

Relatório de estudos individual

Péttersen Vinícius Pramiu

26 de abril de 2017

Sumário

1	Introdução	2
2	Revisão e conceitos fundamentais	3
2.1	Tensores	5
2.1.1	Convenção do somatório de Einstein e notação indicial	6
3	Turbulência	9
3.1	Médias e filtros	11
3.1.1	Médias de Reynolds	12
3.1.2	Separação de escalas	13
3.2	Simulação de grandes escalas - LES	14

Capítulo 1

Introdução

Este relatório objetiva registrar de forma detalhada e sistemática as atividades de pesquisa e estudos relacionados à temática de proposta de tese do autor. Nele serão revistos alguns conceitos fundamentais de mecânica do contínuo, mecânica de fluidos, métodos numéricos em equações diferenciais, instalação e configuração de bibliotecas para implementação computacional como PETSc e MPI, entre outros. Exemplos da resolução de sistemas de equações lineares e da solução de algumas EDPs como a equação de Laplace, de Poisson, da equação do calor transiente e da equação de Stokes serão resolvidos detalhadamente em diferenças finitas ou volumes finitos, empregando malhas estruturadas e em programação serial ou paralela. A linguagem selecionada para implementação dos códigos fonte é a linguagem C, e alguns exemplos também serão ilustrados e implementados em Scilab. Com a realização destes exemplos espera-se obter os requisitos necessários para compreensão de trabalhos e implementação de código computacional envolvendo simulações em escoamentos turbulentos empregando o método de Simulação de Grandes Escalas - *Large Eddy Simulation*.

Capítulo 2

Revisão e conceitos fundamentais

- Tensores
- Notação indicial
- Levi-Civita e Delta Kronecker
- Operadores DEL e Nabla
- Teoremas fundamentais

Esta seção foi escrita tendo como referência principal o livro de [?]. Ela objetiva apresentar uma breve e concisa revisão conceitual, relevantes ao entendimento e desenvolvimento das seções futuras. Divididos entre mecânica do contínuo e mecânica dos fluidos, é ilustrada a notação indicial, os símbolos delta de Kronecker, símbolo de permutação (Levi-Civita) e alguns operadores, além de verificações de algumas identidades frequentemente utilizadasmelhorar!!!

Pode-se definir mecânica como o ramo da física que estuda o comportamento de um corpo quando ele é submetido a forças, (por exemplo, deformação) e como ele se comporta ao longo do tempo. Em geral e de acordo com [?], ela pode ser dividida em:

- Mecânica Teórica;
- Mecânica Aplicada;
- Mecânica Computacional;

A Mecânica Teórica estabelece as leis que regem um problema físico específico baseado em princípios fundamentais. A Mecânica Aplicada transfere o conhecimento teórico para usá-los em engenharia científica e na resolução de problemas. A Mecânica Computacional resolve problemas com

auxílio de simulação computacional Neste livro concentramos nossa atenção na Mecânica Teórica e Aplicada. A seguir serão apresentados alguns conceitos relacionados à mecânica do contínuo.

Em termos gerais, a mecânica do contínuo estuda o movimento (deformação) de um meio que consiste em matéria sujeita a forças. Um corpo físico consiste de pequenas moléculas (uma aglomeração de dois ou mais átomos), e então, por meio de experimentos sofisticados, pode-se observar que esses "constituintes" não são distribuídos de forma homogênea, ou seja, existem espaços vazios entre eles. No entanto, dentro do escopo da mecânica do contínuo estas características fenomenológicas são desconsideradas.

A hipótese fundamental na mecânica do contínuo é que a matéria de que compõe o meio em estudo é continuamente distribuída e que as variáveis envolvidas no problema (por exemplo, velocidade, aceleração, pressão, densidade de massa, etc.) são funções contínuas. Em seguida, por meio de aproximações ou equações adicionais, pode-se caracterizar um contínuo com variáveis descontínuas associadas ao problema (fratura, ondas de choque, entre outros).

Na maioria das vezes, ao aplicar uma força a corpos sólidos eles são capazes de recuperar seu estado/formato original com a remoção da força. No entanto, isto não ocorre com fluidos, ou seja, sólidos e fluidos aparentemente se comportam de forma distinta ao receberem solicitações. Tradicionalmente, a mecânica do contínuo é dividida em dois grupos: mecânica dos sólidos e mecânica dos fluidos (líquidos e gases). No entanto, as equações fundamentais da mecânica do contínuo são as mesmas para ambos.

A ciência dos materiais pode ser estudada em diferentes escalas, que são classificadas como [?]:

- Nível métrico: Neste nível, está a maior parte dos problemas práticos em Engenharia Civil, Mecânica, Aeroespacial.
- Nível milimétrico: Neste nível, pode-se registrar a amostra utilizada para medir as propriedades mecânicas do material no laboratório.
- Nível micrométrico: São observadas nesta escala características micro-estruturais, tais como micro-defeitos e produtos da hidratação cimentícia.
- Nível nanométrico: Neste nível, contemplam-se os processos atômicos e moleculares.

A mecânica do contínuo atua num nível macroscópico. Ou seja, as variáveis do problema a nível macroscópico são considerados como sendo a média destas variáveis ao nível de mesoescala. Considerando como exemplo o sangue, que pode ser tratado de diferentes maneiras, dependendo da escala em consideração. Numa escala $10^{-6}m$ considera-se o escoamento de sangue que flui ao redor de uma hemácia onde a deformação das paredes celulares é levada em consideração. Em uma escala de $10^{-4}m$, pode-se considerar o fluxo de fluido através de um conjunto de células sanguíneas,

o que nos permite observar o efeito do fluido sobre as células. Em seguida, numa escala de $10^{-3}m$ escala (nível macroscópico), é possível considerar o fluxo de líquido através de artérias ou veias (ignorando células individuais) como sendo um fluido com certas propriedades macroscópicas, por exemplo, velocidade, pressão, etc [?].

Outro exemplo é o de um material composto por uma mistura de materiais - como o concreto, que é formado fundamentalmente pela mistura de cimento, agregados e água. Na escala $10^{-9}m$, pode-se distinguir a estrutura atômica do cimento e agregados. Numa escala $10^{-9}m$ é possível identificar grãos de cimento individuais antes da hidratação e grãos de silicato de cálcio e hidróxido de cálcio podem ser avaliados, após a hidratação. Finalmente, a $10^{-3}m$, pode-se distinguir individualmente cada um dos agregados e poros (lacunas). Note-se, neste nível, que a interação entre partes de cimento e agregados é importante. Na escala métrica de $10m$ e na escala laboratorial de $1m$, a estrutura interna do concreto pode ser examinada para assegurar que suas propriedades sejam idênticas em todas as direções e em todos os seus pontos, que é o que caracteriza um material homogêneo e isotrópico [?].

2.1 Tensores

Como já mencionado, o objetivo da mecânica do contínuo é estabelecer um conjunto de equações que governam um problema físico a partir de uma perspectiva macroscópica. As variáveis físicas apresentadas em um problema são representadas por campos tensoriais, ou seja, os fenômenos físicos podem ser representados matematicamente por meio de tensores, enquanto que os campos tensoriais indicam como os valores do tensor variam no espaço e no tempo. Nestas equações, uma condição principal para as quantidades físicas é que elas devem ser independentes do sistema de referência, isto é, devem ser iguais para observadores em diferentes locais do espaço. No entanto, por questões de conveniência, ao resolver problemas, deve-se expressar o tensor em um dado sistema de coordenadas, que aqui será adotado como padrão o sistema de coordenadas cartesianas tridimensionais.

Nesta seção serão apresentados alguns conceitos fundamentais relacionados a linguagem tensorial, o que irá auxiliar na interpretação dos fenômenos físicos. Estes tensores podem ser classificados de acordo com a seguinte ordem:

Tensores de ordem-zero (escalares): Entre algumas das quantidades que têm magnitude mas não tem direção, como por exemplo, a densidade, a temperatura, a pressão e a massa.

Tensores de primeira ordem (Vetores): Quantidades que têm tanto magnitude quanto direção, como por exemplo, velocidade, força. O tensor de primeira ordem é simbolizado com uma letra minúscula e por uma seta na parte superior do vetor, isto é: \vec{v} .

Tensores de segunda ordem: Quantidades que têm magnitude e duas direções. tensão e

deformação. Os tensores de segunda ordem e de ordem superior são simbolizados com uma letra em negrito.

2.1.1 Convenção do somatório de Einstein e notação indicial

Esta notação especifica que índices repetidos representam uma soma sobre o referido índice. Assim é possível expressar um vetor \vec{a} em coordenada cartesianas, considerando que suas componentes são a_1, a_2 e a_3 numa base ortonormal cartesiana, $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ como:

$$\vec{a} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2 + a_3\vec{e}_3 = \sum_{i=1}^3 a_i\vec{e}_i = a_i\vec{e}_i \quad (2.1)$$

em que o índice i quando repetido duas vezes, indica somatório do termo sobre o índice.

Da convenção de soma de Einstein, surgiu a notação indicial, que permite o emprego de dois tipos de índices:

- índice livre, que só aparece uma vez no termo da expressão. A quantidade de índices livres indica a ordem do tensor.
- O índice de soma é aquele que é repetido apenas duas vezes em um termo da expressão, e indica soma.

É importante observar que um índice pode aparecer somente uma ou duas vezes em algum termo da expressão.

Exemplo 1. *Pode-se escrever expressão:*

$$a_1x_1x_3 + a_2x_2x_3 + a_3x_3x_3 = \sum_{i=1}^3 a_ix_ix_3 = a_ix_ix_3 \quad (2.2)$$

De forma análoga:

$$x_1x_1 + x_2x_2 + x_3x_3 = \sum_{i=1}^3 x_ix_i = x_ix_i \quad (2.3)$$

Exemplo 2. *Um sistema de equações pode ser escrito como:*

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} a_{1j}x_j = b_1 \\ a_{2j}x_j = b_2 \\ a_{3j}x_j = b_3 \end{cases} \rightarrow a_{ij}x_j = b_i \quad (2.4)$$

Como observado neste exemplo, o uso da notação indicial torna a escrita muito concisa. Em muitos casos, se a operação algébrica não usa a notação indicial ou tensorial, torna-se quase impossível tratá-la devido ao grande número de termos envolvidos.

Exemplo 3. Para expandir a expressão $A_{ij}x_i x_j$ tem-se que os dois índices i, j são índices de somatório. Como já indicado, da inexistência de índice livre, decorre que a ordem do tensor é nula e o resultado é um escalar. Assim,

$$\begin{aligned} A_{1j}x_1x_j + A_{2j}x_2x_j + A_{3j}x_3x_j &= A_{11}x_1x_1 + A_{12}x_1x_2 + A_{13}x_1x_3 \\ &= A_{21}x_2x_1 + A_{22}x_2x_2 + A_{23}x_2x_3 \\ &= A_{31}x_3x_1 + A_{32}x_3x_2 + A_{33}x_3x_3 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Alguns operadores

O delta de Kronecker é definido como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (2.6)$$

Nota-se que o produto escalar entre dois vetores da base ortonormal, $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j$ é igual a 1 se $i = j$ e igual a zero se $i \neq j$, então pode-se expressar esse produto na forma matricial como:

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \begin{bmatrix} \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 & \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_3 \\ \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_2 & \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_3 \\ \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_1 & \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \delta_{ij} \quad (2.7)$$

Uma propriedade interessante do delta de Kronecker é apresentada no próximo exemplo.

Exemplo 4. Seja V_i as componentes do vetor \vec{V} , então $\delta_{ij}V_i = \delta_{1j}V_1 + \delta_{2j}V_2 + \delta_{3j}V_3$. Como j é o índice livre, tem-se três valores a determinar:

$$\left. \begin{aligned} j = 1 &\rightarrow \delta_{ij}V_i = \delta_{11}V_1 + \delta_{21}V_2 + \delta_{31}V_3 = V_1 \\ j = 2 &\rightarrow \delta_{ij}V_i = \delta_{12}V_1 + \delta_{22}V_2 + \delta_{32}V_3 = V_2 \\ j = 3 &\rightarrow \delta_{ij}V_i = \delta_{13}V_1 + \delta_{23}V_2 + \delta_{33}V_3 = V_3 \end{aligned} \right\} \rightarrow \delta_{ij}V_i = V_j \quad (2.8)$$

Exemplo 5. A seguir serão resolvidas algumas equações.

$$\delta_{ii} = \sum_{i=1}^3 \delta_{ii} = a_{11} + a_{22} + a_{33} = 3 \quad (2.9)$$

$$\delta_{ii}\delta_{jj} = \sum_{i=1}^3 \delta_{ii} \sum_{j=1}^3 \delta_{jj} = (a_{11} + a_{22} + a_{33})(a_{11} + a_{22} + a_{33}) = 9 \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \delta_{i1}\delta_{ij}\delta_{j1} &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \delta_{i1}\delta_{ij}\delta_{j1} = \delta_{11}\delta_{11}\delta_{11} + \delta_{11}\delta_{12}\delta_{21} + \delta_{11}\delta_{13}\delta_{31} \\ &\quad + \delta_{21}\delta_{21}\delta_{11} + \delta_{21}\delta_{22}\delta_{21} + \delta_{21}\delta_{23}\delta_{31} \\ &\quad + \delta_{31}\delta_{31}\delta_{11} + \delta_{31}\delta_{32}\delta_{21} + \delta_{31}\delta_{33}\delta_{31} \\ &= \delta_{j1}\delta_{1j} = \delta_{11} = 1 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Note que $\delta_{j1}\delta_{j1} \neq \delta_{jj}$, pois $\delta_{j1}\delta_{j1} = 1$ e $\delta_{jj} = 3$.

O símbolo de permutação

O símbolo de permutação ϵ_{ijk} , também conhecido como *símbolo de Levi-Civita* é definido como:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{se } (i, j, k) \in \{(1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)\} \\ -1 & \text{se } (i, j, k) \in \{(1, 3, 2), (3, 2, 1), (2, 1, 3)\} \\ 0 & \text{nos demais casos} \end{cases} \quad (2.12)$$

A Figura 2.1 ilustra um procedimento para avaliar o sinal do símbolo de permutação.

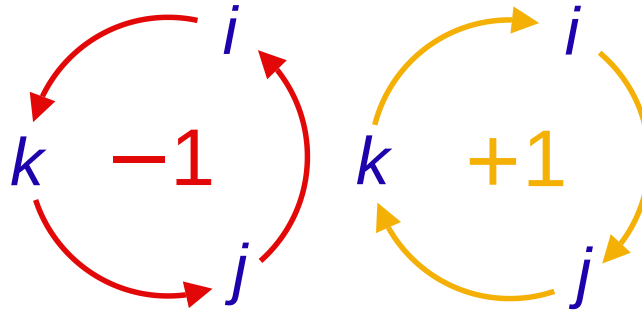


Figura 2.1: Sinal do símbolo de permutação.

A seguir será apresentado alguns exemplos da operação com o delta de Kronecker e o símbolo de permutação.

Exemplo 6. Verificar que a igualdade é válida $\epsilon_{ijk} = \epsilon_{lmn}\delta_{li}\delta_{mj}\delta_{nk}$

$$\begin{aligned} \epsilon_{lmn}\delta_{li}\delta_{mj}\delta_{nk} &= \sum_{l=1}^3 \sum_{m=1}^3 \sum_{n=1}^3 \epsilon_{lmn}\delta_{li}\delta_{mj}\delta_{nk} \\ &= \epsilon_{lmn}\delta_{li}\delta_{mj}\delta_{nk} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Capítulo 3

Turbulência

A turbulência que ocorre nos fluidos está entre os fenômenos mais complexos encontrados na natureza, sendo tridimensional e variando temporalmente. Também é caracterizado por processos não lineares de troca de massa, quantidade de movimento e energia, sendo essas trocas provenientes das interações entre estruturas de escalas variadas tanto no espaço quanto no tempo. De forma geral, existem duas frentes de trabalho em relação aos estudos deste fenômeno: uma devida aos experimentalistas numéricos e os de laboratório.

Esta seção será apresentada a metodologia de Simulação de Grandes Escalas (LES) para escoamentos turbulentos, que é uma das várias abordagens existentes para o tratamento teórico do tema. Tal abordagem teve início em meados da década de 60 com os trabalhos do meteorologista Smagorinsky, cuja motivação estava relacionada à simulação das grandes escalas de escoamentos atmosféricos, dada a inviabilidade de simular a totalidade do espectro de escalas. Embora iniciada por Smagorinsky, foi Deardorff que “importou” a metodologia para problemas de engenharia [6].

Deve-se ressaltar que é razoável o investimento em pesquisas relacionadas à compreensão e ao controle de escoamentos turbulentos, devido à enorme quantidade de implicações de cunho prático decorrentes, que envolvem sistemas de transportes, transmissão e conversão de energia, aplicações geofísicas, entre outras. Dentre as maiores dificuldades para o desenvolvimento da modelagem matemática dos escoamentos que apresentam turbulência, está a sua modelagem, o que será discutido nesta seção.

A maioria dos problemas de engenharia que ocorrem na prática e em grande parte dos fluxos naturais são turbulentos o que direciona o estudo e o desenvolvimento de técnicas em dinâmica de fluidos computacional (CFD), a fluxos em que a turbulência desempenha um papel dominante. Embora a natureza física exata da turbulência não tenha sido totalmente compreendida, ela pode ser modelada com um grau suficiente de precisão em simulações numéricas [16].

Uma das principais características dos escoamentos turbulentos é o elevado grau de liberdade

associado a este tipo de sistema dinâmico. A maneira mais tradicional ou intuitiva de conduzir uma simulação de escoamento é com auxílio das equações de Navier-Stokes, e se a malha computacional for suficientemente refinada, todos os fenômenos físicos envolvidos serão resolvidos. Essa abordagem é conhecida como Simulação Numérica Direta (DNS), no entanto, por aspectos computacionais ela nem sempre pode ser utilizada, ficando restrita na maioria das vezes à escoamentos com baixos número de Reynolds. Esse fato torna a DNS inviável para a maior parte dos problemas práticos encontrados. Diante desta limitação e empregando as ideias de decomposição das escalas de Reynolds, que Smagorinsky propôs uma nova concepção de modelagem, na qual é realizada uma separação estruturas que ocorrem em altas frequências daquelas que ocorrem em baixa frequência, ao invés de separar as escalas em um campo médio e nas suas respectivas flutuações. Nesta metodologia, o comprimento característico do filtro (fator que determina a frequência de corte) é especificado em função do tamanho da malha utilizada na discretização do problema [18].

Em alguns casos, o pesquisador pode estar interessado no fluxo no estado estacionário e, portanto, não é necessário simular o fluxo instantâneo de forma detalhada, o que leva a uma grande redução do custo computacional. Esta é a base para a aproximação de Navier-Stokes baseada nas médias de Reynolds (RANS), onde as equações são resolvidas apenas para as quantidades médias, enquanto o efeito de todas as escalas de movimento turbulento instantâneo é modelado por um modelo de turbulência. Esta abordagem tem sido majoritária nas aplicações de industriais de CFD nas últimas décadas, devido à sua baixa exigência computacional. No entanto, o conhecimento do comportamento transitório do fluxo é necessário e a abordagem RANS não é suficiente, e em muitos casos não consegue descrever o comportamento detalhado do fluxo [16].

Uma abordagem alternativa é chamada de simulação de grandes escalas (LES), a qual foi proposta em 1963 por Smagorinsky. Esta abordagem não adota a abordagem convencional de RANS com tempo ou conjunto, com equações adicionais de transporte modeladas sendo resolvidas para obter o tensor de tensões de Reynolds resultantes do processo de média. Na LES, os movimentos em grande escala (grandes vórtices) de fluxo turbulento são calculados diretamente, e apenas os movimentos de pequena escala (escala sub-malha (SGS)) são modelados, resultando em uma redução significativa no custo computacional quando comparado ao DNS. Desta forma, LES é mais precisa do que a abordagem RANS, uma vez que as grandes escalas turbulentas contêm a maior parte da energia turbulenta e são responsáveis ??pela maior parte da transferência de momentum e difusão turbulenta, e LES captura estas estruturas em detalhe completo diretamente, enquanto elas são modelados na abordagem RANS. Além disso, as pequenas escalas tendem a ser mais isotrópicas e homogêneas do que as grandes e, portanto, modelar os movimentos do SGS pode ser mais fácil do que modelar todas as escalas dentro de um único modelo como na abordagem RANS [16].

A Simulação de Grandes Escalas é considerada como uma metodologia intermediária à DNS e à simulação empregando equações resultantes da técnica de decomposição de Reynolds. Uma característica desta abordagem é que as estruturas turbulentas responsáveis pelo transporte de energia

e quantidade de movimento são resolvidas diretamente por meio das equações filtradas, e somente as menores estruturas, que ocorrem com maior frequência são modeladas - filtro passa-baixa. Ao considerar que estruturas menores apresentem uma isotropia e homogeneidade, espera-se que os modelos sejam mais gerais e independentes dos diferentes tipos de escoamento, quando comparados à metodologia que emprega médias.

Ambas metodologias DNS e LES se assemelham, uma vez que ambas permitem a obtenção de resultados tridimensionais e transientes das equações de Navier-Stokes. Embora seja necessário uma malha também refinada para LES, nesta abordagem é possível resolver escoamentos com altos número de Reynolds, devido ao processo de separação das escalas utilizado e ao processo de modelagem dos tensores -sub-malha que são obtidos adicionalmente.

Quando o método de volumes finitos é empregado para resolver as equações governantes numericamente, as equações são integradas sobre volumes de controle, equivalentes a convolução com um filtro de chapéu alto, portanto não há necessidade de aplicar explicitamente um filtro à equação instantânea e isso é chamado filtragem implícita. No entanto, vale a pena salientar que existe potencialmente uma grande deficiência ou dificuldade na filtragem implícita, ou seja, uma verdadeira malha resultados independentes nunca podem ser alcançados como com o refinamento de malha, menor escala movimentos são resolvidos e se um continua a refinar a Malha, em seguida, eventualmente, um DNS é realizado, e não um LES. Em outras palavras, quando a filtragem implícita é empregada, é quase impossível distinguir entre erros numéricos e de modelagem e, portanto, proíbe a análise útil de esquemas numéricos.

3.1 Médias e filtros

No caso de escoamento de fluidos, a turbulência origina-se da instabilidade de camadas de cisalhamento, que surge no momento em que os efeitos não-lineares são dominantes, o que é caracterizado por elevados números de Reynolds. Na maioria das vezes, é de interesse avaliar as propriedades médias dos escoamentos turbulentos. Para isso, decompõe-se cada grandeza física u na soma de um campo médio \bar{u} e uma componente de flutuação turbulenta u' , cuja média é considerada nula. Assim os campos de velocidade, pressão e densidade são escritos como em [?]:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad p = \bar{p} + p' \quad \rho = \bar{\rho} + \rho'_0 \quad (3.1)$$

Como apresentado em [?] existem diversas formas de definir as grandezas médias e as flutuações, sendo que as propriedades dessas grandezas dependem da sua definição.

3.1.1 Médias de Reynolds

As médias de Reynolds incluem as médias de conjunto, as médias temporais e as médias espaciais. Se o escoamento é quase estacionário, médias com relação ao tempo podem ser utilizadas. No caso da turbulência homogênea, as médias espaciais podem ser tomadas e para os demais casos, pode ser necessário que as médias sejam obtidas sobre um grande número de experimentos possuindo as mesmas condições iniciais e de contorno, o que nos remete ao *valor esperado* ou *esperança matemática* da variável.

Ao tratar um processo estacionário e homogêneo, essas três médias são idênticas, o que é conhecido como hipótese ergótica. Simulações que empregam as variáveis das Equações de Navier-Stokes promediadas por Reynolds são denominadas de RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes).

A média temporal para uma turbulência estacionária é como:

$$\bar{U}^t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T U(x_0, t) dt \quad (3.2)$$

A média espacial para uma turbulência homogênea é expressa por:

$$\bar{U}^s = \lim_{X \rightarrow \infty} \frac{1}{2X} \int_{-X}^X U(x, t_0) dx \quad (3.3)$$

O valor esperado para uma repetição de N experimentos:

$$\bar{U}^e = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N U_n(x_0, t_0) \quad (3.4)$$

Obviamente os escoamentos de real interesse não são estacionários nem homogêneos. Além disso, por motivos práticos não é possível obter a média para valores infinitos de X , T e N . Deve-se então determinar um intervalo adequado que represente o fenômeno em estudo, ao qual decorrerá a média.

Como discutido em [?] a técnica de passagem da média de Reynolds consiste de duas etapas: na primeira, as variáveis presentes nas equações do movimento são decompostas em termos médios e de flutuações; na segunda, deve-se aplicar o operador média temporal sobre um intervalo de tempo finito nos termos resultantes.

As grandezas que caracterizam o campo de um escoamento são escritas para o processo de decomposição como:

$$\begin{aligned} u_i &= \bar{u}_i + u'_i \\ p &= \bar{p} + p' \\ \rho &= \bar{\rho} + \tilde{\rho} \end{aligned} \quad (3.5)$$

em que u_i representa as componentes da velocidade nas i direções, p é a pressão e ρ é a massa específica. Por notação, as flutuações de densidade foram designadas por ρ' .

Como já apresentado, a equação de conservação de massa ou equação da continuidade para um escoamento incompressível pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (3.6)$$

Empregando as expressões médias para u e ρ , em (3.6) tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} + \tilde{\rho}) + \frac{\partial}{\partial x_j}((\bar{\rho} + \tilde{\rho})(\bar{u}_i + u'_i)) = 0 \quad (3.7)$$

3.1.2 Separação de escalas

As equações que governam o escoamento de fluidos incompressíveis são especificadas basicamente pelas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, expressas respectivamente, por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i u_j) &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

em que $i, j = 1, 2, 3$, u é a velocidade t é o tempo, p é a pressão, ρ_0 a densidade e ν a viscosidade do fluido. Como observado, esse sistema apresenta 4 equações e 4 incógnitas, constituindo um sistema de equações fechado. A solução direta deste sistema de equações é possível somente para baixos números de Reynolds, e em escoamentos com elevados números de Reynolds uma alternativa à solução é o processo de filtragem e de separação de escalas. Para isto, as variáveis presentes nas referidas equações governantes devem ser separadas em uma parcela denominada de grandes escalas $\bar{f}(\vec{x}, t)$ e em outra parte denominada sub-malha $f'(\vec{x}, t)$, de forma que:

$$f(\vec{x}, t) = \bar{f}(\vec{x}, t) + f'(\vec{x}, t) \quad (3.9)$$

em que a parte filtrada é definida como:

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int_D f(\vec{x}, t) G(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \quad (3.10)$$

onde $G(\vec{x})$ é a função filtro e pode ser definida de diversas formas. Uma das mais frequentes funções filtro encontradas na literatura é expressa por:

$$G(\vec{x}) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & \text{se } |\vec{x}| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{se } |\vec{x}| > \Delta/2 \end{cases} \quad (3.11)$$

em que Δ é o tamanho característico do filtro, e caracteriza a frequência de corte da filtragem.

3.2 Simulação de grandes escalas - LES

A simulação de grandes escalas (LES) foi originalmente proposta para simular fluxos atmosféricos na década de 1960 e partir de então, tornou-se uma das metodologias mais promissoras e bem-sucedidas para a simulação de escoamentos ou fluxos turbulentos. Atualmente é possível simular fluxos complexos e de real interesse em engenharia empregando a técnica LES. No entanto, ainda existem desafios significativos para que esta abordagem atinja um nível de maturidade para sua ampla disseminação em aplicações de engenharia e de indústria [16]

- Revisar C
- Estudar MPI e PETSC
- Instalar e configurar MPI e PETSC ('pet-see')
- Primeiros exemplos utilizando PETSC;
- Leituras iniciais sobre turbulência
- Revisão sobre Mecânica dos Fluidos
-
- Revisão sobre Volumes Finitos
- Implementações iniciais

Referências Bibliográficas

- [1] C. D. Argyropoulos and N. C. Markatos. Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. *Applied Mathematical Modelling*, 39(2):693–732, 2015.
- [2] Satish Balay, Shrirang Abhyankar, Mark F. Adams, Jed Brown, Peter Brune, Kris Buschelman, Lisandro Dalcin, Victor Eijkhout, William D. Gropp, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Lois Curfman McInnes, Karl Rupp, Barry F. Smith, Stefano Zampini, Hong Zhang, and Hong Zhang. PETSc Web page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>, 2016.
- [3] Satish Balay, Shrirang Abhyankar, Mark F. Adams, Jed Brown, Peter Brune, Kris Buschelman, Lisandro Dalcin, Victor Eijkhout, William D. Gropp, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Lois Curfman McInnes, Karl Rupp, Barry F. Smith, Stefano Zampini, Hong Zhang, and Hong Zhang. PETSc users manual. Technical Report ANL-95/11 - Revision 3.7, Argonne National Laboratory, 2016.
- [4] Satish Balay, William D. Gropp, Lois Curfman McInnes, and Barry F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In E. Arge, A. M. Bruaset, and H. P. Langtangen, editors, *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.
- [5] Ed Bueler. *PETSc for Partial Differential Equations*. SIAM, 2018.
- [6] James W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 41(1970):453, 2006.
- [7] Nicholas J. Georgiadis, Donald P. Rizzetta, and Christer Fureby. Large-eddy simulation: Current capabilities, recommended practices, and future research. *AIAA Journal*, 48(8):1772–1784, 2010.
- [8] Nicholas J. Georgiadis, Donald P. Rizzetta, and Christer Fureby. Large-Eddy Simulation: Current Capabilities, Recommended Practices, and Future Research. *AIAA Journal*, 48(8):1772–1784, 2010.
- [9] N.C. Markatos. The mathematical modelling of turbulent flows. *Applied Mathematical Modelling*, 10(3):190–220, 1986.

- [10] C. Pruet. Temporal large-eddy simulation: Theory and implementation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 22(3-4):275–304, 2008.
- [11] C. D. Pruet, T. B. Gatski, C. E. Grosch, and W. D. Thacker. The temporally filtered Navier-Stokes equations: Properties of the residual stress. *Physics of Fluids*, 15(8):2127–2140, 2003.
- [12] C. D. Pruet, B. C. Thomas, C. E. Grosch, and T. B. Gatski. A temporal approximate deconvolution model for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 18(2):1–5, 2006.
- [13] Tony Saad. *Turbulence Modeling For Beginners*. 1.
- [14] S. Stolz and N. A. Adams. An approximate deconvolution procedure for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 11(7):1699–1701, 1999.
- [15] Kaspar J. Willam. Constitutive models for engineering materials. In Robert A. Meyers, editor, *Encyclopedia of Physical Science and Technology (Third Edition)*, pages 603 – 633. Academic Press, New York, third edition edition, 2003.
- [16] Yang Zhiyin. Large-eddy simulation: Past, present and the future. *Chinese Journal of Aeronautics*, 28(1):11 – 24, 2015.
- [17] Yang Zhiyin. Large-eddy simulation: Past, present and the future. *Chinese Journal of Aeronautics*, 28(1):11–24, 2015.
- [18] Átila P. Freire, Philippe P. M. Menut, and Jian Su. *Turbulência - Coleção Cadernos de Turbulência*. Associação Brasileira de Ciências Mecânicas - ABCM, 2002.

