência observado possa ser amenizado e o resultado como um todo melhorado. Para tanto seria necessário realizar um estudo do efeito do comprimento  $L_c$  das estruturas turbulentas no contorno de entrada.
- Aplicar diferentes metodologias para descrição da CC de entrada turbulenta e reavaliar desempenho dos modelos.

- Estudar a sensibilidade do coeficiente de Smagorinsky para outros jatos.
- Estudar o efeito de diferentes formas de implementação do modelo Dinâmico de Germano. Tanto para os valores limites de  $C_s(\mathbf{x}, t)$  quanto para a forma de calcular os valores médios na malha duplamente filtrada.
- Estudar o efeito da modelagem do tensor de tensões submalha em jatos com massa específica variável.
- Estudar o efeito da modelagem do fluxo escalar submalha em jatos de massa específica variável.
- Estudar formas de otimizar a implementação GPU e expandir o código para implementação Multi-GPU.

# Referências Bibliográficas

- ABRAMOVICH, G. *The theory of turbulent jets*. Tese (Doutorado) — MIT Press, Massachusetts Institute of technology, 1963.
- AGUIRRE, R. C.; CATRAKIS, H. J. On intermittency and the physical thickness of turbulent fluid interfaces. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 540, p. 39–48, 2005.
- ALLAMPALLI, V.; HIXON, R.; NALLASAMY, M.; SAWYER, S. D. High-accuracy large-step explicit runge–kutta (hale-rk) schemes for computational aeroacoustics. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 228, n. 10, p. 3837–3850, 2009.
- AMIELH, M.; DJERIDANE, T.; ANSELMET, F.; FULACHIER, L. Velocity near-field of variable density turbulent jets. *International Journal of Heat and mass transfer*, Elsevier, v. 39, n. 10, p. 2149–2164, 1996.
- ANDERSSON, N.; ERIKSSON, L.-E.; DAVIDSON, L. Effects of inflow conditions and subgrid model on les for turbulent jets. In: *11th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*. [S.l.: s.n.], 2005. p. 2925.
- BARDINA, J.; FERZIGER, J. H.; REYNOLDS, W. C. Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation. In: *American Institute of Aeronautics and Astronautics, Fluid and Plasma Dynamics Conference, 13th, Snowmass, Colo., July 14-16, 1980, 10 p.* [S.l.: s.n.], 1980.
- BATCHELOR, G. K. *The theory of homogeneous turbulence*. [S.l.]: Cambridge university press, 1953.
- BILLSON, M.; ERIKSSON, L.-E.; DAVIDSON, L. Jet noise prediction using stochastic turbulence modeling. In: *9th AIAA/CEAS aeroacoustics conference and exhibit*. [S.l.: s.n.], 2003. p. 3282.
- BISSET, D. K.; HUNT, J. C.; ROGERS, M. M. The turbulent/non-turbulent interface bounding a far wake. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 451, p. 383–410, 2002.
- BITTING, J.; NIKITOPOULOS, D.; GOGINENI, S.; GUTMARK, E. Visualization and two-color dpiv measurements of flows in circular and square coaxial nozzles. *Experiments in fluids*, Springer, v. 31, n. 1, p. 1–12, 2001.

- BLAZEK, J. *Computational fluid dynamics: principles and applications*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 2015.
- BOARD, O. et al. Openmp application program interface. *OpenMP Architecture Review Board, Tech. Rep.*, 2013.
- BODONY, D. J.; LELE, S. K. Current status of jet noise predictions using large-eddy simulation. *AIAA journal*, v. 46, n. 2, p. 364–380, 2008.
- BOGEY, C.; BAILLY, C. Three-dimensional non-reflective boundary conditions for acoustic simulations: far field formulation and validation test cases. *Acta Acustica united with Acustica*, S. Hirzel Verlag, v. 88, n. 4, p. 463–471, 2002.
- BOGEY, C.; BAILLY, C. Les of a high reynolds, high subsonic jet: effects of the inflow conditions on flow and noise. In: *9th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference and Exhibit*. [S.l.: s.n.], 2003. p. 3170.
- BOGEY, C.; BAILLY, C. Les of a high reynolds, high subsonic jet: effects of the subgrid modellings on flow and noise. In: *16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*. [S.l.: s.n.], 2003. p. 3557.
- BOGEY, C.; BAILLY, C. Large eddy simulations of transitional round jets: influence of the reynolds number on flow development and energy dissipation. *Physics of Fluids*, American Institute of Physics, v. 18, n. 6, p. 065101, 2006.
- BOGEY, C.; BAILLY, C. Influence of nozzle-exit boundary-layer conditions on the flow and acoustic fields of initially laminar jets. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 663, p. 507–538, 2010.
- BRÈS, G. A.; LELE, S. K. Modelling of jet noise: a perspective from large-eddy simulations. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, The Royal Society Publishing, v. 377, n. 2159, p. 20190081, 2019.
- CHANDRA, R.; DAGUM, L.; KOHR, D.; MAYDAN, D.; MENON, R.; MCDONALD, J. *Parallel programming in OpenMP*. [S.l.]: Morgan kaufmann, 2001.
- CHASSAING, P.; HARRAN, G.; JOLY, L. Density fluctuation correlations in free turbulent binary mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 279, p. 239–278, 1994.
- CHEN, C. J.; RODI, W. Vertical turbulent buoyant jets: a review of experimental data. *NASA Sti/Recon Technical Report A*, v. 80, 1980.
- CHOI, H.; MOIN, P. Effects of the computational time step on numerical solutions of turbulent flow. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 113, n. 1, p. 1–4, 1994.
- CHOLLET, J.-P.; LESIEUR, M. Parameterization of small scales of three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *Journal of the Atmospheric Sciences*, v. 38, n. 12, p. 2747–2757, 1981.

- CLÓVIS, R. M. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. ISBN 8521613962. 2ª Edição–2004. LTC, 1995.
- DAMASCENO, M. et al. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, v. 104, n. 2, p. 105–132, 2015.
- DAMASCENO, M. M. R. *Modelagem de condições de contorno para escoamentos turbulentos utilizando simulações das grandes escalas*. Dissertação (Mestrado), 2012.
- DEARDORFF, J. W. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 41, n. 2, p. 453–480, 1970.
- DJERIDANE, T.; AMIELH, M.; ANSELMET, F.; FULACHIER, L. Velocity turbulence properties in the near-field region of axisymmetric variable density jets. *Physics of Fluids*, AIP, v. 8, n. 6, p. 1614–1630, 1996.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. *Computational methods for fluid dynamics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012.
- FLYNN, M. J. Very high-speed computing systems. *Proceedings of the IEEE*, IEEE, v. 54, n. 12, p. 1901–1909, 1966.
- FORTUNA, A. d. O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. [S.l.]: Edusp, 2000.
- FREIRE, A. P. S.; MENUT, P. P. M.; JIAN, S. *Turbulência*. [S.l.]: ABCM, 2002. v. 1.
- FREUND, J. B. Nozzles, turbulence, and jet noise prediction. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 860, p. 1–4, 2019.
- FUREBY, C.; TABOR, G.; WELLER, H.; GOSMAN, A. A comparative study of sub-grid scale models in homogeneous isotropic turbulence. *Physics of fluids*, American Institute of Physics, v. 9, n. 5, p. 1416–1429, 1997.
- GAMPERT, M.; KLEINHEINZ, K.; PETERS, N.; PITSCH, H. Experimental and numerical study of the scalar turbulent/non-turbulent interface layer in a jet flow. *Flow, turbulence and combustion*, Springer, v. 92, n. 1-2, p. 429–449, 2014.
- GERMANO, M. Averaging invariance of the turbulent equations and similar subgrid scale modeling. *CTR Manuscript*, v. 116, 1990.
- GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 3, n. 7, p. 1760–1765, 1991.
- GHARBI, A.; RUFFIN, E.; ANSELMET, F.; SCHIESTEL, R. Numerical modelling of variable density turbulent jets. *International journal of heat and mass transfer*, Elsevier, v. 39, n. 9, p. 1865–1882, 1996.
- GROUP, P. et al. Cuda fortran programming guide and reference. *Beaverton: PGI*, 2018.

- GROUP, P. et al. Cuda fortran programming guide and reference. *Beaverton: PGI*, 2018.
- GUSTAFSON, J. L. Reevaluating amdahl's law. *Communications of the ACM*, ACM, v. 31, n. 5, p. 532–533, 1988.
- HAFEZ, M. M.; OSHIMA, K.; KWAK, D. *Computational fluid dynamics review 2010*. [S.l.]: World Scientific, 2010.
- HÄLLQVIST, T. *Large eddy simulation of impinging jets with heat transfer*. Tese (Doutorado) — Royal Institute of Technology, 2006.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*, AIP, v. 8, n. 12, p. 2182–2189, 1965.
- HERMANNNS, M. Parallel programming in fortran 95 using openmp (2002). *School of Aeronautical Engineering, Universidad Politécnica de Madrid, España*, 2011.
- HIRT, C. et al. *SOLA: A numerical solution algorithm for transient fluid flows*. [S.l.], 1975.
- HU, F.; HUSSAINI, M.; MANTHEY, J. Low-dissipation and low-dispersion runge-kutta schemes for computational acoustics. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 124, n. 1, p. 177–191, 1996.
- HUAI, Y. *Large Eddy Simulation in the scalar field*. Tese (Doutorado) — Technische Universität, 2006.
- ILYUSHIN, B.; KRASINSKY, D. Large eddy simulation of the turbulent round jet dynamics. *Thermophysics and Aeromechanics*, Springer, v. 13, n. 1, p. 43–54, 2006.
- JONES, S.; SOTIROPOULOS, F.; SALE, M. *Large-eddy simulation of turbulent circular jet flows*. [S.l.], 2002.
- JORGE, S. C. *EXPLORANDO O PARALELISMO HÍBRIDO NA PROPAGAÇÃO da ONDA ACÚSTICA 3D*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2016.
- KLEIN, M.; SADIKI, A.; JANICKA, J. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of computational Physics*, Elsevier, v. 186, n. 2, p. 652–665, 2003.
- KRAICHNAN, R. H. Eddy viscosity in two and three dimensions. *Journal of the atmospheric sciences*, v. 33, n. 8, p. 1521–1536, 1976.
- KUMAR, M. K.; ABDEL-MAJEED, M. R.; ANNAVARAM, M. Efficient automatic parallelization of a single GPU program for a multiple GPU system. *Integration*, Elsevier, v. 66, p. 35–43, 2019.
- KUO, K. K.-y.; ACHARYA, R. *Fundamentals of Turbulent and Multi-Phase Combustion*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2012.
- LESIEUR, M. *Turbulence in fluids*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 1997.

- LESIEUR, M. *Turbulence in fluids*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 40.
- LESIEUR, M.; MÉTAIS, O.; COMTE, P. *Large-eddy simulations of turbulence*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.
- 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.
- LILLY, K. On the application of the eddy viscosity concept in the inertial sub-range of turbulence. 1966.
- LIPARI, G.; STANSBY, P. K. Review of experimental data on incompressible turbulent round jets. *Flow, turbulence and combustion*, Springer, v. 87, n. 1, p. 79–114, 2011.
- LÖFFLER, M.; PFADLER, S.; BEYRAU, F.; LEIPERTZ, A.; DINKELACKER, F.; HUAI, Y.; SADIKI, A. Experimental determination of the sub-grid scale scalar flux in a non-reacting jet-flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, Springer, v. 81, n. 1, p. 205–219, 2008.
- LORENZON, A.; ANTONELLO, M.; BERTO, F. Critical review of turbulence models for cfd for fatigue analysis in large steel structures. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, Wiley Online Library, 2018.
- LUND, T. S.; WU, X.; SQUIRES, K. D. Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulations. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 140, n. 2, p. 233–258, 1998.
- MAINIERI, P. A. J. *Avaliação da propagação acústica utilizando diferenças finitas tradicionais e DRP*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, 2013.
- MALISKA, C. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional 2a Ed.* [S.l.]: Rio de Janeiro-RJ: LTC-Livros Técnicos e Científicos Editora SA, 2004.
- MARKESTEIJN, A. P.; KARABASOV, S. A. GPU CABARET solutions for the cojen jet noise experiment. In: *2018 AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*. [S.l.: s.n.], 2018. p. 3921.
- MARKESTEIJN, A. P. et al. CABARET GPU solver for fast-turn-around flow and noise calculations. In: *21st AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*. [S.l.: s.n.], 2015. p. 2223.
- MCMILLAN, O. Tests of new subgrid-scale models in strained turbulence. aiaa paper aiaa-80-1339. In: *AIAA 13th Fluid and Plasma Dynamics Conference, Snowmass, Co.* [S.l.: s.n.], 1980.
- MENEVEAU, C.; KATZ, J. Scale-invariance and turbulence models for large-eddy simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 32, n. 1, p. 1–32, 2000.
- MENTER, F. R. Review of the shear-stress transport turbulence model experience from an industrial perspective. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Taylor & Francis, v. 23, n. 4, p. 305–316, 2009.

- MÉTAIS, O.; LESIEUR, M. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 239, p. 157–194, 1992.
- MOIN, P.; SQUIRES, K.; CABOT, W.; LEE, S. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 3, n. 11, p. 2746–2757, 1991.
- MÖLLER, S. V.; SILVESTRINI, J. H. Turbulência. *Fundamentos*, v. 4, 2004.
- MONTORFANO, A.; PISCAGLIA, F.; FERRARI, G. Inlet boundary conditions for incompressible les: A comparative study. *Mathematical and Computer Modelling*, Elsevier, v. 57, n. 7-8, p. 1640–1647, 2013.
- MOREIRA, C. V. J. *Paralelização do Modelo Computacional PLANTAC Utilizando o Ambiente OPENMP*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2011.
- MORGANS, R. et al. Application of the revised wilcox (1998)  $k-\omega$  turbulence model to a jet in co-flow. In: *Second International Conference on CFD in the Mineral and Process Industries, Melbourne, Australia*. [S.l.: s.n.], 1999.
- NYQUIST, H. Certain topics in telegraph transmission theory. *Transactions of the American Institute of Electrical Engineers*, IEEE, v. 47, n. 2, p. 617–644, 1928.
- OZISIK, M. N. *Transferência de calor: um texto básico*. [S.l.]: Guanabara-Koogan, 1990.
- PAYRI, R.; LÓPEZ, J. J.; MARTÍ-ALDARAVÍ, P.; GIRALDO, J. S. Effect of turbulent model closure and type of inlet boundary condition on a large eddy simulation of a non-reacting jet with co-flow stream. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 61, p. 545–552, 2016.
- PERUMAL, D. A.; DASS, A. K. A review on the development of lattice boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer. *Alexandria Engineering Journal*, Elsevier, v. 54, n. 4, p. 955–971, 2015.
- PETRY, A. *Análise numérica de escoamentos turbulentos tridimensionais empregando o método de elementos finitos e simulação de grandes escalas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, The address of the publisher, 2002. Phdthesis.
- PHILIP, J.; MARUSIC, I. Large-scale eddies and their role in entrainment in turbulent jets and wakes. *Physics of Fluids*, AIP, v. 24, n. 5, p. 055108, 2012.
- PIERCE, C. D. *Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion*. Tese (Doutorado) — stanford university, 2001.
- PIERCE, C. D.; MOIN, P. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge Univ Press, v. 504, p. 73–97, 2004.

- PINHO, J.; MUNIZ, A. R. PMLES: A hybrid openMP CUDA source code for LES of turbulent flows. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, v. 13, n. 4, p. 1067–1079, 2020.
- PIOMELLI, U. Large-eddy simulation: achievements and challenges. *Progress in Aerospace Sciences*, Elsevier, v. 35, n. 4, p. 335–362, 1999.
- PITSCH, H. Large-eddy simulation of turbulent combustion. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual reviews, v. 38, p. 453–482, 2006.
- PITTS, W. M. *Effects of global density and Reynolds number variations on mixing in turbulent, axisymmetric jets*. [S.l.]: US Department of Commerce, National Bureau of Standards, 1986.
- PLETCHER, R. H.; TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. [S.l.]: CRC Press, 2012.
- POMRANING, E.; RUTLAND, C. J. Dynamic one-equation nonviscosity large-eddy simulation model. *AIAA journal*, v. 40, n. 4, p. 689–701, 2002.
- POPE, S. B. *Turbulent flows*. [S.l.]: Cambridge university press, 2000.
- QUADROS, A. E. R. *Processamento Paralelo em CUDA Aplicado ao Modelo de Geração de cenários sintéticos de vazões e Energias-GEVAZP*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2016.
- RICOU, F. P.; SPALDING, D. Measurements of entrainment by axisymmetrical turbulent jets. *Journal of fluid mechanics*, Cambridge University Press, v. 11, n. 1, p. 21–32, 1961.
- RODI, W. *Turbulent buoyant jets and plumes: HMT: the science & applications of heat and mass transfer. Reports, reviews & computer programs*. [S.l.]: Elsevier, 2014. v. 6.
- RODI, W. Turbulence modeling and simulation in hydraulics: a historical review. *Journal of Hydraulic Engineering*, American Society of Civil Engineers, v. 143, n. 5, p. 03117001, 2017.
- RODI, W. et al. A review of experimental data of uniform density free turbulent boundary layers. 1975.
- ROUMBAS, G.; KASTRINAKIS, E.; NYCHAS, S. Scalar transport in the near field between two coaxial square air jets. *Experimental Thermal and Fluid Science*, Elsevier, v. 78, p. 229–241, 2016.
- RUETSCH, G.; FATICA, M. Cuda fortran for scientists and engineers. *NVIDIA Corporation*, v. 2701, 2011.
- RUFFIN, E.; SCHIESTEL, R.; ANSELMET, F.; AMIELH, M.; FULACHIER, L. Investigation of characteristic scales in variable density turbulent jets using a second-order model. *Physics of Fluids*, AIP, v. 6, n. 8, p. 2785–2799, 1994.
- SAGAUT, P. *Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006.

- SAGAUT, P. et al. *Multiscale and multiresolution approaches in turbulence: LES, DES and hybrid RANS/LES methods: applications and guidelines*. [S.l.]: World Scientific, 2013.
- SALKHORDEH, S.; MAZUMDAR, S.; LANDFRIED, D. T.; JANA, A.; KIMBER, M. L. Les of an isothermal high reynolds number turbulent round jet. In: AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS DIGITAL COLLECTION. *2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering*. [S.l.], 2014.
- SILVA, C. B. da; LOPES, D. C.; RAMAN, V. The effect of subgrid-scale models on the entrainment of a passive scalar in a turbulent planar jet. *Journal of Turbulence*, Taylor & Francis, v. 16, n. 4, p. 342–366, 2015.
- SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. *Monthly weather review*, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963.
- STANLEY, S.; SARKAR, S. Influence of nozzle conditions and discrete forcing on turbulent planar jets. *AIAA journal*, v. 38, n. 9, p. 1615–1623, 2000.
- TABOR, G. R.; BABA-AHMADI, M. Inlet conditions for large eddy simulation: A review. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 39, n. 4, p. 553–567, 2010.
- TAM, C. K.; WEBB, J. C. Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 107, n. 2, p. 262–281, 1993.
- TAO, B.; KATZ, J.; MENEVEAU, C. Geometry and scale relationships in high reynolds number turbulence determined from three-dimensional holographic velocimetry. *Physics of Fluids*, AIP, v. 12, n. 5, p. 941–944, 2000.
- TRUMPER, M. T.; BEHROUZI, P.; MCGUIRK, J. J. Influence of nozzle exit conditions on the near-field development of high subsonic and underexpanded axisymmetric jets. *Aerospace*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 5, n. 2, p. 35, 2018.
- UZUN, A.; BLAISDELL, G. A.; LYRINTZIS, A. S. Sensitivity to the smagorinsky constant in turbulent jet simulations. *AIAA journal*, v. 41, n. 10, p. 2077–2079, 2003.
- VEDOVOTO, J. M. *Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using a hybrid LES/PDF methodology*. Tese (Doutorado) — Chasseneuil-du-Poitou, Ecole nationale supérieure de mécanique et daérotechnique, 2011.
- VEYNANTE, D.; VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, Elsevier, v. 28, n. 3, p. 193–266, 2002.
- WANG, P.; FRÖHLICH, J.; MICHELASSI, V.; RODI, W. Large-eddy simulation of variable-density turbulent axisymmetric jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier, v. 29, n. 3, p. 654–664, 2008.
- WILSON, R. V.; DEMUREN, A. O. *Numerical simulation of turbulent jets with rectangular cross-section*. [S.l.]: National Aeronautics and Space Administration, Langley Research Center, 1997.

- WILSON, T. et al. *SOLA-DM: A numerical solution algorithm for transient three-dimensional flows*. [S.l.], 1988.
- ZHU, X. et al. AFiD-GPU: a versatile navier–stokes solver for wall-bounded turbulent flows on GPU clusters. *Computer physics communications*, Elsevier, v. 229, p. 199–210, 2018.



# Apêndice A

## Discretização das Equações de Conservação

A Fig. A.1 apresenta todos os fluxos de quantidade de movimento que ocorrem em um volume de controle genérico. Por conta da utilização de malha desencontrada ocorre que cada uma das três componentes de velocidades e a pressão são armazenadas em diferentes locais da malha. A pressão é sempre avaliada no centro da célula, enquanto que as equações de conservação para a quantidade de movimento são sempre integradas sobre as faces das células que estão sob análise. Essa localização das grandezas na malha são representadas matematicamente pelos índices da Fig. A.1.

Uma vez que na linguagem fortran não é possível a utilização de índices fracionários convencionou-se adicionar o valor de  $\frac{1}{2}$  a todos os índices deslocados, de modo que passou-se a trabalhar sempre com índices inteiros, utilizando este artifício a Fig

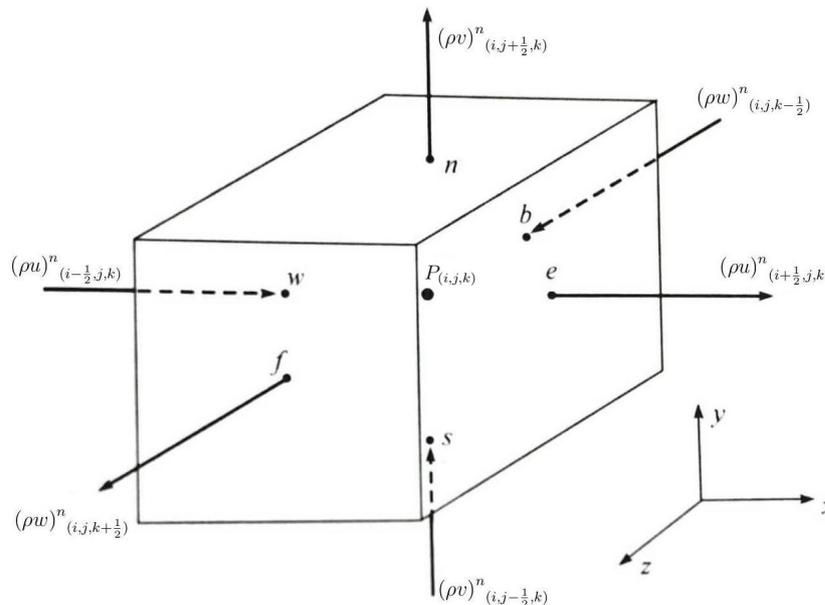


FIGURA A.1. Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado, adaptado de Ferziger (2012).

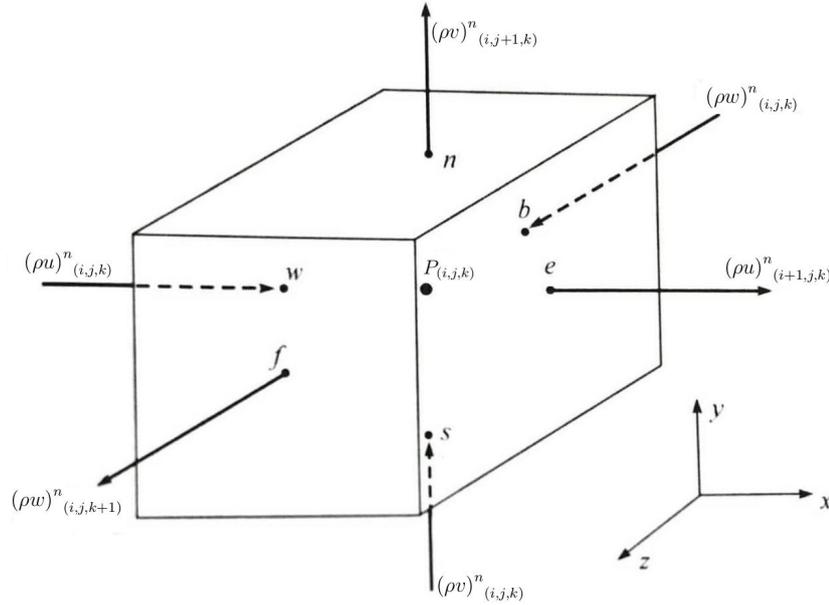


FIGURA A.2. Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado, ajustado para implementação em Fortran.

A.1 pode ser rerepresentada na Fig. A.2

Expandindo a Eq. 3.27 em suas componentes, tem -se

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \right) \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y \partial z} \right) \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w w)}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 v}{\partial z \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (\text{A.3})$$

Será desenvolvida a integração da equação de conservação da quantidade de movimento para a direção  $x$ . As demais poderão ser desenvolvidas por procedimento análogo. Seguindo o método Runge-Kutta simplificado, Eq. 4.7, sendo que nosso objetivo é obter  $u^{n+1}_{(i+1,j,k)}$ , a Eq. A.1 é escrita como

$$u^{n+1}_{(i+1,j,k)} = u^n_{(i+1,j,k)} + \frac{\alpha \Delta t}{\rho_e(i,j,k)} \left[ -ADVEC x^n_{(i+1,j,k)} + DIFF x^n_{(i+1,j,k)} - \frac{P_{(i+1,j,k)} - P_{(i,j,k)}}{\Delta x} \right] \quad (\text{A.4})$$

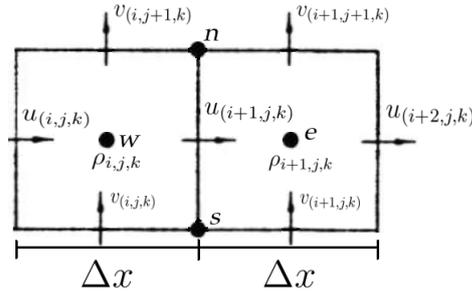


FIGURA A.3. Localização das grandezas na malha para discretização dos termos convectivos (para facilitar a visualização somente é mortrado o plano  $xoy$ ).

em que

$$ADVEC x^n_{(i+1,j,k)} = \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} \Big|_{(i+1,j,k)} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} \Big|_{(i+1,j,k)} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} \Big|_{(i+1,j,k)} \quad (A.5)$$

$$DIFFX^n_{(i+1,j,k)} = \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i+1,j,k)} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{(i+1,j,k)} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \Big|_{(i+1,j,k)} \right) + \frac{1}{3} \frac{\mu_e}{Re} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i+1,j,k)} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} \Big|_{(i+1,j,k)} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \Big|_{(i+1,j,k)} \right) \quad (A.6)$$

Os termos do lado direito da Eq. A.5 podem ser escritos a partir da análise da Fig. A.3, que ilustra somente o plano  $xoy$  para facilitar a visualização, podendo a análise ser expandida para o plano  $xoz$  por analogia, de modo que

$$\frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{(\rho u)_{ex} u_{ex} - (\rho u)_{wx} u_{wx}}{\Delta x} \quad (A.7)$$

$$\rho_e = \rho_{i+1,j,k} \quad \rho_w = \rho_{i,j,k}$$

$$u_e = \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i+2,j,k}}{2} \quad u_w = \frac{u_{i,j,k} + u_{i+1,j,k}}{2}$$

$$\frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{(\rho u)_{nx} v_{nx} - (\rho u)_{sx} v_{sx}}{\Delta y} \quad (A.8)$$

$$\rho_{nx} = \frac{\rho_{i,j,k} + \rho_{i+1,j,k} + \rho_{i,j+1,k} + \rho_{i+1,j+1,k}}{4}$$

$$\rho_{sx} = \frac{\rho_{i,j,k} + \rho_{i+1,j,k} + \rho_{i,j-1,k} + \rho_{i+1,j-1,k}}{4}$$

$$u_{nx} = \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j+1,k}}{2} \quad u_{sx} = \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j-1,k}}{2}$$

$$v_{nx} = \frac{v_{i+1,j+1,k} + v_{i,j+1,k}}{2} \quad v_{sx} = \frac{v_{i+1,j,k} + v_{i,j,k}}{2}$$

$$\frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{(\rho u)_{fx} w_{fx} - (\rho u)_{bx} w_{bx}}{\Delta z} \quad (\text{A.9})$$

$$\rho_{fx} = \frac{\rho_{i,j,k} + \rho_{i+1,j,k} + \rho_{i,j,k+1} + \rho_{i+1,j,k+1}}{4}$$

$$\rho_{bx} = \frac{\rho_{i,j,k} + \rho_{i+1,j,k} + \rho_{i,j,k-1} + \rho_{i+1,j,k-1}}{4}$$

$$u_{fx} = \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j,k+1}}{2} \quad u_{bx} = \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j,k-1}}{2}$$

$$w_{fx} = \frac{w_{i+1,j,k+1} + w_{i,j,k+1}}{2} \quad w_{bx} = \frac{w_{i+1,j,k} + w_{i,j,k}}{2}$$

Os termos do lado direito da Eq. A.6 também são descritos a partir da análise da célula genérica da Fig. A.2, resultando em

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{u_{i,j,k} - 2u_{i+1,j,k} + u_{i+2,j,k}}{\Delta x^2} \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{u_{i+1,j+1,k} - 2u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j-1,k}}{\Delta y^2} \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{u_{i+1,j,k+1} - 2u_{i+1,j,k} + u_{i+1,j,k-1}}{\Delta z^2} \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{v_{i+2,j+1,k} - v_{i+2,j-1,k} - v_{i,j+1,k} + v_{i,j-1,k}}{\Delta y^2} \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \Big|_{(i+1,j,k)} = \frac{w_{i+2,j,k+1} - w_{i+2,j,k-1} - w_{i,j,k+1} + w_{i,j,k-1}}{\Delta z^2} \quad (\text{A.14})$$

## Apêndice B

### Discretização da Equação de Conservação da Massa (Dilatação)

A determinação da correção da pressão  $\delta P_{i,j,k}$  para corrigir o campo de pressão requer o cálculo do desvio que ocorre na equação de conservação da massa, ou seja da dilatação  $D_{i,j,k}$ . Para escoamentos com variação de massa específica a discretização da Dilatação se dá a partir da análise da Fig. B.1, em que

$$D_{i,j,k} = \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \Big|_{i,j,k} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \Big|_{i,j,k} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \Big|_{i,j,k}, \quad (\text{B.1})$$

onde as massas específicas nas faces são obtidas por meio de médias aritméticas.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \Big|_{i,j,k} = \frac{\rho_e u_e - \rho_w u_w}{\Delta x} \quad (\text{B.2})$$

$$\rho_e = \frac{\rho_{i+1,j,k} + \rho_{i,j,k}}{2} \quad \rho_w = \frac{\rho_{i-1,j,k} + \rho_{i,j,k}}{2}$$

$$u_e = u_{i+1,j,k} \quad u_w = u_{i,j,k}$$

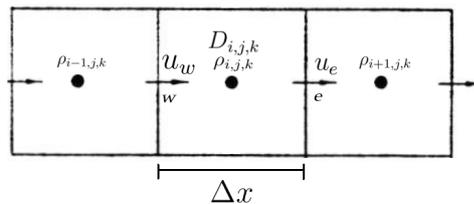


FIGURA B.1. Localização das grandezas na malha em um arranjo deslocado .

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \Big|_{i,j,k} = \frac{\rho_n v_n - \rho_s v_s}{\Delta y} \quad (\text{B.3})$$

$$\rho_n = \frac{\rho_{i,j+1,k} + \rho_{i,j,k}}{2} \quad \rho_s = \frac{\rho_{i,j-1,k} + \rho_{i,j,k}}{2}$$

$$v_n = v_{i,j+1,k} \quad v_s = v_{i,j,k}$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \Big|_{i,j,k} = \frac{\rho_f w_f - \rho_b w_b}{\Delta z} \quad (\text{B.4})$$

$$\rho_f = \frac{\rho_{i,j,k+1} + \rho_{i,j,k}}{2} \quad \rho_b = \frac{\rho_{i,j,k-1} + \rho_{i,j,k}}{2}$$

$$w_f = w_{i,j,k+1} \quad w_b = w_{i,j,k}$$

# Apêndice C

## Técnicas de Paralelização

Existem distintas arquiteturas de computadores. Para cada tipo de arquitetura é utilizado um tipo de estratégia para que o paralelismo possa ser explorado. O modelo de classificação da arquiteturas proposto por Flynn (FLYNN, 1966) fornece uma boa aproximação do que temos atualmente. A classificação de Flynn se dá em termo do fluxo de execução de instruções e tratamento de dados em paralelo, propondo então:

- SISD (*Single Instruction / Single Data Stream*) - Um fluxo de instruções atuando sobre um fluxo de dados;

- SIMD (*Single Instruction Stream / Multiple Data Stream*) - Todas as unidades de processamento executam o mesmo conjunto de instruções em um diferente conjunto de dados;

- MISD (*Multiple Instruction Stream / Single Data Stream*) - Múltiplos fluxos de instruções atua sobre um fluxo de dados;

- MIMD (*Multiple Instruction Stream / Multiple Data Stream*) - Múltiplos fluxos de instruções atuando sobre vários fluxos de dados.

A base da computação científica e até mesmo doméstica está estruturada sobre a arquitetura MIMD. Os computadores possuem vários processadores independentes executando instruções sobre dados distintos. Com o objetivo de otimizar e padronizar, viabilizando a portabilidade dos códigos, foram desenvolvidos modelos de sistemas de programação paralela. Em termos de execução paralela em CPU os sistemas mais importante são os sistemas de memória compartilhada (*Shared Memory / Multithreads*) e os sistema de memória distribuída (*Distributed Memory / Message Passing*).

A partir da metade da década passada surgiu outra atrativa alternativa para para a aceleração da computação científica. Em 2006 a NVIDIA lançou sua primeira placa de vídeo do tipo GP-GPU (*General Purpose Computing on Graphics Processing Unit*) e em 2007 foi lançada uma plataforma de programação paralela para GPU chamada CUDA. A partir de então, a utilização de GPU's passou a chamar a atenção da comunidade científica e ganhar popularidade em função da quantidade de processadores que podem possuir. Enquanto que uma CPU normalmente para computação científica tem um número de processadores da ordem de dezenas uma GPU possui milhares de processadores, como ilustra a Fig. C.1.

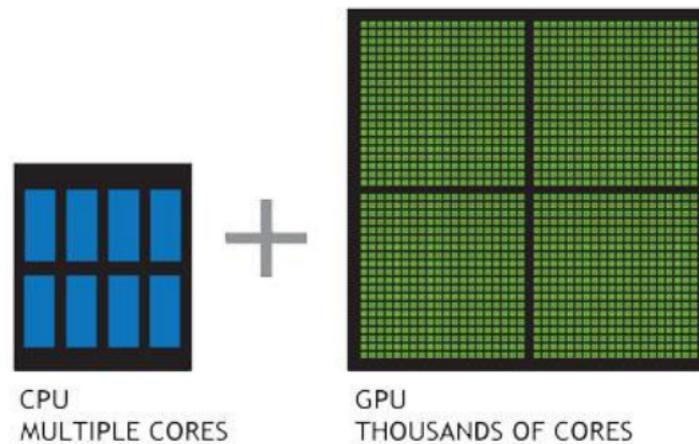


FIGURA C.1. Comparação entre a quantidade de processadores de uma CPU e de uma GPU.

A arquitetura das GPU não se enquadram na classificação de Flynn, e está baseada em um novo conceito chamado de SIMT (*Single Instruction Multiple Thread*), que veremos na sequência do texto onde trataremos das peculiaridades relacionadas ao interesse deste trabalho para cada um destes sistemas de programação paralela. O leitor que desejar se aprofundar nestes assuntos pode consultar os trabalhos de Hermanns (HERMANNNS, 2011), de Moreira (MOREIRA, 2011), de Jorge (JORGE, 2016) e de Quadros (QUADROS, 2016) que apresentam uma ampla discussão acerca de cada um destas alternativas de computação paralela.

### C.0.1 Sistemas de Memória Compartilhada

Sistemas de memória compartilhada possuem vários processadores que fazem uso de uma única memória. A Fig. C.2 é bastante representativa deste tipo sistema. Neste tipo de programação não é necessário especificar explicitamente a comunicação entre os processos, de modo que cada posição da memória pode ser lida ou gravada por qualquer processador.

A comunicação entre os processadores se dá através de variáveis compartilhadas armazenadas na memória do sistema. O programador deve também especificar as variáveis que serão de uso exclusivo de cada processador, de modo a garantir que os diferentes processadores não tentem modificar o mesmo espaço de memória ao mesmo tempo. Nestas situações uma cópia desta variável dita privada é criada para cada processador.

A programação paralela para sistemas de memória compartilhada é realizada pela utilização do padrão OpenMP (*Open Multi-Processing*). A estrutura do OpenMP está constituída de três componentes básicos, que são *i*) Diretivas de Compilação; *ii*) Bibliotecas de Execução; *iii*) Variáveis de Ambiente.

O que o OpenMP faz é definir um processo automático de paralelização guiado pelo usuário, em que o compilador transforma um código, que é desenvolvido para

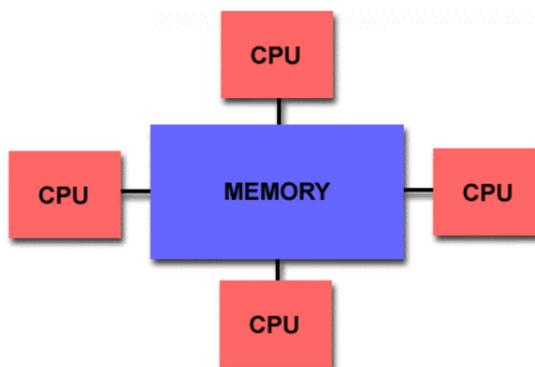


FIGURA C.2. Arquitetura de um sistema de memória compartilhada.

execução *serial*, em uma versão paralela guiando-se pelas diretivas inseridas pelo programador (CHANDRA et al., 2001). Desta forma o compilador não faz uma análise completa do código, mas somente nas regiões indicadas pelo programador.

O executável criado pelo compilador utilizando OpenMP é baseado no conceito de *threads*, que de forma simplificada pode ser vista como uma linha única de execução de instruções. Através do padrão *fork - join* o compilador então divide a execução de uma determinada tarefa para as diversas *threads* definidas pelo programador. Neste ponto cabe observar que, embora possível, o ideal é utilizar um número de *threads* como sendo no máximo o número de núcleos disponíveis no hardware. O trabalho de Hermanns (HERMANNNS, 2011) se configura como uma interessante referência para o leitor que tem interesse em aprender sobre como e onde aplicar adequadamente as diretivas OpenMP.

## C.0.2 Sistemas de Memória Distribuída

Sistemas de computação de memória distribuída são sistemas em que múltiplas tarefas de processamento são iniciadas e distribuídas para os processadores disponíveis no ambiente, de modo que cada processador utiliza seu próprio endereçamento de memória. As tarefas executadas pelos diferentes processadores compartilham dados através de comunicações explícitas, definidas pelo programador, de envio e recebimento de mensagens (*Message Passing*), normalmente realizado por meio de uma rede.

Em sistemas de memória distribuída requer-se a cooperação das operações realizadas pelos processos. De modo que quando há uma operação de envio de dados por um processo, deve haver uma correspondente operação de recebimento de dados. Estas operações de envio e recebimento, dependendo do tamanho dos dados e configuração do sistema, não precisam obrigatoriamente ocorrer simultaneamente.

Devemos notar que essa transferência de dados por meio de uma rede consome tempo. Dependendo da granularidade do código, podem ocorrer situações em que o tempo gasto para realizar todas as transferências de informações seja maior do que o tempo de execução das instruções. Este tipo de caso ocorre quando tem-se granularidade fina, situação em que o tempo gasto pelos processos para executar as instruções é

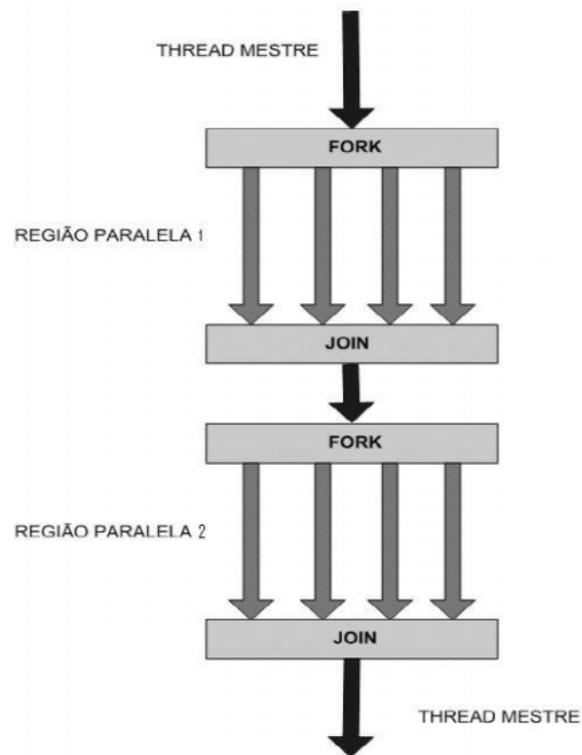


FIGURA C.3. Conceito *fork-join* utilizado pelo padrão OpenMP

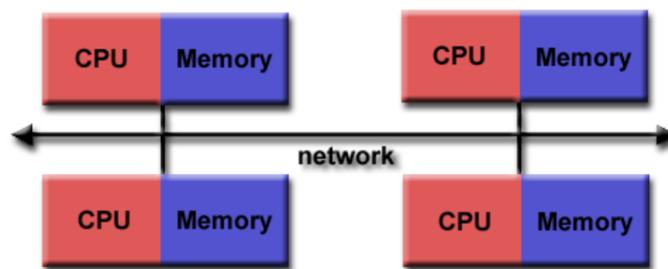


FIGURA C.4. Arquitetura de um sistema de memória distribuída.

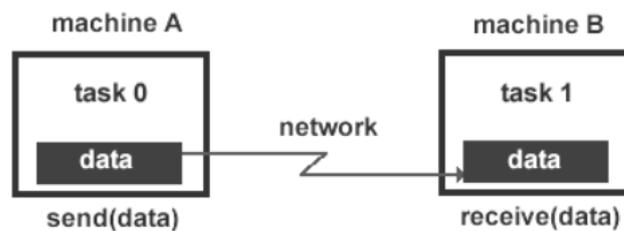


FIGURA C.5. Ilustração do envio e recebimento de dados.

de ordem semelhante ou menor de que o tempo gasto nas instruções de comunicação.

O padrão de programação em sistemas de memória distribuída é o MPI (*Message Passing Interface*) que, apesar de não ser uma biblioteca, específica como devem ser as bibliotecas. Neste trabalho foram feitos alguns experimentos utilizando MPI, entretanto não foram observados ganhos de performance consistente, em função da pequena granularidade, de modo que optou-se por não aprofundar os estudos nesta técnica.



# Apêndice D

## Verificação do Código

O código desenvolvido para resolver o problema proposto possui cerca de 5500 linhas. A busca por erros de implementação e por erros de lógica são uma etapa importante na tarefa de desenvolvimento. Ocorre ainda, que, por conta da elevada não linearidade dos sistemas de equações, erros aparentemente desprezíveis podem ser bastante amplificados podendo assim comprometer os resultados obtidos.

A verificação do código ao longo do seu desenvolvimento foi realizada seguindo as sugestões de Maliska (MALISKA, 2004), que sugere a utilização de problemas simples que possuam uma solução analítica. Portanto apresentaremos a seguir dois dos testes realizados, o primeiro com o objetivo verificar a implementação da discretização das derivadas espaciais dos termos difusivos, dos termos convectivos e do acoplamento pressão velocidade em regime permanente, assim como as condições de contorno. O segundo teste foi realizado com o objetivo de avaliar se a implementação do método Runge-Kutta foi realizada de forma adequada. O primeiro foi um escoamento bidimensional em regime permanente e o segundo um problema de transferência de calor unidimensional.

### D.1 Escoamento Entre Placas Planas Paralelas

O primeiro problema teste foi o escoamento laminar em regime permanente entre placas planas paralelas, ilustrado em Fig. D.1. Este escoamento foi escolhido devido

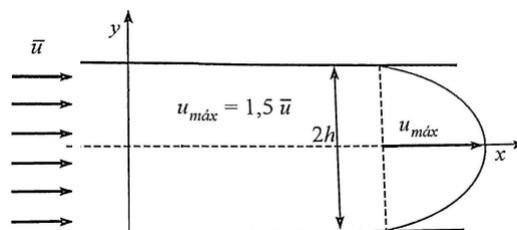


FIGURA D.1. Problema para verificação da solução do escoamento laminar entre placas planas paralelas.

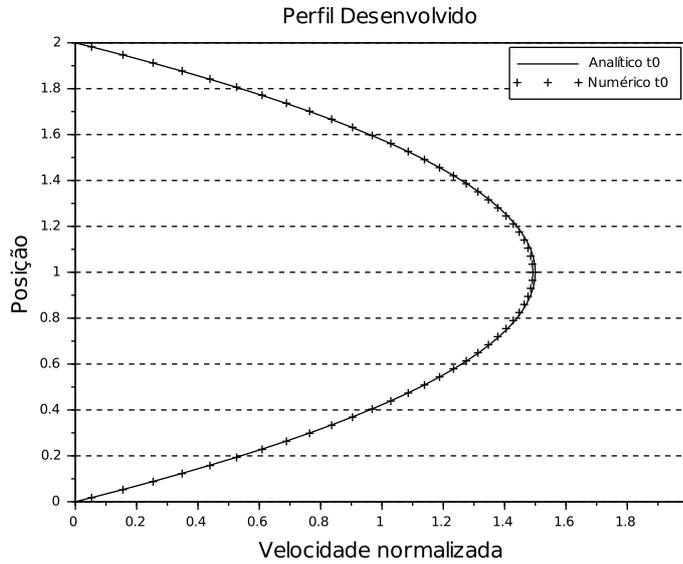


FIGURA D.2. Perfil de velocidades obtido pela solução do escoamento laminar entre placas planas paralelas.

ao mesmo possuir solução analítica dada por

$$u(y) = 1,5\bar{u} \left[ 1 - \left( \frac{y}{h} \right)^2 \right], \quad (\text{D.1})$$

O código tridimensional foi utilizado para resolver este problema e então ser verificado. Para resolver o escoamento bidimensional utilizando o código tridimensional as condições de contorno em uma das direções normais a direção preferencial do escoamento foram definidas como de fluxo nulo. O problema da Fig. D.1 é regido pelas equações Eq. 2.14 e Eq. 2.19 com as condições de contorno  $\bar{u}_1 = 1$  e  $\bar{u}_2 = \bar{u}_3 = 0$  em  $x = 0$ . Para as fronteiras  $y = 0$  e  $y = 2h$  são definidas  $\bar{u}_1 = \bar{u}_2 = \bar{u}_3 = 0$ , enquanto para as fronteiras normais a direção  $z$ , tem-se  $\frac{\partial u_i}{\partial z} = 0$  e para a fronteira de saída uma condição de contorno para escoamento plenamente desenvolvido,  $\frac{\partial u_i}{\partial x} = 0$ .

Para o problema descrito acima, para um número de Reynolds  $Re = 100$  após o comprimento de entrada, foi obtido um perfil parabólico de velocidades consistente com a solução analítica, como pode ser visto em Fig. D.2, mostrando a capacidade do código de resolver o problema de advecção.

## D.2 Difusão Unidimensional Transiente

A verificação do tratamento dado as derivadas temporais foi feita mediante a solução de um problema de difusão de calor unidimensional transiente

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} \quad (\text{D.2})$$

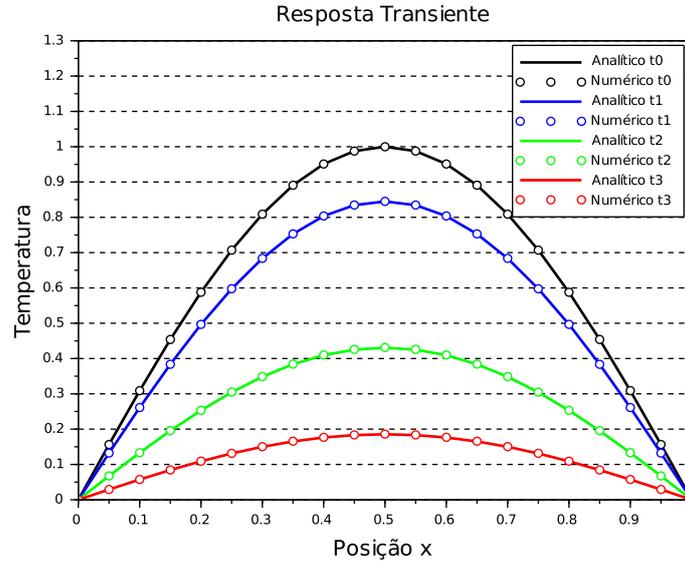


FIGURA D.3. Verificação da solução transiente. Os tempos adimensionais analisados são  $t_0 = 0$ ,  $t_1 = 1,708E-2$ ,  $t_2 = 8,5387491E-2$  e  $t_3 = 0,1707749$ .

em  $\xi$  é um escalar conservado, no presente problema temperatura, e  $\alpha$  é a difusividade deste escalar no meio em análise. O problema aqui analisado é apresentado e resolvido analiticamente em Ozisik (OZISIK, 1990), e consiste em uma placa infinita nas direções  $y$  e  $z$  e espessura  $L_{ver} = 1$ , inicialmente, em  $t = 0$ , com uma distribuição de temperatura dada por

$$\xi(x, 0) = \xi_0 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad (D.3)$$

sendo  $\xi_0 = 1$ ,  $\xi(0, t) = 0$ ,  $\xi(L, t) = 0$  e  $\alpha = 1$ . A solução analítica do problema é dada por

$$\xi(x, t) = \xi_0 \exp(-\alpha \lambda_1^2 t) \sin(\lambda_1 x), \quad (D.4)$$

onde  $\lambda_1 = \pi/L$ . A discretização espacial foi realizada utilizando esquema de segunda ordem central, enquanto que a integração temporal foi conduzida pelo método Runge-Kutta de segunda ordem de três passos apresentado na seção 4.4. O passo de tempo da integração foi selecionado utilizando o valor crítico para  $CFL$ , sendo para este caso 0,69, como dado em Tab. 4.1. Como pode ser verificado na Fig. D.3, para estas condições a solução numérica é coincidente com a solução analítica o que nos indica que o código captura de forma adequada a evolução temporal das variáveis em estudo.



## **Apêndice E**

**Artigo Publicado na Revista *Journal of Applied Fluid Mechanics***



## PMLES: A Hybrid Open MP CUDA Source Code for LES of Turbulent Flows

### ABSTRACT

The occurrence of turbulent flows is quite common in nature and several industrial applications. The accurate simulation of these complex flows is still a great challenge in science. Large Eddy Simulation (LES) is an efficient technique based on the elimination of all scales of a flow smaller than a characteristic length  $\Delta$ , considering that the flow pattern in small scales is homogeneous and isotropic. Therefore, modeling of turbulence in such scales is universal and independent of the flow type. This work present PMLES, a new OpenMP CUDA Fortran solver for complex turbulent flows at high Reynolds numbers and large computational domains (about  $1 \times 10^8$  cells), using a single GPU card. This was possible by using an economical numerical scheme associated with a robust and efficient solution method that requires little variable storage. Theoretical and numerical aspects are firstly discussed, and then details of the computational implementation are given. Finally, the developed code is tested and validated by simulating a turbulent jet, and comparing the results with experimental and computational data from the literature. An analysis of performance gain is also carried out, demonstrating the code's ability to solve this class of problems with a considerable reduction in computational time.

**Keywords:** CUDA; Open MP; LES; Numerical simulation; Turbulence.

### NOMENCLATURE

$CFL$	Courant-Friedrichs-Lewy condition	$u^-$	mean axial velocity
$CFL_{critic}$	Critic-Courant Friedrichs-Lewy condition	$v\Delta$	subgrid characteristic velocity
$C_{i,j}$	cross-stress tensor	$x_i$	i direction
$C_s$	Smagorinsky constant	$z$	instantaneous z-direction velocity
$D$	nozzle diameter	$(\sigma_{ij})_{sgs}$	subgrid-scale stress tensor
$Dil$	dilatation	$ \bar{S} $	Frobenius norm
$Dm$	domain of filtering operation	$\Delta$	grid filter
$f$	generic function	$\Delta t$	time step
$G$	filter functions	$\Delta t_{conv}$	convective time step
$H$	transverse length of domain	$\Delta t_{dif}$	diffusive time step
$L$	preferential length of domain	$A$	gradient operator
$L_{i,j}$	Leonard-stress tensor	$\mu$	viscosity
$L_K$	Kolmogorov dissipative scale	$\mu_e$	effective viscosity
$L_\lambda$	length of Taylor micro-scale	$\mu_t$	turbulent viscosity
$N_i$	Cells number in i-direction	$\alpha_i$	Runge-Kutta coefficient
$p$	pressure	$\delta$	dimensional filter
$r$	radial distance of center domain	$\delta p$	pressure correction
$Re$	Reynolds number	$\delta u_i$	i-direction velocity correction
$u$	instantaneous x-direction velocity	$\rho$	density
$u_i$	instantaneous i-direction velocity	$\tau_K$	characteristic Kolmogorov time
$U_j$	jet velocity	$\tau_\lambda$	time of Taylor micro-scale
$u'$	turbulent axial intensity	$\Phi$	time dependent variable
$v$	instantaneous y-direction velocity		
$u^-_{NAS}$	mean max axial velocity		