PROGRAMA EQ-ANP

Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural

Estudo de um Novo Modelo de Turbulência

Tânia Suaiden Klein

Tese de Mestrado

Orientador(es)

Prof. Affonso Silva Telles, PhD

Prof. Ricardo de Andrade Medronho, PhD

Agosto de 2007

ESTUDO DE UM NOVO MODELO DE TURBULÊNCIA

Tânia Suaiden Klein

Tese submetida ao Corpo Docente do Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Aprovado por:

_____
Ricardo de Andrade Medronho , PhD
(orientador – presidente da banca)

_____
Affonso Silva Telles, PhD
(orientador)

_____
Prof. Atila Pantaleão da Silva Freire, PhD

_____
Prof. Renato Machado Cotta, PhD

_____
Prof. Ricardo Pires Peçanha, PhD

Rio de Janeiro, RJ - Brasil
Agosto de 2007

Klein, Tânia Suaiden

Estudo de um Novo Modelo de Turbulência / Tânia Suaiden Klein Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2007.

xvii, 204 p.; il.

(Dissertação) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2007. Orientador(es): Affonso Silva Telles e Ricardo de Andrade Medronho

1. Turbulência. 2. Fechamento. 3. DNS. 4. Tese. (Mestrado – UFRJ/EQ). 5. Affonso Carlos S. da Silva Telles e Ricardo de Andrade Medronho. I. Estudo de um Novo Modelo de Turbulência.

AGRADECIMENTOS

Inicialmente, gostaria de agradecer a minha família por todo o apoio nesta etapa de minha vida.

Gostaria de agradecer a meu noivo, Alexandre Leoni Fonseca, por todo o apoio, compreensão, vibração e amor durante meu curso de mestrado.

Agradeço a meus orientadores, Affonso Silva Telles e Ricardo A. Medronho pela dedicação, companheirismo e conhecimentos passados em mais este trabalho desenvolvido.

Agradeço ao amigo Carlos André Vaz Junior pelo apoio junto ao uso do programa Matlab.

Agradeço à empresa Engineering Simulation and Scientific Software Ltda., ESSS, especialmente a Daniel Ribeiro, Fabio Pereira dos Santos, Leonardo Paes Rangel e Ricardo Damian, pela geração da malha computacional utilizada neste trabalho e apoio para implementação do novo modelo de turbulência no software CFX.11 da Ansys.

Agradeço ao Prof. Eduardo Mach e à Alzirene (Zizi), pelo apoio junto à ANP.

Agradeço ao apoio financeiro da **Agência Nacional do Petróleo** – ANP – e da **Financiadora de Estudos e Projetos** – FINEP – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH-ANP/MCT, em particular ao **PRH 13**, da Escola de Química - Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural.

Resumo da Tese de Mestrado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências, com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural.

ESTUDO DE UM NOVO MODELO DE TURBULÊNCIA

Tânia Suaiden Klein
Agosto, 2007

Orientadores: Prof. Affonso Silva Telles, PhD
Prof. Ricardo de Andrade Medronho, PhD

Simulações confiáveis de escoamentos são muito importantes para a Indústria do Óleo e Gás. Como quase 100% dos escoamentos nestas indústrias são turbulentos, torna-se necessário se dispor de um bom modelo de turbulência. Porém, a maioria dos modelos para o fechamento dos fluxos turbulentos tem por base a proposta de Boussinesq, análoga ao modelo de fluido newtoniano. Em razão desta simplificação torna-se necessário o emprego de funções arbitrárias, por exemplo, as funções de parede. Esta arbitrariedade é eliminada com modelo recentemente publicado na literatura e, em função disto, espera-se uma adaptação mais precisa a escoamentos complexos, como os existentes na produção e processamento de petróleo.

Em estudos recentes sobre este novo modelo de turbulência, pôde-se observar o potencial deste novo modelo, porém foi detectado um problema matemático na determinação dos parâmetros do fechamento do balanço de momento.

Neste trabalho, o problema na determinação dos parâmetros foi investigado e foi proposta uma solução para o mesmo. Foi então realizado o ajuste e a determinação dos novos parâmetros deste novo modelo de turbulência. Devido ao perfil encontrado, os parâmetros foram modelados em duas faixas de valores da velocidade adimensional.

Para a determinação dos parâmetros, optou-se pela aplicação do novo modelo de turbulência em um escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas e as bases para os ajustes foram dados de flutuações associadas à turbulência obtidos por simulação numérica direta (DNS).

A determinação dos parâmetros foi validada para diversos escoamentos entre placas planas paralelas com diferentes números de Reynolds, de onde se concluiu que a determinação dos parâmetros realizada é universal para a primeira faixa de valores da velocidade adimensional.

Para avaliar a performance do novo modelo de turbulência, foram realizadas simulações com petróleo para escoamentos equivalentes aos provenientes dos bancos de dados de DNS. A simulação foi resolvida com três modelos de turbulência tradicionais: k-ε, SSG e SST. A comparação dos resultados destas simulações com os obtidos com o novo modelo aplicado nos arquivos de DNS, mostra que o novo modelo de turbulência apresentou melhor previsão dos componentes do tensor de Reynolds, especialmente próximo à parede.

Tentou-se implementar o novo modelo de turbulência em um código de Fluidodinâmica Computacional (CFD), porém esta tentativa não foi bem sucedida.

Iniciou-se o estudo do fechamento do balanço de energia e concluiu-se que, igualmente ao balanço de momento, serão necessárias modificações na proposta inicial.

Abstract of a Thesis presented to Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos - EQ/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science with emphasis on Petroleum and Natural Gas.

STUDY OF A NEW TURBULENCE MODEL

Tânia Suaiden Klein
Agosto, 2007

Supervisors: Prof. Affonso Silva Telles, PhD
Prof. Ricardo de Andrade Medronho, PhD

Good flow simulations are very important for the Oil & Gas Industry. As almost 100% of industrial flows are turbulent, it is necessary to have a good turbulence model for reliable flow predictions. However, the majority of the proposed options for the closure of the equations for the average fields in turbulent flows are based on Boussinesq proposal, analogous to the Newtonian fluid model. Due to this simplification, it becomes necessary to employ arbitrary wall functions, for example, which introduce errors in the simulations. This arbitrariness is eliminated in the new turbulence model recently published in the literature and because of that it is expected a more accurate adaptation for complex flows as the ones found on petroleum refining and production.

In recent studies about this new turbulence model, one could observe its potential, but it was detected a mathematical problem in the determination of the momentum balance closure parameters.

In this work, the problem in the determination of the parameters was investigated and it was proposed a solution for it. The adjustment and determination of the new parameters of the new turbulence model was carried out. Due to the encountered profile, the parameters were modeled into two ranges of values of the dimensionless velocity.

For the parameters determination, the new turbulence model was applied to a fully developed flow between parallel plates and the parameters adjustments were based on data banks of direct numerical simulation (DNS).

The determination of the parameters was validated for several flows between parallel plates with different Reynolds numbers, where it could be concluded that the determination of the parameters for the first range of the dimensionless velocity is universal.

To evaluate the new turbulence model performance, simulations of petroleum for DNS equivalent flows were carried out. The simulation was solved with three traditional turbulence models: k-ε, SSG and SST. The comparison of those simulation results with the ones obtained when applying the new turbulence model on the DNS data shows that the new turbulence model presented better prediction for the Reynolds Stress tensor components, especially near the wall.

An implementation of new turbulence model in a computational fluid dynamics (CFD) code was tried, but it was not successful.

A study for the energy balance closure was initialized and it was concluded that, equally to the momentum balance, some modifications on the original proposal will be necessary.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO 1
1.1 - Escoamentos Turbulentos 1
1.2 - Motivação 4
1.3 - Objetivos 6
CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTOS TEÓRICOS 8
2.1 - O Problema do Fechamento 8
2.2 Simulação Numérica Direta - DNS, "Direct Numerical Simulations" 13
2.3 Fluidodinâmica Computacional - CFD, "Computational Fluid Dynamics" 15
2.4 - Modelos de Turbulência Tradicionais 17
2.3.1 - Modelos Algébricos 18
2.3.2 - Modelos a Uma Equação 19
2.3.3 - Modelos a Duas Equações 20
2.3.4 - Modelos das Tensões de Reynolds (*Reynolds Stress Models)* 23
2.5 - Variáveis Adimensionais 26
2.6 - Perfil de Velocidades Próximo à Parede 29
2.7 - Balanço de Escalares 31
CAPÍTULO 3 – ESTUDO DO NOVO MODELO DE TURBULÊNCIA 34
3.1 - Balanço de Momento 34
3.2 - Balanço de Energia 37
3.3 - Balanço de Massa 39
3.4 Equações Resultantes do Estudo do Novo Modelo de Turbulência 41
3.5 - Correlações e Parâmetros do Modelo 42
CAPÍTULO 4 – DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DO BALANÇO DE MOMENTO 44
4.1 Problema Encontrado, em Estudo Anterior, na Determinação dos Parâmetros do Balanço de Momento 44
4.2 Correção das Equações Utilizadas em Estudo Anterior 48
4.3 - Abordagem Integral 59
4.3.1 - Método de Estimação dos Parâmetros 62
4.3.2 - Estimação dos Parâmetros 63
4.3.3 - Resultado da Estimação dos Parâmetros 65
4.4 - Reobtenção dos Parâmetros 66
4.4.1 - Determinação dos Parâmetros 68
4.4.2 - Validação dos Parâmetros 71

4.5 - Correlações Não Lineares 77
4.5.1 - Primeiro Nível do Fechamento 78
4.5.2 - Segundo Nível do Fechamento 84
4.6 - Mudança nas Correlações do Artigo de Alfradique e Telles (2006) 93
4.6.1 - Primeira Abordagem 96
4.6.2 - Segunda Abordagem 103
4.6.3 - Terceira Abordagem 106
4.6.4 - Quarta Abordagem 108
4.6.5 - Quinta Abordagem 111
4.6.6 - Sexta Abordagem 113
4.7 - Determinação dos Parâmetros do Novo Modelo de Turbulência ... 118
4.8 - Validação da Determinação dos Parâmetros 138
4.9 - Dimensionalização dos Parâmetros 141
CAPÍTULO 5 – IMPLEMENTAÇÃO DO NOVO MODELO DE TURBULÊNCIA NUM CÓDIGO DE CFD 142
5.1 - Geometria e Malha 142
5.1.1 - Geometria 143
5.1.2 - Malha 145
5.2 - Comparação com Modelos de Turbulência Tradicionais 147
5.3 - Implementação do Novo Modelo de Turbulência em um Código de CFD 151
5.3.1 - Especificações no CFX 151
5.3.2 - Simulação com o Novo Modelo 155
CAPÍTULO 6 – ESTUDO DO BALANÇO DO MOMENTO DE CALOR 158
6.1 - Determinação do Nível de Fechamento 158
6.1.1 - Primeiro Nível do Fechamento 159
6.1.2 - Segundo Nível do Fechamento 160
6.2 - Determinação dos Parâmetros 160
6.2.1 - Análise Dimensional 162
6.2.2 - Correlações Lineares 163
6.2.3 - Correlações Não Lineares 169
CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES 179
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 182
Anexo 1 - Resultado da Validação dos Parâmetros Determinados Pela Correção das Equações Utilizadas em Klein (2006) nos Demais Arquivos de DNS 184
Anexo 2 - Perfil dos Parâmetros Obtidos Para Cada Um dos Sistemas Gerados Pela Proposta das Correlações Não Lineares 190
Anexo 3 - Reprodução dos Componentes do Tensor de Reynolds com os Parâmetros Modelados para o Novo Modelo de Turbulência 196

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Variação da velocidade com o tempo em um escoamento a ΔP constante (Bird, 2002). 8
Figura 2.2 – Variação da velocidade com o tempo em um escoamento a ΔP(t) (Bird, 2002). 9
Figura 4.1 – Ajuste do Parâmetro b_0^{0+} em Klein (2006). 46
Figura 4.2 – Ajuste do Parâmetro b_1^{0+} em Klein (2006). 46
Figura 4.3 – Ajuste do Parâmetro f^+ em Klein (2006). 46
Figura 4.4 – Ajuste do Parâmetro g^+ em Klein (2006). 46
Figura 4.5 – Componente R_{11}^+ calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 47
Figura 4.6 – Componente $-R_{12}^+$ calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 47
Figura 4.7 – Componente R_{22}^+ calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 47
Figura 4.8 – Componente R_{33}^+ calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 48
Figura 4.9 – Ajuste do Parâmetro b_0^{0+}. 55
Figura 4.10 – Ajuste do Parâmetro b_1^{0+}. 55
Figura 4.11 – Ajuste do Parâmetro f^+. 55
Figura 4.12 – Ajuste do Parâmetro g^+. 56
Figura 4.13 – Componente R_{11}^+ calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Ret=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, em 18/02/06 57
Figura 4.14 – Componente $-R_{12}^+$ calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 58
Figura 4.15 – Componente R_{22}^+ calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 58
Figura 4.16 – Componente R_{33}^+ calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 58
Figura 4.17 – Ajuste do Parâmetro b_0^{0+}. 69
Figura 4.18 – Ajuste do Parâmetro b_1^{0+}. 70
Figura 4.19 – Ajuste do Parâmetro d_0^{0+}. 70
Figura 4.20 – Ajuste do Parâmetro d_1^{0+}. 70

Figura 4.21 – Comparação de $\frac{dR_{11}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e pelo Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 74
Figura 4.22 – Comparação de $\frac{dR_{22}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e pelo Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 74
Figura 4.23 – Comparação de $\frac{dR_{33}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e pelo Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 74
Figura 4.24 – Comparação de $\frac{dR_{12}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 75
Figura 4.25 – Comparando R_{122} pelo arquivo de DNS e pela equação (4.4.3). Dados de DNS provenientes do site http://cfd.me.umist.ac.uk/ercoftac/database/cases/case32/Case_data/, *em 26/03/07* 76
Figura 4.26 – Comparando $R_{112}+R_{222}+R_{233}$ pelo aqueu de DNS e pela equação (4.4.6). Dados de DNS provenientes do site http://cfd.me.umist.ac.uk/ercoftac/database/cases/case32/Case_data/, *em 26/03/07* 76
Figura 4.27 – b_0^{0+} para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para S_{ij}. 81
Figura 4.28 – b_1^{0+} para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para S_{ij}. 81
Figura 4.29 – b_2^{0+} para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para S_{ij}. 81
Figura 4.30 – a_0^{1+} para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para S_{ij}. 81
Figura 4.31 – Perfil de cálculo de R_{33}^{+} pela equação (4.5.4). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 82
Figura 4.32 – Perfil do parâmetro b_0^{0+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11). 100
Figura 4.33 – Perfil do parâmetro b_1^{0+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11). 100
Figura 4.34 – Perfil do parâmetro a_0^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11). 100
Figura 4.35 – Perfil do parâmetro a_2^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11). 101

Figura 4.36 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL1. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 101
Figura 4.37 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL3. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL3 101
Figura 4.38 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL5. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL5 102
Figura 4.39 – Perfil do parâmetro b_0^{0+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25). 105
Figura 4.40 – Perfil do parâmetro b_1^{0+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25). 105
Figura 4.41 – Perfil do parâmetro b_0^{2+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25). 105
Figura 4.42 – Perfil do parâmetro a_2^{1+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25). 105
Figura 4.43 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.25) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL1. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 106
Figura 4.44 – Perfil do parâmetro b_1^{0+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64). 115
Figura 4.45 – Perfil do parâmetro a_0^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64). 115
Figura 4.46 – Perfil do parâmetro a_1^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64). 115
Figura 4.47 – Perfil do parâmetro a_2^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64). 115
Figura 4.48 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL1. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 116
Figura 4.49 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL3. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL3 116
Figura 4.50 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL5. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL5 116
Figura 4.51 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL1, integrando todas as posições do vetor x_2. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 117

Figura 4.52 – Polinômio ajustado no parâmetro b_1^0. 119
Figura 4.53 – Polinômio ajustado no parâmetro a_0^1. 119
Figura 4.54 – Polinômio ajustado no parâmetro a_1^1. 119
Figura 4.55 – Polinômio ajustado no parâmetro a_2^1. 119
Figura 4.56 – I1 e I1_param com os parâmetros provenientes do Matlab. 120
Figura 4.57 – I2 e I2_param com os parâmetros provenientes do Matlab. 121
Figura 4.58 – I3 e I3_param com os parâmetros provenientes do Matlab. 121
Figura 4.59 – I4 e I4_param com os parâmetros provenientes do Matlab. 121
Figura 4.60 – dR_{11} e dR_{11}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab. 122
Figura 4.61 – dR_{22} e dR_{22}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab. 122
Figura 4.62 – dR_{33} e dR_{33}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab. 122
Figura 4.63 – dR_{12} e dR_{12}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab. 123
Figura 4.64 – I1 e I1_param com os parâmetros modelados pelo polinômio. 123
Figura 4.65 – I2 e I2_param com os parâmetros modelados pelo polinômio. 124
Figura 4.66 – I3 e I3_param com os parâmetros modelados pelo polinômio. 124
Figura 4.67 – I4 e I4_param com os parâmetros modelados pelo polinômio. 124
Figura 4.68 – dR_{11} e dR_{11}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio. 124
Figura 4.69– dR_{22} e dR_{22}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio. 125
Figura 4.70 – dR_{33} e dR_{33}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio. 125
Figura 4.71 – dR_{12} e dR_{12}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio. 125
Figura 4.72 – Ajuste do parâmetro b_1^{0+} para $v^+ \leq 17$. 126
Figura 4.73 –Ajuste do parâmetro a_0^{1+} para $v^+ \leq 15$. 126
Figura 4.74 – Ajuste do parâmetro a_0^{1+} para $15 \leq v^+ \leq 17$. 127
Figura 4.75 – Ajuste do parâmetro a_1^{1+} para $v^+ \leq 17$. 127
Figura 4.76 – Ajuste do parâmetro a_2^{1+} para $v^+ \leq 17$. 127
Figura 4.77 – Ajuste da derivada do parâmetro a_0^{1+} para $v^+ \leq 15$. 128
Figura 4.78 – Ajuste da derivada do parâmetro a_0^{1+} para $15 < v^+ < 17$. 128
Figura 4.79 – Ajuste da derivada do parâmetro a_1^{1+} para $v^+ \leq 17$. 129
Figura 4.80 – Ajuste da derivada do parâmetro a_2^{1+} para $v^+ \leq 17$. 129
Figura 4.81 – I1 e I1_param para $v^+ \leq 17$ com os parâmetros modelados. 129
Figura 4.82 – I2 e I2_param para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 130
Figura 4.83 – I3 e I3_param para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 130
Figura 4.84 – I4 e I4_param para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 130
Figura 4.85 – dR_{11} e dR_{11}_calc para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 131
Figura 4.86 – dR_{22} e dR_{22}_calc para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 131
Figura 4.87 – dR_{33} e dR_{33}_calc para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 131
Figura 4.88 – dR_{12} e dR_{12}_calc para $v \leq 17$ com os parâmetros modelados. 132
Figura 4.89 – Denominador do Sistema com os parâmetros originais e modelados.... 132
Figura 4.90 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds do arquivo de DNS WL1 com os parâmetros modelados até $v^+ \leq 17$. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1 133
Figura 4.91 - Ajuste do parâmetro b_1^{0+} para $v^+ > 17$. 134
Figura 4.92 - Ajuste do parâmetro a_0^{1+} para $v^+ > 17$. 134
Figura 4.93 - Ajuste do parâmetro a_1^{1+} para $v^+ > 17$. 135

Figura 4.94 - Ajuste do parâmetro a_2^{1+} para $v^+ > 17$. 135
Figura 4.95 – Ajuste da derivada do parâmetro a_0^{1+} para $v^+>17$. 136
Figura 4.96 – Ajuste da derivada do parâmetro a_1^{1+} para $v^+>17$..... 136
Figura 4.97 – Ajuste da derivada do parâmetro a_2^{1+} para $v^+>17$. 136
Figura 4.98 – Reprodução dos Componentes do tensor de Reynolds para o Arquivo de DNS Ch180_b (Re_τ = 180 e Re = 5962), onde das 29 posições, 26 foram integradas. Dados de DNS provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06* 139
Figura 5.1 – Geometria das placas planas paralelas. 145
Figura 5.2 – Malha cedida pela empresa ESSS para a simulação. 146
Figura 5.3 – Condições de contorno da simulação. 148
Figura 5.4 – Comparação da previsão do componente R_{11}^+ pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*..... 149
Figura 5.5 – Comparação da previsão do componente R_{22}^+ pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*..... 149
Figura 5.6 – Comparação da previsão do componente R_{33}^+ pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*..... 150
Figura 5.7 – Comparação da previsão do componente R_{12}^+ pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_τ=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*..... 150
Figura 6.1 – Perfil de f_0^v em função de T^+ para a Primeira Proposta..... 164
Figura 6.2 Perfil de f_0^v em função de v^+ para a Primeira Proposta. 165
Figura 6.3 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 180 e Pr = 0,2. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 166
Figura 6.4 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 180 e Pr = 0,6. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 166
Figura 6.5 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 395 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 166
Figura 6.6 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 640 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 167
Figura 6.7 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ =1020 e Pr = 0,71. Dados

de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 167
Figura 6.8 – Perfil do parâmetro f_0^{v+} em função de T^+ para a Proposta Não Linear. 172
Figura 6.9 – Perfil do parâmetro f_0^{v+} em função de v^+ para a Proposta Não Linear..... 172
Figura 6.10 – Perfil do parâmetro γ^+ em função de T^+ para a Proposta Não Linear. ... 172
Figura 6.11 – Perfil do parâmetro γ^+ em função de v^+ para a Proposta Não Linear..... 173
Figura 6.12 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 180 e Pr = 0,2. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 173
Figura 6.13 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 180 e Pr = 0,6. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 173
Figura 6.14 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 395 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 174
Figura 6.15 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 640 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 174
Figura 6.16 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 174
Figura 6.17 – Ajuste pelo polinômio da Tabela 6.1 para $v^+ \leq 15$ para o parâmetro f_0^{v+} para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71. 176
Figura 6.18 – Ajuste pelo polinômio da Tabela 6.1 para $v^+ \leq 15$ para o parâmetro γ^+ para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71. 176
Figura 6.19 – Comparação do Ajuste pelo polinômio da Tabela 6.1 e pela derivada da expressão analítica do polinômio de ajuste do parâmetro γ^+ para $v^+ \leq 15$ para o parâmetro $d\gamma^+$ para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71..... 176
Figura 6.20 – Recálculo dos momentos de calor turbulento do arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71 com os parâmetros modelados pelos polinômios, conforme Figura 6.17 a Figura 6.19. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07* 177
Figura 6.21 – B_1, expresso pela equação (6.2.25), calculado com os valores originais dos parâmetros f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ e calculado com a modelagem destes parâmetros pelos polinômios da Tabela 6.1. 178
Figura 6.22 – B_2, expresso pela equação (6.2.26), calculado com os valores originais dos parâmetros f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ e calculado com a modelagem destes parâmetros pelos polinômios da Tabela 6.1. 178

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 4.1 – Valor dos Coeficientes dos Polinômios de Cada um dos Parâmetros em Klein (2006)..... 45

Tabela 4.2 – Valor dos Coeficientes dos Polinômios de cada um dos Parâmetros. 55

Tabela 4.3 – Coeficientes da modelagem dos parâmetros b_0^{0+}, b_1^{0+}, d_0^{0+} e d_1^{0+} 69

Tabela 4.4 – Coeficientes e grau de ajuste dos polinômios que modelam cada parâmetro. 118

Tabela 4.5 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $v^+ \leq 17$..... 137

Tabela 4.6 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $v^+ \leq 15$..... 137

Tabela 4.7 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $15 < v^+ \leq 17$..... 137

Tabela 4.8 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $v^+ > 17$. 137

Tabela 5.1 – Estatística da Malha..... 147

Tabela 5.2 – Condições da Simulação..... 148

Tabela 6.1 – Coeficientes dos polinômios de ajuste dos parâmetro f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71..... 175

NOMENCLATURA

LETRAS LATINAS

Símbolo	Descrição	Dimensão
C	concentração instantânea	$M\ L^{-3}$
c	concentração média	$M\ L^{-3}$
$C_{\varepsilon 1}$	constante do modelo k-ε	adim.
$C_{\varepsilon 2}$	constante do modelo k-ε	adim.
C_{μ}	constante do modelo k-ε	adim.
d	diâmetro / meia distância entre as placas	L
$D_{\alpha\beta}$	coeficiente de difusão	$L^2\ T^{-1}$
D_{ij}	parte simétrica do gradiente de velocidade	T^{-1}
F	força	$M\ L\ T^{-2}$
g	aceleração da gravidade	$L\ T^{-2}$
J_{ij}	termo fluxo no balanço de momento	$L^2\ T^{-2}$
J_{ijk}	termo fluxo no balanço de momento	$L^{3\ T-3}$
J_{ijkp}	termo fluxo no balanço de momento	$L^4\ T^{-4}$
j_i	termo fluxo no balanço de energia	$L\ \theta\ T^{-1}$
j_{ij}	termo fluxo no balanço de energia	$L^2\ \theta\ T^{-2}$
j_{ijk}	termo fluxo no balanço de energia	$L^3\ \theta\ T^{-3}$
k	energia cinética turbulenta	$L^2\ T^{-2}$
K_i	termo fonte do balanço de momento	$L\ T^{-2}$
K_{ij}	termo fonte do balanço de momento	$L^2\ T^{-3}$
K_{ijk}	termo fonte do balanço de momento	$L^3\ T^{-4}$
m_i^{α}	componente i do momento de massa turbulento do componente α	$M\ L^{-2}\ T^{-1}$
m_{ij}^{α}	componente ij do momento duplo de massa turbulento do componente α	$M\ L^{-1}T^{-2}$
m_{ijk}^{α}	componente ijk do momento triplo de massa turbulento do componente α	$M\ L^{-3}$
P	pressão instantânea / pressão média piezométrica	$M\ L^{-1}T^{-2}$
p	pressão média	$M\ L^{-1}T^{-2}$
P_k	produção turbulenta	$M\ L^{-1}T^{-3}$
q_i	componente i do momento de calor turbulento	$L\ \theta\ T^{-1}$
q_{ij}	componente ij do momento duplo de calor turbulento	$L^2\ \theta\ T^{-2}$
q_{ijp}	componente ijp do momento triplo de calor turbulento	$L^3\ \theta\ T^{-3}$

R_{ij}	componente ij do Tensor de Reynolds	$L^2 T^{-2}$
R_{ijk}	componente ijk do momento triplo	$L^{3\ T-3}$
S_{ij}	termo fonte médio do balanço de momento	$L^2 T^{-1}$
s_i	termo fonte médio do balanço de energia	$L\ \theta\ T^{-2}$
s_{ij}	termo fonte médio do balanço de energia	$L^2\ \theta\ T^{-3}$
t	tempo	T
T	temperatura média	θ
V	velocidade instantânea	$L\ T^{-1}$
v	velocidade média	$L\ T^{-1}$
x	coordenada espacial	L
y	distância à parede	L

LETRAS GREGAS

Símbolo	**Descrição**	**Dimensão**
α	difusividade térmica	$L^2\ T^{-1}$
δ	delta de Kronecker	adim.
ε	dissipação turbulenta	$L^2 T^{-3}$
ϕ_{ij}	correlação entre pressão e tensão	adim.
μ	viscosidade	$M\ L^{-1}T^{-1}$
ρ	densidade	$M\ L^{-3}$
σ_ε	constante do modelo k-ε	adim.
σ_κ	constante do modelo k-ε	adim.
τ	tensão	$M\ L^{-1}T^{-2}$
θ	temperatura instantânea	θ
κ_i	termo fontes do Balanço de Energia	$L\ \theta\ T^{-2}$
κ_{ij}	termo fontes do Balanço de Energia	$L^2\ \theta\ T^{-3}$

SOBRESCRITOS

Símbolo	**Descrição**
$^+$	adimensional
^{l}	laminar
^{t}	componente turbulenta
$^\alpha$	componente α
$^\beta$	componente β

SUBSCRITOS

Símbolo	**Descrição**
0	na parede
i	coordenada/posição
j	coordenada/posição
k	coordenada/posição
p	índice de Einstein
τ	de atrito
x	direção x
y	direção y
z	direção z

GRUPOS ADIMENSIONAIS

Símbolo	**Nome**
Re	Número de Reynolds
Re_{τ}	Número de Reynolds de Atrito
Pr	Número de Prandtl
Sch	Número de Schmidt

PARÂMETROS DO MODELO

a_0^1, a_1^1, a_2^1, b_0^0, b_0^2, b_1^0, b_2^0, b_1^2, b_2^2, c_0^3, c_1^0, d_0^0, d_1^0, e, e_0^0, e_0^1, f, f_0^q e f_0^v, são os parâmetros do modelo. Durante o texto estes parâmetros podem ser adimensionais ou dimensionais dependendo de como devem ser interpretados os demais termos da equação indicados no texto. A unidade destes parâmetros varia de acordo com o termo que acompanham nas equações de balanço das variáveis turbulentas. As unidades dos parâmetros do modelo só foram determinadas para aqueles termos cujo perfil foi determinado. Ver item 4.9 desta dissertação.

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Neste capítulo, serão abordados três tópicos: uma breve reflexão sobre os escoamentos turbulentos culminando no problema do fechamento, assunto central da tese; a motivação que levou à elaboração desta dissertação; e for fim, os objetivos onde serão descritas as propostas deste trabalho.

1.1 Escoamentos Turbulentos

Pela definição de Versteeg e Malalasekera (1995), escoamentos turbulentos apresentam um perfil caótico e aleatório onde a velocidade e a pressão mudam continuamente com o tempo. Este perfil é atingido a partir de certo valor do Número de Reynolds.

Para baixos Números de Reynolds, diz-se que os escoamentos são laminares. O perfil de um escoamento laminar pode ser descrito como se o fluido se movesse em camadas, ou lâminas (por isso, a denominação laminar), de modo que uma camada escorregasse sobre a adjacente, havendo somente troca de quantidade de movimento molecular, onde as partículas viajassem sem agitações transversais. Qualquer tendência para instabilidade e turbulência seria amortecida pelas forças viscosas de cisalhamento, predominantes no escoamento laminar.

Conforme o número de Reynolds vai aumentando, estas camadas tendem a ir se dissolvendo umas nas outras, indicando que as forças inerciais começam a se tornar perceptíveis e que agitações transversais começam a estar presentes.

Quando se alcança um determinado valor do número de Reynolds, pode-se dizer que as forças viscosas tornaram-se imperceptíveis diante das inerciais e que as camadas

presentes no escoamento laminar se dissolveram por completo. Diz-se então que o escoamento é turbulento.

E até mesmo em escoamentos onde as velocidades e pressões médias variam em apenas uma ou duas dimensões espaciais, as flutuações turbulentas sempre apresentam um caráter tridimensional (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Osborne Reynolds, um dos pioneiros no estudo de escoamentos turbulentos, definiu este tipo de movimento como “movimento sinuoso” (Hinze, 1975).

Hinze (1975) ainda traz a definição dada, em 1937, por Taylor e Von Kármán, onde a turbulência foi descrita como um movimento irregular que, em geral, aparece em escoamentos gasosos ou líquidos, quando fluem sobre superfícies sólidas ou mesmo quando correntes vizinhas deste mesmo escoamento fluem sobre ou por outra corrente deste escoamento. Pode-se ver como uma vantagem o fato do movimento turbulento ser irregular num sentido em que é possível descrevê-lo por leis de probabilidade.

Após esta reflexão, Hinze (1975) também propôs sua definição para a turbulência, onde afirma que o movimento de um escoamento turbulento é uma condição irregular do escoamento no qual as várias quantidades apresentam uma variação aleatória com o tempo e coordenadas espaciais, em um modo que distinguíveis valores médios podem ser observados estatisticamente. Hinze (1975) ainda define que a turbulência consiste na superposição de todo pequeno movimento periódico ou, como a periodicidade na distribuição da velocidade envolve a ocorrência de gradientes de velocidade que correspondem a um certo turbilhão, que a turbulência consiste na superposição de todos os turbilhões de menores tamanhos. Mas estes “menores” turbilhões não são indefinidos. Em fluidos reais, o efeito da viscosidade evita que isto ocorra. Quanto menor o turbilhão, maior em geral o gradiente da velocidade no turbilhão e maior a tensão cisalhante viscosa que age contra o movimento do turbilhão.

Assim, em um escoamento turbulento, haverá um limite inferior estatístico para o tamanho do menor turbilhão. Dentro destes menores turbilhões, o escoamento não é mais turbulento, mas viscoso, e os efeitos moleculares são dominantes.

Em princípio, as equações de Navier Stokes descrevem tanto os escoamentos laminares quanto os turbulentos sem a necessidade de informações adicionais. Porém, escoamentos turbulentos com Números de Reynolds altos, como muito se encontra na indústria, apresentam uma larga faixa das escalas de comprimento e tempo turbulentas que, geralmente, iriam englobar comprimentos de escala muito menores que o menor volume finito de uma malha que poderia ser, na prática, utilizada em análises numéricas (CFX, 2005).

Osborne Reynolds forneceu uma alternativa viável para tratar a turbulência quando observou que as propriedades dos escoamentos turbulentos poderiam ser descritas pela superposição de um termo flutuante a um valor médio. Reynolds sugeriu então que os campos presentes nas equações governantes fossem divididos em componentes médias e componentes flutuantes, turbulentas. O resultado formal desse procedimento consiste em uma nova equação na qual os efeitos do campo turbulento estão isolados dos termos descritivos do escoamento médio. Essa estratégia de solução leva ao surgimento de novas variáveis dinâmicas.

Dessa forma, a modelagem das propriedades dos escoamentos turbulentos em componentes médias e estocásticas dá origem a um número de variáveis dinâmicas independentes maior do que o número de equações governantes disponíveis. Surge então um problema matematicamente indeterminado, o qual caracterizou-se por problema do fechamento na turbulência (Alho e Ilha, 2006) e que deu origem aos modelos de turbulência.

1.2 Motivação

Simulações confiáveis de escoamentos turbulentos são muito importantes para a Indústria Química, especialmente no setor de óleo e gás, principalmente pelo fato de quase 100% dos escoamentos industriais ser turbulento, tornando-se necessário se dispor de um bom modelo de turbulência.

Existe na literatura uma variedade de modelos propostos para o fechamento das equações governantes do escoamento turbulento de fluidos, porém não se dispõe de modelos racionais genéricos para descrição dos escoamentos turbulentos. Os modelos utilizados para a solução dos problemas de engenharia são exclusivamente *ad hoc*, pois têm o propósito de resolver problemas específicos relacionados às aplicações de interesse científico e tecnológico (Alho e Ilha, 2006).

Além disso, as opções para o problema do fechamento no escoamento turbulento de fluidos estão em constante avaliação e sofrendo inclusões de fatores de correção de variadas justificativas.

Estes contextos refletem a inexistência de um método sólido e sistemático de solução do problema do fechamento.

O conceito de viscosidade turbulenta, introduzido por Boussinesq (1877) em analogia ao modelo de fluido newtoniano, não é adequado, sendo necessárias correções. Estas são expressas pelo emprego de “funções de parede”, modeladas por funções arbitrárias baseadas na distância à parede (Bird et al., 2001) ou, por exemplo, pelo conceito da energia cinética turbulenta (Wolfshtein, 1969) que deu origem à família dos modelos a uma equação que foi transformada em complexos esquemas de modelos a múltiplas equações. Essas correções não são expressas em função das propriedades das

flutuações turbulentas, o que as caracteriza como não-constitutivas e, então, não são válidas para qualquer escoamento.

Todas estas adaptações resultaram em perfis dos componentes do tensor de Reynolds que conflitam com observações experimentais.

É importante destacar que as relações básicas para os componentes do tensor de Reynolds, determinadas apenas pela parte simétrica do gradiente da velocidade, são insuficientes, não apresentando bons resultados, nem mesmo para escoamentos simples. Pope (1975) foi quem propôs inicialmente o desenvolvimento de equações constitutivas para os componentes do tensor de Reynolds. Seu trabalho foi complementado por outros autores (Launder *et al*, 1975) e chegou-se ao consenso de que os componentes do tensor de Reynolds são determinados pelo gradiente da velocidade decomposto em suas partes simétrica e anti-simétrica.

Aproximações sistemáticas para a proposição de equações constitutivas (não necessariamente para as tensões turbulentas) começaram com a termodinâmica de processos irreversíveis. A evolução desta disciplina, desenvolvida inicialmente por Liu and Muller (1983), foi chamada de termodinâmica estendida, que se tornou uma teoria aplicada quando na presença de rápidas mudanças e gradientes acentuados.

Alfradique e Telles (2006) empregaram os métodos da termodinâmica estendida para estabelecer um conjunto de equações para o problema do fechamento de escoamentos turbulentos. A principal vantagem desta metodologia foi a eliminação da arbitrariedade na seleção das variáveis constitutivas e, em função disto, espera-se uma adaptação mais precisa a escoamentos complexos, uma vez que variáveis constitutivas representam melhor os escoamentos que variáveis arbitrárias.

Sucessivas equações para os momentos de ordens crescentes foram escritas na forma de balanços em função de uma derivada temporal, um fluxo convectivo e um

campo de geração. Os termos desconhecidos de cada ordem são determinados por equações constitutivas em função dos momentos de ordem inferior.

Dessa forma, surge um novo modelo de turbulência que apresenta equações constitutivas para descrever os componentes do tensor de Reynolds bem como os componentes turbulentos da transferência de calor e de massa.

Em estudos recentes sobre este novo modelo de turbulência (Klein, 2006) estudou-se a determinação dos parâmetros para o fechamento do balanço de momento. Para a determinação destes parâmetros, foram utilizados dados de simulações em DNS que foram assumidos como valores experimentais. Um dos arquivos de DNS foi reproduzido em código de Fluidodinâmica Computacional, através do software CFX 11 da ANSYS, e resolvido por dois modelos tradicionais – k-ε e Reynolds Stress SSG.

O resultado do estudo de Klein (2006) foi bastante positivo, apesar de um problema encontrado na determinação dos parâmetros. Neste estudo, pôde-se observar o potencial deste novo modelo, principalmente próximo à parede, quando comparado com os demais modelos de turbulência testados e, dessa forma, optou-se por continuar a investir neste novo modelo de turbulência.

1.3 – Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é solucionar e/ou explicar o problema encontrado na determinação dos parâmetros do trabalho de Klein (2006).

Uma vez obtendo-se êxito nesta tarefa e concluindo-se ser possível determinar os parâmetros do balanço de momento do novo modelo de turblência, o objetivo deste trabalho se estende a determinar os novos parâmetros do balanço de momento e

implementar o novo modelo de turbulência em um código de CFD (Fluidodinâmica Computacional), através do software CFX 11 da Ansys.

Faz parte também dos objetivos deste trabalho realizar um estudo sobre as propostas de fechamento para os balanços de energia e massa, determinando os parâmetros do novo modelo de turbulência para estes balanços.

Para a determinação dos parâmetros, seja de momento, energia ou massa, serão utilizados dados de simulações em DNS que serão admitidos como valores experimentais.

CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo serão abordados os principais temas de interesse para este trabalho. A intenção é proporcionar uma revisão bibliográfica sobre assuntos direta ou indiretamente relacionados a esta dissertação que visam não só esclarecer conceitos que serão amplamente utilizados e citados como consolidar a teoria presente na literatura acerca dos temas que serão aqui considerados.

2.1 O Problema do Fechamento

Escoamentos turbulentos são caracterizados por apresentar um comportamento caótico e aleatório para a velocidade e para as demais propriedades do escoamento, como a pressão, temperatura, concentração, por exemplo.

Considerando um escoamento turbulento exposto a um gradiente de pressão constante, tem-se que o perfil de um componente da velocidade em função do tempo flutua de forma caótica, conforme se pode ver na Figura 2.1.

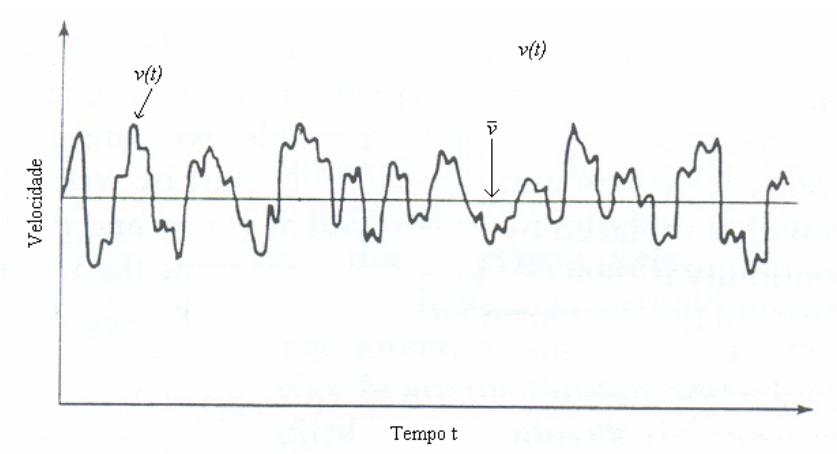


Figura 2.1 – Variação da velocidade com o tempo em um escoamento a ΔP constante (Bird, 2002).

Quando o escoamento turbulento está exposto a um gradiente de pressão que varia com o tempo, o mesmo perfil caótico é observado, porém com variações no valor da velocidade média, conforme se pode notar na Figura 2.2.

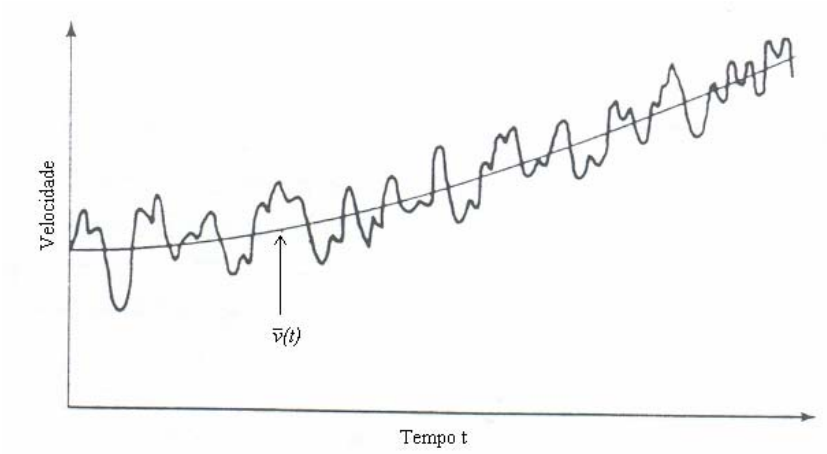


Figura 2.2 – Variação da velocidade com o tempo em um escoamento a ΔP(t) (Bird, 2002).

O problema do fechamento surge então quando, em escoamentos turbulentos, redefine-se a velocidade instantânea v como sendo a soma de sua componente média, $\bar{v}$, somada a sua componente flutuante, v^t, conforme proposto por Reynolds.

A velocidade média é mais comumente obtida aplicando a média temporal sobre um grande número de flutuações para escoamentos estacionários, conforme se pode observar na equação (2.1.1).

$$\bar{v} = \frac{1}{t_0} \int_{t-\frac{t_0}{2}}^{t+\frac{t_0}{2}} V(t)dt. \qquad (2.1.1)$$

Onde t_0 é o período no qual a velocidade deve ser integrada de modo a gerar uma velocidade média representativa do escoamento.

Este período deve representar um intervalo de tempo finito. Este intervalo deve ser suficientemente grande comparado como o Tempo de Escala da Turbulência, uma vez que este corresponde a uma certa quase periodicidade quando comparado com o período médio de mudança no padrão do escoamento. Por outro lado, este intervalo

deve ser pequeno se comparado com o período de qualquer variação lenta no campo de escoamento que não se deseja observar como pertencente da turbulência. Percebe-se então que há uma certa arbitrariedade na escolha das flutuações que se deve ou não considerar. Felizmente, na prática, esta escolha pode ser feita sem muita dificuldade. Quando se observa um oscilograma de um escoamento turbulento, é normalmente fácil distinguir um certo período médio principal de mudança no padrão do escoamento (Hinze, 1975).

Dessa forma, a velocidade instantânea V pode ser expressa como:

$$V = \bar{v} + v^t \tag{2.1.2}$$

Aplicando esta nova definição de velocidade na Equação da Continuidade, quando reescrita para fluidos incompressíveis, mostra-se que se chega a uma equação idêntica à equação originalmente para velocidade instantânea, porém para a velocidade média.

Para demonstrar o que foi descrito acima, segue a Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underset{\sim}{\nabla} . \rho \underset{\sim}{V} = 0 \tag{2.1.3}$$

Que assume a seguinte forma para fluidos incompressíveis:

$$\underset{\sim}{\nabla} . \underset{\sim}{V} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} = 0 \tag{2.1.4}$$

Aplicando o novo conceito de velocidade, obtém-se:

$$\frac{\partial(\bar{v}_x + v_x^t)}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v}_y + v_y^t)}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{v}_z + v_z^t)}{\partial z} = 0$$

Que após aplicação da média temporal em ambos os lados da equação, resulta:

$$\frac{\partial \bar{v}_x}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}_y}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow \quad \underset{\sim}{\nabla} . \underset{\sim}{\bar{v}} = 0 \tag{2.1.5}$$

Este resultado é muito conveniente porque permite tratar a velocidade com suas componentes média e turbulenta, porém sem a introdução de nenhum novo termo, mantendo a Equação da Continuidade, porém para a velocidade média.

Deve-se agora então aplicar a nova definição de velocidade para a equação instantânea da quantidade de movimento que, quando a densidade ρ e a viscosidade μ são impostas constantes, recebe o nome de Equação de Navier-Stokes, ilustrada na Equação (2.1.6).

$$\rho \frac{D\underset{\sim}{V}}{Dt} = -\underset{\sim}{\nabla} P + \mu \nabla^2 \underset{\sim}{V} + \rho \underset{\sim}{g} \tag{2.1.6}$$

O conceito de redefinição de uma variável como sendo a soma de sua componente média e sua componente turbulenta é estendido à Pressão P, de modo que:

$$P = p + p^t \tag{2.1.7}$$

Assim, a Equação de Navier-Stokes, pode ser reescrita, aplicando-se a nova definição das variáveis v e P:

$$\rho \frac{D(\underset{\sim}{v} + \underset{\sim}{v}^t)}{Dt} = -\underset{\sim}{\nabla}(p + p^t) + \mu \nabla^2 (\underset{\sim}{v} + \underset{\sim}{v}^t) + \rho \underset{\sim}{g} \tag{2.1.8}$$

Aplicando a média temporal em ambos os lados da equação:

$$\overline{\rho \frac{D(\underset{\sim}{v} + \underset{\sim}{v}^t)}{Dt}} = \overline{-\underset{\sim}{\nabla}(p + p^t)} + \overline{\mu \nabla^2 (\underset{\sim}{v} + \underset{\sim}{v}^t)} + \overline{\rho \underset{\sim}{g}} \tag{2.1.9}$$

Chega-se à Equação da Média Temporal, expressa na equação (2.1.10):

$$\rho \frac{D\underset{\sim}{v}}{Dt} = -\underset{\sim}{\nabla} p + \mu \nabla^2 \underset{\sim}{v} + \rho \underset{\sim}{g} - \rho(\overline{\underset{\sim}{v}^t . \underset{\sim}{\nabla} \underset{\sim}{v}^t}) \tag{2.1.10}$$

Pode-se perceber que a equação (2.1.10) seria idêntica à equação (2.1.6) para a velocidade média, não fosse pelo termo $-\rho(\overline{\underset{\sim}{v}^t . \underset{\sim}{\nabla} \underset{\sim}{v}^t})$. Este termo é chamado de Força Turbulenta, F^t, por unidade de volume. Esta força extra de inércia é causada pelas

tensões devido aos componentes flutuantes do escoamento secundário. Estas tensões compõem o tensor de Reynolds.

$$F^t = -\rho(\overline{\underset{\sim}{v}^t . \underset{\sim}{\nabla}\, \underset{\sim}{v}^t}) = -\underset{\sim}{\nabla} . \underset{\approx}{\tau}^t \tag{2.1.11}$$

O tensor de Reynolds $\underset{\approx}{\tau}^t$, cujos componentes são normalmente denotados por R_{ij}, pode ser explicitado conforme a equação (2.1.12):

$$\underset{\approx}{\tau}^t = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho\overline{(v_x^t)^2} & \rho\overline{(v_x^t v_y^t)} & \rho\overline{(v_x^t v_z^t)} \\ \rho\overline{(v_y^t v_x^t)} & \rho\overline{(v_y^t)^2} & \rho\overline{(v_y^t v_z^t)} \\ \rho\overline{(v_z^t v_x^t)} & \rho\overline{(v_z^t v_y^t)} & \rho\overline{(v_z^t)^2} \end{bmatrix} = \underset{\approx}{R_{ij}} \tag{2.1.12}$$

É importante chamar a atenção para o fato de os componentes do tensor de Reynolds serem simétricos (equação (2.1.13)).

$$\tau_{ij} = \tau_{ji} \tag{2.1.13}$$

Em escoamentos turbulentos, os componentes normais (τ_{xx}, τ_{yy} e τ_{zz}) são sempre diferentes de zero porque são formados pelo quadrado da velocidade turbulenta. Já os componentes cisalhantes (τ_{xy}, τ_{xz} e τ_{yz}) estão associados a diferentes componentes da velocidade. Por exemplo, se as velocidades turbulentas v_x^t e v_z^t forem estatisticamente independentes, a média temporal de seu produto será zero (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Relembrando a Lei da Viscosidade de Newton, expressa pela equação (2.1.14), onde o sobrescrito *l* refere-se ao escoamento laminar, pode-se reescrever a Equação da Média Temporal de forma genérica, conforme na equação (2.1.15).

$$\underset{\sim}{\tau}^l = -\mu\left[\underset{\sim}{\nabla}\, \underset{\sim}{\overline{v}} + \left(\underset{\sim}{\nabla}\, \underset{\sim}{v}\right)^T\right] \tag{2.1.14}$$

$$\rho\frac{Dv}{Dt} = -\underset{\sim}{\nabla}\, p - \underset{\sim}{\nabla} . \underset{\approx}{\tau}^l - \underset{\sim}{\nabla} . \underset{\approx}{\tau}^t + \rho\, \underset{\sim}{g} \tag{2.1.15}$$

Observando as equações (2.1.5), (2.1.13) e (2.1.15) percebe-se que se chega a um sistema de 4 equações (uma vez que a equação (2.1.15) se decompõe em 3 equações, uma para cada direção do escoamento, *x*, *y* e *z*) e 10 incógnitas: $P,\ \overline{v_x},\ \overline{v_y},\ \overline{v_z},\ \tau_{xx},\ \tau_{xy},\ \tau_{xz},\ \tau_{yy},\ \tau_{yz}\ e\ \tau_{zz}$.

O surgimento deste novo termo traz então 6 novas variáveis que caracterizam o Problema do Fechamento, pois agora, será necessário determinar uma correlação para os componentes do tensor de Reynolds.

2.2 Simulação Numérica Direta - DNS, *"Direct Numerical Simulations"*

A turbulência é um fenômeno complexo de ser resolvido devido à necessidade da solução do sistema formado pelas equações de Navier-Stokes na presença de turbilhões de uma grande faixa de tamanhos. Por isso é que Reynolds propôs a decomposição da velocidade em suas componentes média e flutuante que geraram o problema do fechamento.

Porém, o sistema formado pelas equações de Navier-Stokes não apresenta solução analítica, mesmo para os escoamentos turbulentos mais simples. A descrição completa de um escoamento turbulento, onde as variáveis que caracterizam o escoamento (como a velocidade e a pressão) são conhecidas como função do tempo e do espaço só pode ser obtida, então, pela resolução numérica destas equações (Moin e Mahesh, 1998).

O método que consiste nestas soluções numéricas são conhecidas por Simulações Numéricas Diretas, ou em inglês, *Direct Numerical Simulations* (DNS).

Dessa forma, métodos numéricos precisos são requeridos para tornar a técnica de DNS praticável. Uma vez que escoamentos turbulentos normalmente apresentam

amplas faixas de escalas que aumentam com o Número de Reynolds, todas as escalas, inclusive as menores, devem ser tratadas da forma mais acurada possível.

Ao implementar DNS, consideram-se todos os graus de liberdade presentes em um escoamento e por isso é o único meio de predizer e analisar escoamentos turbulentos em todos os detalhes sem utilizar uma pressuposição que leve a aproximações (Friedrich et al., 2000).

DNS é uma ferramenta de pesquisa e não deve ser encarado como uma solução de "força bruta" das equações de Navier Stokes para problemas de engenharia. O objetivo não é reproduzir dados experimentais de escoamentos reais, mas sim implementar estudos controlados que permitam o desenvolvimento de melhores modelos de turbulência. É importante destacar que os dados de DNS fornecem resultados relevantes referentes aos componentes do tensor de Reynolds, como suas magnitudes e possíveis escalas (Moin e Mahesh, 1998).

Quanto à evolução da técnica de DNS, pode-se dizer que os escoamentos de fluidos incompressíveis foram, inicialmente, o alvo dos estudos. Atualmente investe-se bastante em melhorar a performance de DNS para escoamentos compressíveis (Moin e Mahesh, 1998).

Uma importante restrição que hoje ainda se impõe sobre a implementação de DNS é que só se consegue efetuar simulações com Números de Reynolds baixos – moderados. Esta restrição pode ser justificada por dois principais motivos: o computacional, exigindo malhas extremamente refinadas, uma vez que o número de pontos na malha requeridos cresce mais rápido que o quadrado do número de Reynolds; e o econômico, uma vez que sempre são levados em consideração os custos de um projeto para implementação de simulações que exigem maior tempo computacional e melhores máquinas. (Moin e Mahesh, 1998 e Friedrich et al., 2000).

Após diversas implementações de DNS e suas respectivas comparações com dados experimentais, o método foi sendo aprimorado e hoje a DNS de escoamentos em canais é considerada confiável o suficiente para ser utilizada como padrão por técnicas de diagnóstico experimentais (Moin e Mahesh, 1998).

Além disso, muitas simulações em DNS referem-se a escoamentos limitados por paredes e estes vem provendo bancos de dados extremamente úteis para análises de efeitos próximos à parede (Friedrich et al., 2000).

Dessa forma, as técnicas de DNS vêm sendo muito utilizadas para parametrizar a turbulência e incrementar a busca por melhores modelos de turbulência (Moin e Mahesh, 1998).

Neste contexto, neste trabalho serão utilizados bancos de dados de DNS como sendo os dados experimentas que se deseja reproduzir.

2.3 Fluidodinâmica Computacional - CFD, *"Computational Fluid Dynamics"*

Num futuro próximo, não será possível resolver diretamente as equações da Continuidade e de Navier-Stokes para a velocidade instantânea e escoamentos complexos, o que seria o conceito de DNS, devido aos esforços computacionais requeridos e a tecnologia disponível hoje, bem como sua previsão de evolução.

Neste contexto, engenheiros precisam dispor de procedimentos e ferramentas computacionais que possam supri-los de informações adequadas sobre processos turbulentos, porém sem precisar prever os efeitos de cada turbilhão no escoamento (Versteeg e Malalasekera, 1995). Para esta classe de soluções, utiliza-se a Fluidodinâmica Computacional, mais conhecida como CFD, proveniente do inglês *Computational Fluid Dynamics*.

CFD é a análise de sistemas, envolvendo escoamento, transferência de calor e fenômenos associados como reações químicas, por simulações baseadas em esforços computacionais (Versteeg e Malalasekera, 1995).

A técnica de CFD pode ser descrita, em parte, como a arte de substituir as equações diferenciais parciais governantes de um escoamento (Navier-Stokes, continuidade e modelos de turbulência) por "números" e dispor estes números no espaço e/ou tempo para obter uma descrição numérica final do campo completo do escoamento de interesse (Lomax, 2001).

Basicamente, para se implementar a técnica de CFD, utiliza-se de um software comercial, onde se definem a geometria do escoamento bem como sua malha, as condições de contorno do escoamento e os modelos a serem utilizados. A resolução numérica das equações diferencias parciais fica por conta do software, sendo possível o usuário interferir em critérios e parâmetros de convergência.

A malha consiste na divisão do volume da geometria em diversos pequenos volumes, elementos, para os quais as equações diferencias parciais serão numericamente resolvidas, discretizando o sistema, inicialmente contínuo. O encontro de cada elemento forma um nó e o número de nós bem como de elementos são parâmetros utilizados para caracterizar a malha desenvolvida.

A ressalva que sempre se deve ter ao utilizar CFD é quanto à confiabilidade dos resultados obtidos. Conforme já citado, ao utilizar CFD, deve-se escolher entre modelos, especialmente modelos de turbulência. Estes modelos, por serem modelos e por saber-se de suas limitações, implicam em erros e estes devem ser avaliados. Além de erros provenientes dos modelos adotados, ainda deve-se considerar erros devido às soluções numéricas.

Neste trabalho, a ferramenta CFD foi utilizada para validar três modelos de turbulência tradicionais, o k-ε, o SSG Reynold Stress e o SST, ao comparar seus resultados com aqueles provenientes dos bancos de dados de DNS, e para validar o novo modelo de turbulência através da implementação do mesmo num código de CFD.

2.4 Modelos de Turbulência Tradicionais

Para tornar possível prever os efeitos da turbulência, sem que se precise dispor de resolver apenas as equações de Navier-Stokes, como no DNS, com malhas extremamente refinadas que inviabilizam a simulação de escoamentos devido ao esforço e tempo computacionais requeridos, utilizam-se os modelos de turbulência.

Os modelos de turbulência mais tradicionais são aqueles baseados na proposição de correlações para os componentes do tensor de Reynolds cujo surgimento provém da decomposição da velocidade em sua componente média (dada pela aplicação da média temporal num dado intervalo conveniente de tempo) e em sua componente flutuante ou turbulenta, ou seja, propondo soluções para o problema do fechamento.

Nesta seção será feita uma revisão sobre os modelos clássicos que caracterizam os modelos mais consagrados, compreendidos e utilizados para simular os mais diversos escoamentos.

Os modelos clássicos podem ser classificados em quatro grupos: modelos algébricos, modelos a uma equação, modelos a duas equações e modelos das tensões de Reynolds.

Abaixo segue uma breve descrição de cada um destes grupos de modelos de turbulência.

2.4.1 Modelos Algébricos

Também chamados de modelos a zero equações, esses modelos são baseados na hipótese de Boussinesq (1877), que estabelece o conceito de viscosidade turbulenta, expresso na equação (2.4.1). Nesses modelos, uma equação algébrica, normalmente empírica, é empregada para a determinação do valor da viscosidade turbulenta. Este modelo pode então ser chamado de modelo a zero equações, por não apresentar nenhuma equação de transporte adicional, apenas equações algébricas.

$$\overline{\rho v_i^t v_j^t} = \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij} - 2\mu^t D_{ij} \tag{2.4.1}$$

Nesta equação, k é a energia cinética turbulenta por unidade de massa, δ_{ij} é uma matriz onde δ_{ij} assume valor 1 para $i = j$ e zero para $i \neq j$, μ^t é a viscosidade turbulenta e D_{ij} é a parte simétrica do gradiente de velocidade.

Pode-se perceber pela equação (2.4.1) a analogia à Lei da Viscosidade de Newton onde a viscosidade (propriedade física do fluido) multiplica o gradiente da velocidade.

Conforme dito anteriormente, nestes modelos precisa-se de uma equação algébrica para a viscosidade turbulenta μ^t. O modelo algébrico mais conhecido consiste na teoria do comprimento de mistura de Prandtl, onde ele propõe a equação algébrica (2.4.2) para expressar a viscosidade turbulenta e a equação algébrica (2.4.3) para expressar o comprimento de mistura que é uma escala de comprimento turbulenta, onde $\kappa = 0{,}41$ é a constante de von Kármán.

$$\mu^t = \rho l_0^2 \left|\frac{dv}{dy}\right| \tag{2.4.2}$$

$$l_0 = \kappa y \tag{2.4.3}$$

Porém, esta representação só é válida para escoamentos turbulentos escassos, próximo à parede, onde a velocidade média é unidirecional (Speziale, 1995).

Outros modelos para viscosidade turbulenta – como alguns citados por Speziale (1995) – e para o comprimento de mistura – como citado por Versteeg e Malalasekera (1995) – foram propostos, porém, de um modo geral, suas aplicações são muito restritas.

Speziale (1995) resume as causas da ineficiência dos modelos algébricos como sendo a necessidade de uma especificação *ad hoc* da escala de comprimento e o fato de não ser fisicamente consistente a escala de velocidade turbulenta a partir do gradiente da velocidade média, conforme efetuado nos modelos a zero equações.

2.4.2 Modelos a Uma Equação

Nesses modelos, que também empregam o conceito de viscosidade turbulenta, uma equação diferencial de transporte é resolvida para uma determinada propriedade turbulenta, normalmente, a energia cinética turbulenta, k e uma segunda propriedade turbulenta, normalmente, um comprimento de escala turbulento, é expressa por uma equação algébrica.

$$\mu^t = \rho l_0 \sqrt{k} \tag{2.4.4}$$

Prandtl desenvolveu um modelo a uma equação onde foi proposta a equação (2.4.4) para a viscosidade turbulenta e foi resolvida uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta (eliminando o problema de a escala de velocidade turbulenta ser determinada a partir do gradiente da velocidade média) . Porém, os modelos a uma equação baseados na equação de transporte para a energia cinética turbulenta permanecem com o problema de necessitar uma especificação arbitrária para o escala de

comprimento turbulenta a qual é virtualmente impossível de ser implementada com confiança em escoamentos turbulentos complexos tridimensionais (Speziale, 1995).

Esta classe de modelos é talvez a menos utilizada por ser considerada incompleta.

A limitação apresentada pelos modelos algébricos e a uma equação quanto à sua generalidade é evidente, ao exigirem o conhecimento prévio das propriedades turbulentas do escoamento para sua aplicação (Alho e Ilha, 2006).

Os modelos que serão descritos a seguir surgem justamente para cobrir a deficiência destes modelos descritos até o momento. Respaldando esta afirmação, Speziale (1995), afirma que o modelo a duas equações constitui o nível mínimo de fechamento que é fisicamente aceitável.

2.4.3 Modelos a Duas Equações

Os modelos a duas equações, que também são baseados no conceito de viscosidade turbulenta, apresentam duas equações diferenciais de transporte de propriedades turbulentas, configurando-se assim como modelos de fechamento completos. Estas propriedades turbulentas são quantidades independentes que estão diretamente relacionadas com as escalas de comprimento e tempo turbulentas. Normalmente, são a energia cinética turbulenta, k, e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta por unidade de massa, ε. Mas há modelos que utilizam, por exemplo a freqüência turbulenta ω, ao invés da taxa de dissipação, ε.

Esses modelos a duas equações devem ser formulados com uma viscosidade turbulenta anisotrópica, propriamente invariante que seja não linear nos gradientes da velocidade média (Speziale, 1995).

O modelo mais representativo desta classe de modelos de turbulência é o modelo k-ε (κ–epsilon). O modelo k-ε é estável e numericamente robusto. É considerado um dos mais proeminentes modelos de turbulência e encontra-se implementado na maior parte dos códigos de CFD (Fluidodinâmica Computacional), sendo conhecido por ser o modelo padrão das indústrias (CFX, 2005).

As equações diferenciais de transporte para a energia cinética turbulenta, k, expressa na equação (2.4.5) e para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, e, expressa na equação (2.4.6) podem ser obtidas diretamente das equações de Navier Stokes, desde que se assuma que a turbulência é localmente homogênea e em equilíbrio.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho \bar{v} k) = \nabla \bullet \left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho\varepsilon \tag{2.4.5}$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho \bar{v} \varepsilon) = \nabla \bullet \left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \tag{2.4.6}$$

Onde a viscosidade turbulenta μ^t é dada pela equação (2.4.7) e a constante C_μ=0,09.

$$\mu^t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2.4.7}$$

O termo P_k é a "produção de turbulência" resultado dos efeitos das forças viscosas e do empuxo. É expressa pela equação (2.4.8) abaixo:

$$P_k = \mu^t \nabla \bar{v} \bullet \left(\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^T \right) - \frac{2}{3} \nabla \bullet \bar{v} \left(3\mu^t \nabla \bullet \bar{v} + \rho k \right) + P_{kb} \tag{2.4.8}$$

Onde P_{kb} é o termo de produção de empuxo cuja expressão pode variar para diferentes modelos, porém sendo sempre proporcional a um campo externo que pode ser gravitacional, centrífugo, eletro-magnético, dentre outros.

É importante observar que, para fluidos incompressíveis, o segundo termo da equação (2.4.8) torna-se nulo.

Os termos σ_k, σ_ε, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ são constantes. Estas constantes foram determinadas por diversos autores (Telles, 2005) e os valores-padrão utilizados pelo software CFX 10 da ANSYS são apresentados na Tabela 2.1 abaixo.

Tabela 2.1 – Valores das constantes do modelo k-ε utilizadas no CFX

Variável	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_κ	σ_ε
Valor	1,44	1,92	1,0	1,3

É importante observar que para um escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas, a parte simétrica do gradiente da velocidade, *D*, é dada pela equação (2.4.9) abaixo.

$$D = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial v_x}{\partial y} & 0 \\ \frac{\partial v_x}{\partial y} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.4.9}$$

De modo que, pela equação (2.4.1), obtém-se que:

$$\tau_{xx} = \tau_{yy} = \tau_{zz} = \frac{2}{3}\rho k \tag{2.4.10}$$

$$\tau_{xy} = \mu^t \frac{\partial v_x}{\partial y} \tag{2.4.11}$$

$$\tau_{xz} = \tau_{yz} = 0 \tag{2.4.12}$$

A equação (2.4.10) mostra uma fragilidade do modelo k-ε e de todos os modelos baseados na viscosidade turbulenta de Boussinesq onde o valor dos componentes normais seriam necessariamente iguais e isto é comprovadamente um equívoco.

Apesar disto, pode-se dizer que este modelo vem provendo boas previsões de muitos escoamentos de interesse na engenharia. Porém, sua performance é comprometida em algumas situações, especialmente escoamentos complexos.

(Alho e Ilha, 2006) concluem que o modelo k-ε é falho na previsão de escoamentos afastados da condição de equilíbrio local e que esta deficiência é séria o suficiente para que o modelo seja usado com cautela na previsão de escoamentos complexos. Afirmam que os erros deste modelo de turbulência originam-se pelo uso de uma relação entre tensões turbulentas e taxas de deformação do escoamento médio análoga à usada para o caso laminar, e também devido à pouca fundamentação física da equação de transporte de ε, para a qual nenhuma das correções propostas até o momento fornece uma generalidade suficiente.

Outros modelos desta mesma classe surgiram para tentar cobrir deficiências do modelo k-ε. Pode-se citar, dentre outros, os modelos RNG k-ε e o k-ω. No RNG k-ε as constantes citadas acima são redefinidas em função de novos termos de modo a normalizar as equações de Navier-Stokes. Já no modelo k-ω, em vez do termo ε, dissipação turbulenta, define-se o termo ω, freqüência turbulenta. Este modelo e suas derivações são normalmente recomendados para melhor previsão próximo à parede. Há ainda modelos que conjugam os modelos k-ω quando próximo à parede e k-ε para longe da parede, como é o caso do modelo SST (Shear Stress Transport).

2.4.4 Modelos das Tensões de Reynolds (*Reynolds Stress Models*)

Esta classe de modelos de turbulência apresenta equações diferenciais de transporte para cada componente do tensor de Reynolds. Porém, para completar o fechamento, ainda é necessária uma equação de transporte para uma propriedade turbulenta, normalmente a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ε, ou a freqüência turbulenta, ω.

Comparando com o modelo k-ε, os modelos das Tensões de Reynolds tem seis equações de transporte a mais (uma para cada tensor de Reynolds, conforme se pode notar nas equações (2.4.13) e (2.4.15)) para serem resolvidas a cada passo de tempo. Os termos de geração também são mais complexos. Dessa forma, a convergência do sistema é significativamente mais lenta.

O aumento no número de equações de transporte leva a uma menor robustez numérica e requer maiores esforços computacionais. Porém, deve-se notar que o erro implícito à aplicação do conceito da viscosidade turbulenta de Boussinesq, expressa na equação (2.4.10) foi eliminado.

Inicialmente, os modelos das Tensões de Reynolds eram completamente *ad hoc*, não tendo nenhuma conexão formal com as soluções do sistema completo de equações de Navier Stokes para fluidos turbulentos. Porém, esta concepção não mais se aplica à atual geração de modelos de fechamento do tipo Tensões de Reynolds.

Esta classe de modelos de turbulência, também chamados de modelos de fechamento de segunda ordem ou segundo momento, podem ser sistematicamente derivados das equações de Navier Stokes, novamente, desde que se assuma que a turbulência é localmente homogênea e em equilíbrio.

Os modelos das Tensões de Reynolds, em inglês, *Reynolds Stress Models*, incluem naturalmente os efeitos de linhas de corrente curvas, mudanças bruscas na taxa de tensão, escoamentos secundários ou empuxo, quando comparados com os modelos baseados na viscosidade turbulenta. Teoricamente, estes modelos apresentariam melhores previsões para escoamentos complexos que os modelos a duas equações, porém na prática, muitas vezes, esta teoria não se confirma.

Esta melhor performance teórica em escoamentos complexos é o que justifica seu uso, uma vez que requer um alto grau de complexidade no sistema matemático resultante.

Dentre os vários modelos baseados nas equações de transporte para cada um dos componentes do tensor de Reynolds, o SSG é o mais recomendado por questões históricas e por ser um modelo padrão (CFX, 2005). Speziale (1995) compara a performance deste modelo com outros e confirma seu melhor desempenho.

Modificações para escoamentos com baixos números de Reynolds podem ser incorporadas aos modelos para acrescentar os efeitos da viscosidade molecular nos termos difusivos e também para que a anisotropia seja considerada nos termos de taxa de dissipação nas equações de transporte dos componentes do tensor de Reynolds (Versteeg e Malalasekera, 1995).

Assim, os modelos das Tensões de Reynolds podem ser aplicados para formulações com coeficientes de difusão iso e anisotrópicos.

No software CFX 10 da ANSYS as equações dos Modelos das Tensões de Reynolds são baseadas nas equações de transporte da dissipação turbulenta de modo que as equações (2.4.13) e (2.4.14) são para formulação dos coeficientes de difusão isotrópicos e as equações (2.4.15) e (2.4.16) para formulação dos coeficientes de difusão anisotrópicos.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{v_i^t v_j^t}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(v_k \rho\overline{v_i^t v_j^t}) = P_{ij} + \phi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\mu + \frac{2}{3}c_s\rho\frac{k^2}{\varepsilon}\right)\frac{\partial v_i^t v_j^t}{\partial x_k}\right] - \frac{2}{3}\delta_{ij}\rho\varepsilon \qquad (2.4.13)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho v_k \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{k}(C_{\varepsilon 1}P - C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\mu + \frac{\mu^t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_k}\right] \qquad (2.4.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{v_i^t v_j^t}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(v_k \rho\overline{v_i^t v_j^t}) = P_{ij} + \phi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\mu\delta_{kj} + c_s \rho\frac{k}{\varepsilon}\overline{v_i^t v_j^t}\right)\frac{\partial v_i^t v_j^t}{\partial x_j}\right] - \frac{2}{3}\delta_{ij}\rho\varepsilon \qquad (2.4.15)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho v_k \varepsilon) = \frac{\varepsilon}{k}(C_{\varepsilon 1}P - C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\mu\delta_{kj} + c_\varepsilon \rho\frac{k}{\varepsilon}\overline{v_k^t v_j^t}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right] \qquad (2.4.16)$$

Os diferentes modelos das Tensões de Reynolds diferenciam-se pelo valor das constantes e definição de alguns termos. (CFX, 2005; Telles, 2005)

Devido ao cálculo de cada um dos componentes do tensor de Reynolds, espera-se uma melhor previsão dos escoamentos secundários e complexos. Porém, deve-se observar que estes modelos também utilizam variáveis arbitrárias como a viscosidade e a dissipação turbulentas.

2.5 Variáveis Adimensionais

Quando se fala em turbulência, o primeiro conceito no qual se pensa é o número de Reynolds. Este é um grupo adimensional, expresso na equação (2.5.1), que caracteriza os escoamentos de acordo com seu valor.

$$\mathrm{Re} = \frac{dv\rho}{\mu} \qquad (2.5.1)$$

onde d é o diâmetro para tubos circulares e a distância entre as placas planas para dutos retangulares ou quadrados.

A vantagem de se trabalhar com variáveis adimensionais é justamente não precisar se preocupar com as unidades das mesmas. Além disso, os arquivos em DNS que serão amplamente utilizados neste trabalho fornecem todas as variáveis em suas formas adimensionais. Por esse motivo, a forma adimensional das variáveis que serão aqui tratadas segue abaixo.

A forma da velocidade adimensional é dada por:

$$v^+ = \frac{v}{v_\tau} \tag{2.5.2}$$

onde v_τ é a velocidade de atrito dada por

$$v_\tau = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \tag{2.5.3}$$

onde τ_0 é a tensão na parede.

É comum na caracterização de escoamentos, encontrar uma variante do Número de Reynolds, Re_τ, onde em vez de se utilizar a velocidade média do escoamento, utiliza-se a velocidade de atrito, conforme se pode observar na equação (2.5.4).

$$Re_\tau = \frac{d v_\tau \rho}{\mu} \tag{2.5.4}$$

Com base na expressão para velocidade adimensional, pode-se obter a forma adimensional de um componente "ij" do tensor de Reynolds. A forma dimensional desta variável, que pode ser facilmente deduzida da equação (2.1.12), é dada por:

$$R_{ij} = \rho\overline{(v_i^t v_j^t)} \tag{2.5.5}$$

Muitas vezes, e inclusive neste trabalho, o componente "ij" do tensor de Reynolds aparece dividido pela densidade, sendo então expresso por:

$$R_{ij} = \overline{(v_i^t v_j^t)} \tag{2.5.6}$$

Assim, a forma adimensional de um componente "ij" do tensor de Reynolds é:

$$R_{ij}^+ = \overline{(v_i^{t+} v_j^{t+})} = \overline{\left(\frac{v_i^t}{v_\tau}\frac{v_j^t}{v_\tau}\right)} = \frac{R_{ij}}{v_\tau^2} \tag{2.5.7}$$

Deve-se observar que a forma adimensional para o componente "ij" do tensor de Reynolds descrito pela equação (2.5.5) seria a mesma, uma vez que bastaria dividir a expressão pela própria densidade.

Analogamente, pode-se obter a forma adimensional para qualquer ordem do balanço de momento:

$$R^{+}_{12...k} = \frac{R_{12...k}}{v^{k}_{\tau}} \tag{2.5.8}$$

Para o balanço de energia, também se pode definir a forma adimensional de suas variáveis. A forma adimensional da temperatura é dada por:

$$T^{+} = \frac{T}{T_{\tau}} \tag{2.5.9}$$

onde T_{τ} é a temperatura de atrito dada por:

$$T_{\tau} = \frac{q_{w}}{\rho c_{p} v_{\tau}} \tag{2.5.10}$$

onde q_w é o fluxo de calor na parede e c_p é o calor específico do fluido.

Os momentos de calor turbulento, expressos na equação (3.2.19), tem sua forma adimensional da seguinte forma:

$$q^{+}_{12...k} = \overline{T^{t+} v_1^{t+} v_2^{t+} ... v_k^{t+}} = \overline{\frac{T^{t}}{T_{\tau}} \frac{v_1^{t}}{v_{\tau}} \frac{v_2^{t}}{v_{\tau}} ... \frac{v_k^{t}}{v_{\tau}}} = \frac{q_{12...k}}{T_{\tau} v_{\tau}^{2}} \tag{2.5.11}$$

Para o balanço de massa, a forma adimensional da concentração e dos momentos de massa turbulentos são exatamente análogas às equações (2.5.9) e (2.5.11), respectivamente, porém trocando-se T por C^{α} e q por m^{α}.

A forma adimensional da coordenada perpendicular à direção do escoamento é dada pela equação abaixo:

$$y^{+} = \frac{y v_{\tau} \rho}{\mu} \tag{2.5.12}$$

e y é a distância à parede. Este conceito de distância à parede para dutos circulares ou retangulares é trivial, porém para geometrias mais complexas, torna-se uma variável indefinida.

Em escoamentos com fluxo de calor é comum encontrar um outro grupo adimensional que caracteriza o escoamento: o Número de Prandtl, expresso na equação (2.5.13), onde K e c_p são respectivamente a condutividade térmica e calor específico do fluido.

$$Pr = \frac{\mu c_p}{K} \tag{2.5.13}$$

Similarmente, para escoamentos com transferência de massa também há um grupo adimensional para caracterizar o escoamento: o Número de Schmidt, expresso na equação (2.5.14).

$$Sch = \frac{\mu}{\rho D_{\alpha\beta}} \tag{2.5.14}$$

2.6 Perfil de Velocidades Próximo à Parede

Nesta seção pretende-se comentar sobre o perfil de velocidades médias próximo à parede em escoamentos turbulentos. A idéia é levantar os tratamentos e funções de parede mais conhecidos na literatura e que são constantemente utilizados nas simulações de escoamentos turbulentos.

Num escoamento turbulento próximo a uma superfície sólida, pode-se identificar quatro regiões: a subcamada viscosa ou subcamada linear, a mais próxima à parede onde a viscosidade atua como fator determinante; a subcamada tampão, onde as forças de inércia e viscosas atuam de forma equilibrada; a subcamada inercial ou da lei logarítmica, onde os efeitos viscosos já quase não mais influenciam o escoamento; e a camada turbulenta, onde já não mais “se percebe” a presença da parede.

Exatamente sobre a superfície sólida, o fluido é estacionário. Bem próximo à parede, até y^+~5, o fluido é dominado pelo cisalhamento viscoso e assume-se que a

tensão cisalhante é constante e igual à tensão cisalhante na parede o que implica numa lei linear entre a velocidade adimensional v^+ e a coordenada adimensional y^+, conforme expresso na equação (2.5.1).

$$v^+ = y^+ \tag{2.5.1}$$

Esta é então a subcamada viscosa.

Para valores de y^+ maiores que 30 e menores que 500, a relação entre a velocidade adimensional v^+ e a coordenada adimensional y^+ é dada pela distribuição de velocidade logarítmica universal de von Kármán-Prandtl, expressa na equação (2.5.2), também conhecida por "Lei log de Parede".

$$v^+ = 2,5 \ln y^+ + 5,5 \tag{2.5.2}$$

Esta é a então a subcamada inercial. A camada compreendida entre $y^+ = 5$ e $y^+ = 30$ é então a subcamada tampão.

Assumindo que este perfil logarítmico aproxima razoavelmente bem o perfil da velocidade perto da parede, ele provê um meio de calcular numericamente a tensão cisalhante do fluido como função da velocidade a uma dada distância da parede, sendo por isso conhecido com Função de Parede.

Porém, esta função de parede é baseada em suposições físicas que são problemáticas, especialmente em escoamentos com baixos números de Reynolds ($Re < 10^5$). Para esses escoamentos, essas suposições podem causar erros na previsão da espessura das camadas de até 25% (CFX, 2005).

Além disso, esta função de parede apresenta o problema de se tornar singular quando a velocidade se aproxima de zero. Uma solução para isso, por exemplo, é definir uma nova escala de velocidade que impeça esse perfil singular. Porém, em códigos de CFD, o uso das funções de parede trazem a desvantagem de as previsões dependerem da localização do ponto mais próximo à parede e de serem sensíveis à malha utilizada

próxima à parede, sendo que nem sempre, o refino da malha aumenta a precisão da simulação.

Para evitar estes problemas, os códigos de CFD incluem alternativas de cálculos próximo à parede, às vezes baseados em funções empíricas, às vezes fazendo um tratamento automático que migre para um modelo mais específico para escoamentos turbulentos próximo à parede, porém, sempre resta a dúvida sobre a precisão destas previsões.

É neste contexto que o novo modelo de turbulência, que será abordado neste trabalho, enfoca sua possível e provável vantagem uma vez que pretende dispensar o uso destas funções de parede.

2.7 Balanço de Escalares

Em simulações de escoamentos sempre há o interesse de descrever o campo de velocidade. Porém, muitas vezes, deseja-se também descrever o perfil de propriedades escalares como a temperatura, calor, entalpia, concentração dentre outras.

Como o novo modelo de turbulência de Alfradique e Telles (2006) também propõe soluções para o fechamento dos balanços de energia e massa, com o intuito de calcular a temperatura e a concentração, que serão abordadas como escalares, esta seção dedica-se a comentar como são tratados atualmente os modelos para o fechamento do balanço destes escalares.

Chamando de ϑ a propriedade escalar de interesse, pode-se dizer que o balanço para este escalar é dado pela equação (2.6.1), que corresponde a uma lei de conservação generalizada da propriedade ϑ a partir do balanço do fluxo de ϑ em um volume de controle infinitesimal (Alho e Ilha, 2006).

$$\frac{\partial(\rho\vartheta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V \vartheta) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \vartheta) + S_{\vartheta} \tag{2.6.1}$$

onde Γ é o coeficiente de difusão ou difusividade de ϑ e S_{ϑ} é o termo fonte.

Conforme já comentado anteriormente, a decomposição da velocidade em suas componentes média e flutuante (turbulenta) é estendida às demais propriedades do escoamento. Assim, pode-se dizer que qualquer propriedade escalar ϑ pode ser reescrita em função de sua componentes média φ e sua componente turbulenta φ^t, conforme equação (2.6.2).

$$\vartheta = \varphi + \varphi^t \tag{2.6.2}$$

Substituindo a equação (2.6.2) na equação (2.6.1) e aplicando a média temporal, obtém-se a equação (2.6.3) que é idêntica à equação (2.6.1) para o valor da propriedade ϑ instantânea, exceto pelo termo $\nabla \cdot (\rho \overline{v^t \varphi^t})$. Este termo representa a divergência do momento turbulento da propriedade ϑ, também chamado de fluxo de Reynolds.

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \varphi) + \nabla \cdot (\rho \overline{v^t \varphi^t}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \varphi) + S_{\varphi} \tag{2.6.3}$$

Novamente, deve-se observar que para fechar o sistema de equações serão necessárias equações que descrevam cada um dos componentes do fluxo de Reynolds.

O tratamento mais comum dado a estes momentos turbulentos do escalar ϑ é assumir que são proporcionais ao gradiente do valor médio da quantidade transportada φ, conforme expresso na equação (2.6.4), em analogia à proposta da viscosidade turbulenta de Bousinesq (1877).

$$-\rho \overline{v_i^t \varphi^t} = \Gamma^t \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \tag{2.6.4}$$

onde Γ^t é a difusividade turbulenta da propriedade ϑ.

Esta suposição leva ainda à definição do número de Prandtl e Schmidt turbulentos, dados por σ^t na equação (2.6.5), dependendo se Γ^t assume o valor de difusividade térmica ou mássica, respectivamente.

$$\sigma^t = \frac{\mu^t}{\Gamma^t} \tag{2.6.5}$$

Deve-se observar que este modelo de fechamento para os balanços de escalares baseiam-se na escolha das variáveis arbitrárias μ^t e Γ^t que também precisarão ser modeladas. Porém, o valor de σ^t costuma ser admitido como constante devido à constatação deste resultado após experimentos com muitos escoamentos (Versteeg e Malalasekera, 1995), independendo assim da viscosidade turbulenta.

CAPÍTULO 3 – ESTUDO DO NOVO MODELO DE TURBULÊNCIA

O estudo do artigo de Alfradique e Telles (2006) compreende a reobtenção dos balanços de momento, energia e massa propostos para os valores médios e flutuantes da velocidade, temperatura e concentração, respectivamente. Com este estudo, pode-se compreender a origem das equações que serão utilizadas para posterior estudo do balanço de momento bem como dos balanços de energia e massa.

Este estudo pretende garantir que as equações utilizadas até o presente momento e que constam no artigo publicado de Alfradique e Telles (2006) estão corretas e assim, confiáveis para se seguir em frente com a investigação do problema encontrado na determinação dos parâmetros do balanço de momento em Klein (2006).

3.1 Balanço de Momento

A equação de Navier Stokes, inicialmente apresentada como na equação (2.1.6), pode ser escrita sob a seguinte forma:

$$\frac{\partial V_i}{\partial t} + \frac{\partial (V_p V_i)}{\partial x_p} = \nu \nabla^2 V_i - \frac{\partial (P/\rho)}{\partial x_i} \tag{3.1.1}$$

Deve-se observar que na equação (3.1.1) todos os termos encontram-se divididos pela densidade. Adotando a decomposição das propriedades do escoamento em suas componentes média e flutuante, conforme já expresso nas equações (2.1.2) e (2.1.7), e substituindo na equação de Navier-Stokes apresentada pela equação (3.1.1):

$$\frac{\partial \left(v_i + v_i^{\,t}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left[\left(v_p + v_p^{\,t}\right)\left(v_i + v_i^{\,t}\right)\right]}{\partial x_p} = \nu \nabla^2 \left(v_i + v_i^{\,t}\right) - \frac{\partial \left[\left(p + p^t\right)/\rho\right]}{\partial x_i} \tag{3.1.2}$$

Aplicando a Média Temporal, tem-se:

$$\overline{\frac{\partial\left(v_i+v_i^{\,t}\right)}{\partial t}}+\overline{\frac{\partial\left[\left(v_p+v_p^{\,t}\right)\left(v_p+v_p^{\,t}\right)\right]}{\partial x_p}}=\overline{\nu\nabla^2\left(v_i+v_i^{\,t}\right)}-\overline{\frac{\partial\left[\left(p+p^t\right)/\rho\right]}{\partial x_i}} \tag{3.1.3}$$

Avaliando cada termo da equação (3.1.1):

$$\overline{\frac{\partial V_i}{\partial t}}=\overline{\frac{\partial\left(v_i+v_i^{\,t}\right)}{\partial t}}=\overline{\frac{\partial v_i}{\partial t}}+\overline{\frac{\partial v_i^t}{\partial t}}=\frac{\partial v_i}{\partial t} \tag{3.1.4}$$

$$\overline{\frac{\partial(V_pV_i)}{\partial x_p}}=\overline{\frac{\partial\left[\left(v_p+v_p^{\,t}\right)\left(v_i+v_i^{\,t}\right)\right]}{\partial x_p}}=\overline{\frac{\partial}{\partial x_p}\left[v_pv_i+v_pv_i^t+v_p^tv_i+v_p^tv_i^t\right]}=\frac{\partial}{\partial x_p}\left[v_pv_i+R_{ip}\right] \tag{3.1.5}$$

$$\overline{\nu\nabla^2V_i}=\overline{\nu\nabla^2\left(v_i+v_i^{\,t}\right)}=\overline{\nu\nabla^2v_i}+\overline{\nu\nabla^2v_i^{\,t}}=\nu\nabla^2v_i \tag{3.1.6}$$

$$\overline{\frac{\partial(P/\rho)}{\partial x_i}}=\overline{\frac{\partial\left[\left(p+p^t\right)/\rho\right]}{\partial x_i}}=\overline{\frac{\partial(p/\rho)}{\partial x_i}}+\overline{\frac{\partial(p^t/\rho)}{\partial x_i}}=\frac{\partial(p/\rho)}{\partial x_i} \tag{3.1.7}$$

Dessa forma, a Equação de Navier-Stokes, aplicada a Média Temporal, assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_p}\left[v_pv_i+R_{ip}\right]=\nu\nabla^2v_i-\frac{\partial(p/\rho)}{\partial x_i} \tag{3.1.8}$$

Subtraindo-se a equação (3.1.8) da (3.1.1), obtém-se:

$$\left[\frac{\partial V_i}{\partial t}-\frac{\partial v_i}{\partial t}\right]+\frac{\partial\left[V_pV_i-v_pv_i-R_{ip}\right]}{\partial x_p}=\left[\nu\nabla^2V_i-\nu\nabla^2v_i\right]-\left[\frac{\partial[P/\rho]}{\partial x_i}-\frac{\partial[p/\rho]}{\partial x_i}\right] \tag{3.1.9}$$

Observando-se as equações (3.1.4), (3.1.5), (3.1.6) e (3.1.7), chega-se facilmente à uma equação de Balanço para a componente flutuante da velocidade:

$$\frac{\partial v_i^t}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_p}[v_pv_i^t+v_p^tv_i+v_p^tv_i^t-R_{ip}]=K_i \tag{3.1.10}$$

onde

$$K_i=\nu\nabla^2v_i^{\,t}-\frac{\partial(p^t/\rho)}{\partial x_i} \tag{3.1.11}$$

O Novo modelo de Turbulência define um novo termo J_{ip}, expresso na equação (3.1.12), de modo que o Balanço da equação (3.1.10) pode ser reescrito na forma da equação (3.1.13).

$$J_{ip} = v_p v_i^t + v_p^t v_i + v_p^t v_i^t - R_{ip} \tag{3.1.12}$$

$$\frac{\partial v_i^t}{\partial t} + \frac{\partial J_{ip}}{\partial x_p} = K_i \tag{3.1.13}$$

Neste modelo, então, os Balanços para os momentos de ordens superiores são expressos em função deste novo termo J_{ip} conforme se pode notar nas equações (3.1.14), (3.1.15), (3.1.16) e (3.1.17).

$$\frac{\partial\left(v_i^t v_j^t\right)}{\partial t} + \frac{\partial J_{ijp}}{\partial x_p} = K_{ij} \tag{3.1.14}$$

$$\frac{\partial\left(v_i^t v_j^t v_k^t\right)}{\partial t} + \frac{\partial J_{ijkp}}{\partial x_p} = K_{ijk} \tag{3.1.15}$$

onde

$$J_{ijp} = v_j^t J_{ip} + v_i^t J_{jp} \tag{3.1.16}$$

$$J_{ijkp} = v_i^t v_j^t J_{kp} + v_i^t v_k^t J_{jp} + v_j^t v_k^t J_{ip} \tag{3.1.17}$$

Aplicando a Média Temporal nas equações (3.1.14) e (3.1.15), chega-se aos Balanços dos momentos duplos (tensor de Reynolds) e Triplos, respectivamente, expressos nas equações (3.1.20) e (3.1.21). Para se chegar nestes resultados, não se pode esquecer das definições dos momentos e dos termos fonte:

$$\overline{v_i^t} = 0,\ \overline{v_i^t v_j^t} = R_{ij},\ \overline{v_i^t v_j^t v_k^t} = R_{ijk} \tag{3.1.18}$$

$$\overline{K_i} = 0,\ \overline{K_{ij}} = S_{ij},\ \overline{K_{ijk}} = S_{ijk} \tag{3.1.19}$$

$$\frac{\partial R_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{jp} v_i + R_{ip} v_j + 2R_{ij} v_p] + 2\frac{\partial R_{ijp}}{\partial x_p} = S_{ij} \tag{3.1.20}$$

$$\frac{\partial R_{ijk}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_p}[R_{jkp}v_i+R_{ikp}v_j+R_{ijp}v_k+3R_{ijp}v_p-R_{ij}R_{kp}-R_{jk}R_{ip}-R_{ik}R_{jp}+3R_{ijkp}]=S_{ijk} \quad (3.1.21)$$

3.2 Balanço de Energia

O Balanço Global para a energia (calor – temperatura) pode ser escrito na forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t}+\frac{\partial (v_p\theta)}{\partial x_p}=\alpha\nabla^2\theta+\sum_{\beta}\lambda_{q\beta}\nabla^2 C^{\beta}+\chi \quad (3.2.1)$$

Comparando com a equação (2.6.1), pode-se observar que o segundo termo do lado direito da equação (3.2.1) é um novo termo proposto a ser considerado que representa o Efeito Dufour do fluxo de calor laminar associado ao gradiente de concentração.

Da mesma forma que a velocidade e a pressão foram decompostas em suas componentes média e flutuante para o balanço de momento, a temperatura e a concentração podem ser decompostas nestes mesmos componentes conforme a equação (3.2.2) abaixo.

$$\theta=T+T^t \quad (3.2.2)$$

$$C^{\alpha}=c^{\alpha}+c^{\alpha t} \quad (3.2.3)$$

Substituindo na equação do Balanço Global, equação (3.2.1), tem-se:

$$\frac{\partial\left(T+T^t\right)}{\partial t}+\frac{\partial\left[\left(v_p+v_p{}^t\right)\left(T+T^t\right)\right]}{\partial x_p}=\alpha\nabla^2\left(T+T^t\right)+\sum_{\beta}\lambda_{q\beta}\nabla^2\left(c^{\beta}+c^{\beta t}\right)+\left(\overline{\chi}+\chi^t\right) \quad (3.2.4)$$

Aplicando a Média Temporal:

$$\overline{\frac{\partial\left(T+T^t\right)}{\partial t}}+\overline{\frac{\partial\left[\left(v_p+v_p{}^t\right)\left(T+T^t\right)\right]}{\partial x_p}}=\overline{\alpha\nabla^2\left(T+T^t\right)}+\overline{\sum_{\beta}\lambda_{q\beta}\nabla^2\left(c^{\beta}+c^{\beta t}\right)+\left(\overline{\chi}+\chi^t\right)} \quad (3.2.5)$$

Avaliando cada termo da (3.2.1):

$$\overline{\frac{\partial \theta}{\partial t}} = \overline{\frac{\partial\left(T + T^t\right)}{\partial t}} = \overline{\frac{\partial T}{\partial t}} + \overline{\frac{\partial T^t}{\partial t}} = \frac{\partial T}{\partial t} \tag{3.2.6}$$

$$\overline{\frac{\partial (v_p \theta)}{\partial x_p}} = \overline{\frac{\partial\left[\left(v_p + v_p{}^t\right)\left(T + T^t\right)\right]}{\partial x_p}} = \overline{\frac{\partial\left[v_p T + v_p T^t + v_p{}^t T + v_p{}^t T^t\right]}{\partial x_p}} = \frac{\partial}{\partial x_p}[v_p T + q_p] \tag{3.2.7}$$

$$\overline{\alpha \nabla^2 \theta} = \overline{\alpha \nabla^2 \left(T + T^t\right)} = \overline{\alpha \nabla^2 T} + \overline{\alpha \nabla^2 T^t} = \alpha \nabla^2 T \tag{3.2.8}$$

$$\overline{\sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 \left(c^\beta + c^{\beta t}\right) + \left(\overline{\chi} + \chi^t\right)} = \overline{\sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 c^\beta + \overline{\chi} + \sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 c^{\beta t} + \chi^t} = \sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 c^\beta + \overline{\chi} \tag{3.2.9}$$

Dessa forma, a Equação do Balanço Global de Energia, aplicada a Média Temporal, assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[v_p T + q_p] = \alpha \nabla^2 T + \sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 c^\beta + \overline{\chi} \tag{3.2.10}$$

Subtraindo-se a equação (3.2.10) da equação (3.2.1), obtém-se:

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial T}{\partial t}\right] + \left[\frac{\partial}{\partial x_p}[v_p \theta - v_p T - q_p]\right] = \left[\alpha \nabla^2 \theta - \alpha \nabla^2 T\right] + \sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 \left(C^\beta - c^\beta\right) + \left(\chi - \overline{\chi}\right) \tag{3.2.11}$$

Observando-se as equações (3.2.6), (3.2.7), (3.2.8) e (3.2.9), chega-se facilmente à uma equação de Balanço para a componente flutuante da temperatura:

$$\frac{\partial T^t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[v_p T^t + v_p{}^t T + v_p{}^t T^t - q_p] = \alpha \nabla^2 T^t + \sum_\beta \lambda_{q\beta} \nabla^2 c^{\beta t} + \chi^t = \kappa \tag{3.2.12}$$

O Novo modelo de Turbulência define novamente um novo termo j_p, expresso na equação (3.2.13), de modo que o Balanço da (3.2.12) pode ser reescrito na forma da (3.2.14).

$$j_p = v_p T^t + v_p{}^t T + v_p{}^t T^t - q_p \tag{3.2.13}$$

$$\frac{\partial T^t}{\partial t} + \frac{\partial j_p}{\partial x_p} = \kappa \tag{3.2.14}$$

Neste modelo, então, novamente os Balanços para as "temperaturas de ordens superiores" são expressos em função deste novo termo j_p e do termo J_{ip} (do Balanço de momento) conforme se pode notar nas equações (3.2.15), (3.2.16), (3.2.17) e (3.2.18).

$$\frac{\partial v_i T^t}{\partial t} + \frac{\partial j_{ip}}{\partial x_p} = \kappa_i \tag{3.2.15}$$

$$\frac{\partial v_i v_j T^t}{\partial t} + \frac{\partial j_{ijp}}{\partial x_p} = \kappa_{ij} \tag{3.2.16}$$

$$j_{ip} = T^t J_{ip} + v_i^t j_p \tag{3.2.17}$$

$$j_{ijp} = T^t J_{ijp} + v_i^t v_j^t j_p \tag{3.2.18}$$

Aplicando a Média Temporal nas equações (3.2.17) e (3.2.18), chega-se aos Balanços das "temperaturas de segunda e terceira ordem", respectivamente, expressos nas equações (3.2.21) e (3.2.22). Para se chegar nestes resultados, não se pode esquecer das definições das temperaturas e dos termos fonte:

$$\overline{T^t} = 0,\ \overline{T^t v_i^t} = q_i,\ \overline{T^t v_i^t v_j^t} = q_{ij},\ \overline{T^t v_i^t v_j^t v_k^t} = q_{ijk} \tag{3.2.19}$$

$$\overline{\kappa_i} = s_i,\ \overline{\kappa_{ij}} = s_{ij} \tag{3.2.20}$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ip}T + v_i q_p + 2v_p q_i + 2q_{ip}] = s_i \tag{3.2.21}$$

$$\frac{\partial q_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ijp}T + v_i q_{jp} + v_j q_{ip} + 3q_{ij}v_p - R_{jp}q_i - R_{ij}q_p - R_{ip}q_j + 3q_{ijp}] = s_{ij} \tag{3.2.22}$$

3.3 Balanço de Massa

O Balanço Global para a massa (concentração de cada componente) pode ser escrito na forma:

$$\frac{\partial C^{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial (v_p C^{\alpha})}{\partial x_p}=\lambda_{\alpha\theta}\nabla^2\theta+\sum_{\beta}D_{\alpha\beta}\nabla^2 c^{\beta}+\chi^{\alpha} \tag{3.3.1}$$

Comparando com a equação (2.6.1), pode-se observar que o primeiro termo do lado direito da equação (3.3.1) é um novo termo proposto a ser considerado que representa o Efeito Soret, determinado o fluxo de massa de cada componente devido ao gradiente de temperatura.

Pode-se observar que o lado esquerdo da equação (3.3.1) referente ao Balanço Global de Massa é análogo ao lado esquerdo da equação (3.2.1) referente ao Balanço Global de Energia. Dessa forma, todas as operações realizadas a partir da equação (3.2.1), podem ser estendidas à equação (3.3.1), porém trocando-se T por c^{α}, sendo c^{α} a componente média da concentração do componente α, no lado esquerdo da equação e κ por K para o lado direito da equação.

Para se obter então as equações de Balanço da concentração média e das "concentrações de segunda e terceira ordens", serão definidas as seguintes variáveis, conforme feito para o Balanço de Energia:

$$\lambda_{\alpha\theta}\nabla^2 T^t+\sum_{\beta}D_{\alpha\beta}\nabla^2 c^{\beta t}+\chi^{\alpha t}=\mathrm{K} \tag{3.3.2}$$

$$\overline{c^{\alpha t}}=0,\ \overline{c^{\alpha t}v_i^t}=m_i^{\alpha},\ \overline{c^{\alpha t}v_i^t v_j^t}=m_{ij}^{\alpha},\ \overline{c^{\alpha t}v_i^t v_j^t v_k^t}=m_{ijk}^{\alpha} \tag{3.3.3}$$

$$\overline{\mathrm{K}_i}=n_i^{\alpha},\ \overline{\mathrm{K}_{ij}}=n_{ij}^{\alpha} \tag{3.3.4}$$

Assim, chega-se às equações de Balanço da concentração média e das "concentrações de segunda e terceira ordens", respectivamente equações (3.3.5), (3.3.6) e (3.3.7).

$$\frac{\partial c^{\alpha}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_p}[v_p c^{\alpha}+m_p^{\alpha}]=\lambda_{\alpha\theta}\nabla^2 T+\sum_{\beta}D_{\alpha\beta}\nabla^2 c^{\beta}+\chi^{\alpha} \tag{3.3.5}$$

$$\frac{\partial m_i^\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ip}c^\alpha + v_i m_p^\alpha + 2v_p m_i^\alpha + 2m_{ip}^\alpha] = n_i^\alpha \tag{3.3.6}$$

$$\frac{\partial m_{ij}^\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ijp}c^\alpha + v_i m_{jp}^\alpha + v_j m_{ip}^\alpha + 3m_{ij}^\alpha v_p - R_{jp}m_i^\alpha - R_{ij}m_p^\alpha - R_{ip}m_j^\alpha + 3m_{ijp}^\alpha] = n_{ij}^\alpha \tag{3.3.7}$$

3.4 Equações Resultantes do Estudo do Novo Modelo de Turbulência

De forma pragmática para este trabalho, pode-se explicitar as equações relevantes para os Balanços de Momento, Energia e Massa.

Para o Balanço de Momento, as equações que compõem o sistema são as equações (3.1.8), (3.1.20) e (3.1.21). Por uma questão de síntese e facilidade, estas estão repetidas adiante:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}\left[v_p v_i + R_{ip}\right] = \nu\nabla^2 v_i - \frac{\partial(p/\rho)}{\partial x_i} \tag{3.1.8}$$

$$\frac{\partial R_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{jp}v_i + R_{ip}v_j + 2R_{ij}v_p] + 2\frac{\partial R_{ijp}}{\partial x_p} = S_{ij} \tag{3.1.20}$$

$$\frac{\partial R_{ijk}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{jkp}v_i + R_{ikp}v_j + R_{ijp}v_k + 3R_{ijp}v_p - R_{ij}R_{kp} - R_{jk}R_{ip} - R_{ik}R_{jp} + 3R_{ijkp}] = S_{ijk} \tag{3.1.21}$$

Para o Balanço de Energia, as Equações que compõem o sistema são as equações (3.2.10), (3.2.21) e (3.2.22). Pelo mesmo motivo acima, estas estão repetidas adiante:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[v_p T + q_p] = \alpha\nabla^2 T + \sum_\beta \lambda_{q\beta}\nabla^2 c^\beta + \overline{\chi} \tag{3.2.10}$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ip}T + v_i q_p + 2v_p q_i + 2q_{ip}] = s_i \tag{3.2.21}$$

$$\frac{\partial q_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ijp}T + v_i q_{jp} + v_j q_{ip} + 3q_{ij}v_p - R_{jp}q_i - R_{ij}q_p - R_{ip}q_j + 3q_{ijp}] = s_{ij} \tag{3.2.22}$$

Para o Balanço de Massa, as Equações que compõem o sistema são as equações (3.3.5), (3.3.6) e (3.3.7). Novamente, estas equações estão repetidas adiante:

$$\frac{\partial c^{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[v_p c^{\alpha} + m_p^{\alpha}] = \lambda_{\alpha\theta}\nabla^2 T + \sum_{\beta} D_{\alpha\beta}\nabla^2 c^{\beta} + \chi^{\alpha} \tag{3.3.5}$$

$$\frac{\partial m_i^{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ip}c^{\alpha} + v_i m_p^{\alpha} + 2v_p m_i^{\alpha} + 2m_{ip}^{\alpha}] = n_i^{\alpha} \tag{3.3.6}$$

$$\frac{\partial m_{ij}^{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_p}[R_{ijp}c^{\alpha} + v_i m_{jp}^{\alpha} + v_j m_{ip}^{\alpha} + 3m_{ij}^{\alpha}v_p - R_{jp}m_i^{\alpha} - R_{ij}m_p^{\alpha} - R_{ip}m_j^{\alpha} + 3m_{ijp}^{\alpha}] = n_{ij}^{\alpha} \tag{3.3.7}$$

Comparando estas equações com as que se encontram no artigo de Alfradique e Telles (2006), pode-se observar que há uma pequena diferença para os balanços das componentes flutuantes de momento, energia e massa.

Dessa forma, as equações utilizadas neste trabalho serão estas aqui deduzidas.

3.5 Correlações e Parâmetros do Modelo

Observando-se os balanços de Momento, Energia e Massa para as componentes flutuantes da velocidade, temperatura e concentração, percebe-se que, para se resolver o primeiro nível das equações do fechamento de momento, são necessárias correlações para os termos R_{ijk} e S_{ij}; para se resolver o primeiro nível das equações do fechamento de energia, são necessárias correlações para os termos q_{ip} e s_i; e, para se resolver o primeiro nível das equações do fechamento de massa, são necessárias correlações para os termos m_{ip}^{α} e n_i^{α}; enquanto que, para o segundo nível das equações do fechamento de momento, serão necessárias correlações para os termos R_{ijkp}, S_{ijk} e S_{ij}; para o segundo nível das equações do fechamento de energia, serão necessárias correlações para os

termos q_{ijp}, s_{ij} e s_i; e, para o segundo nível das equações do fechamento de massa, serão necessárias correlações para os termos m^{α}_{ijp}, n^{α}_{ij} e n^{α}_{i}.

Alfradique e Telles (2006) propõem em seu artigo as seguintes correlações para os termos citados acima:

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij}v_p + \delta_{jp}v_i + \delta_{pi}v_j] + a_1^1[R_{ij}v_p + R_{jp}v_i + R_{pi}v_j] + a_2^1[R_{il}R_{lj}v_p + R_{jl}R_{lp}v_i + R_{pl}R_{li}v_j] \quad (3.5.1)$$

$$S_{ij} = b_0^0\delta_{ij} + b_0^2 v_i v_j + b_1^0 R_{ij} + b_2^0 R_{ik}R_{ij} + b_1^2[v_i R_{jk} v_k + R_{ik} v_k v_j] + b_2^2[v_i R_{jp} R_{pk} v_k + R_{ip} R_{pk} v_k v_j] \quad (3.5.2)$$

$$R_{ijkp} = d_0^0 \delta_{ij}\delta_{kp} + d_1^0(\delta_{ij}R_{kp} + \delta_{jk}R_{pi} + \delta_{kp}R_{ij} + \delta_{pi}R_{jk}) \quad (3.5.3)$$

$$S_{ijk} = c_0^1(\delta_{ij}v_k + \delta_{jk}v_i + \delta_{ki}v_j) + eR_{ijk} \quad (3.5.4)$$

$$q_{ij} = e_0^0\delta_{ij} + e_1^0 R_{ij} + e_2^0 R_{il}R_{lj} + \sum_{\substack{\varpi,\omega= \\ v,q,m}} e_0^{\varpi,\omega}\varpi_i\omega_j + e_1^{\varpi,\omega}[\varpi_i R_{jl}\omega_l + R_{il}\varpi_l\omega_j] + e_2^{\varpi,\omega}[\varpi_i R_{jp}R_{pl}\omega_l + R_{ip}R_{pl}\varpi_l\omega_j] \quad (3.5.5)$$

$$s_i = \sum_{\varpi=v,q,m} f_0^{\varpi}\varpi_i + f_1^{\varpi}R_{ij}\varpi_j + f_2^{\varpi}R_{ij}R_{jk}\varpi_k \quad (3.5.6)$$

$$m_{ip}^{\alpha} = g_0^{\alpha 0}\delta_{ij} + g_1^{\alpha 0}R_{ij} + g_2^{\alpha 0}R_{il}R_{lj} + \sum_{\substack{\varpi,\omega= \\ v,q,m}} g_0^{\alpha\varpi,\omega}\varpi_i\omega_j + g_1^{\alpha\varpi,\omega}[\varpi_i R_{jl}\omega_l + R_{il}\varpi_l\omega_j] + g_2^{\alpha\varpi,\omega}[\varpi_i R_{jp}R_{pl}\omega_l + R_{ip}R_{pl}\varpi_l\omega_j] \quad (3.5.7)$$

$$n_i^{\alpha} = \sum_{\varpi=v,q,m} h_0^{\alpha\varpi}\varpi_i + h_1^{\alpha\varpi}R_{ij}\varpi_j + h_2^{\alpha\varpi}R_{ij}R_{jk}\varpi_k \quad (3.5.8)$$

Acima, no lado direito das equações, todos os termos que não são δ_{ij}, v, R, q ou m são os parâmetros do modelo que devem ser determinados.

O índice superior dos parâmetros refere-se à ordem em que a velocidade aparece relacionada a este termo e o índice inferior, à ordem em que os tensores de Reynolds aparecem relacionados ao termo.

Conforme se pode observar, no artigo só foram registradas as correlações para o fechamento de primeira ordem dos balanços de energia e massa. Porém, por analogia ao balanço de momento, as correlações para os termos referentes ao fechamento de segunda ordem dos balanços de energia e massa poderiam ser deduzidas.

CAPÍTULO 4 – DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DO BALANÇO DE MOMENTO

Neste capítulo serão descritas as diversas abordagens realizadas para solucionar o problema encontrado na determinação dos parâmetros do balanço de momento em Klein (2006).

Primeiramente, o problema encontrado na determinação dos parâmetros será descrito e posteriormente seguirão as abordagens para solução do problema.

Deve-se ressaltar que, para todas as abordagens que serão descritas, inclusive aquela já apresentada em Klein (2006), foi escolhido o cenário de um escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas para a determinação dos parâmetros para o fechamento do balanço de momento para o qual o modelo de Alfradique e Telles (2006) poderia ser significativamente simplificado. Para o cenário então citado, pode-se dizer que $v_1 = v_1(x_2)$ e $v_2 = v_3 = 0$.

As Equações do Novo Modelo de Turbulência de Alfradique e Telles (2006) encontram-se expressas através da notação de Einstein assim como as equações do modelo descritas no Capítulo 3.

No cenário escolhido, o índice da notação de Einstein *"p"* assumirá um único valor, 2, que corresponde ao índice da direção do escoamento, x_2.

4.1 Problema Encontrado, em Estudo Anterior, na Determinação dos Parâmetros do Balanço de Momento

Inicialmente, é preciso definir qual o problema encontrado por Klein (2006) na determinação dos parâmetros.

O sistema de equações provenientes da aplicação do modelo de Alfradique e Telles (2006) no cenário acima descrito que deu origem aos parâmetros foi:

$$b_0^0 + b_1^0 R_{11} + \frac{2}{3} f = \frac{d}{dx_2}\left[2R_{12}v_1 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1}\right] \tag{4.1.1}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{22} + 2f = 3\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{22}}{v_1}\right] \tag{4.1.2}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{33} + f = \frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{33}}{v_1}\right] \tag{4.1.3}$$

$$b_1^0 R_{12} + g = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + \frac{R_{11}R_{12} + 2R_{12}^2}{2v_1}\right] \tag{4.1.4}$$

$$f = \frac{d}{dx_2}\left[\frac{d_1^0 R_{12}}{v_1}\right] \tag{4.1.5}$$

$$g = \frac{d}{dx_2}\left[\frac{d_0^0 + d_1^0(R_{11} + R_{22})}{2v_1}\right] \tag{4.1.6}$$

Resolvendo o sistema acima para os quatro parâmetros (b_0^0, b_1^0, f e g), e dispondo de arquivos de bancos de dados de DNS onde as variáveis R_{ij} e v_i encontram-se adimensionalizadas como R_{ij}^+ e v_i^+, obteve-se o seguinte ajuste para cada parâmetro, também em sua adimensional, na forma geral de um polinômio, expresso na equação (4.1.7), conforme abaixo:

$$y(x) = a_0x^6 + a_1x^5 + a_2x^4 + a_3x^3 + a_4x^2 + a_5x + a_6 \tag{4.1.7}$$

Tabela 4.1 – Valor dos Coeficientes dos Polinômios de Cada um dos Parâmetros em Klein (2006).

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
b_0^{0+}	-1,4615E-06	7,4420E-05	-1,4577E-03	1,4000E-02	-6,3572E-02	6,9035E-02	-1,1977E-02
b_1^{0+}	1,2290E-06	-6,7930E-05	1,3776E-03	1,2320E-02	4,0036E-02	2,0472E-02	8,0489E-02
f^+	-	-	4,0334E-05	-1,3757E-03	1,2447E-02	1,4406E-02	4,6504E-03
g^+	4,6054E-07	-1,3197E-05	1,3688E-05	1,9707E-03	-1,2604E-02	2,7364E-02	-7,1047E-03

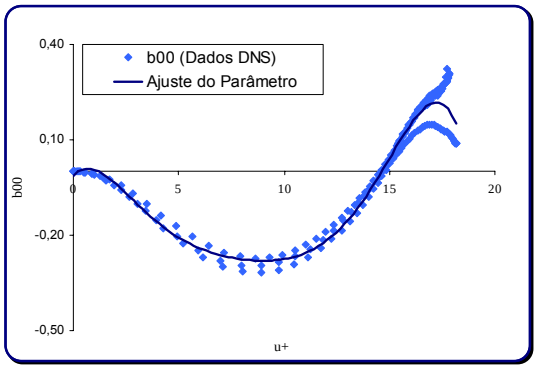


Figura 4.1 – Ajuste do Parâmetro b_0^{0+} em Klein (2006).

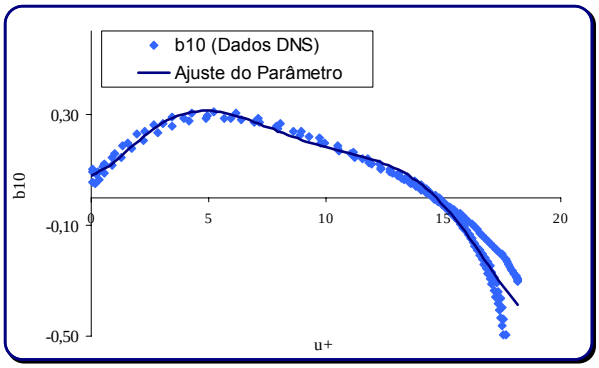


Figura 4.2 – Ajuste do Parâmetro b_1^{0+} em Klein (2006).

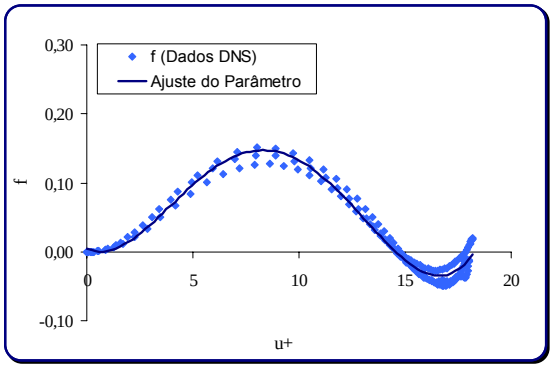


Figura 4.3 – Ajuste do Parâmetro f^+ em Klein (2006).

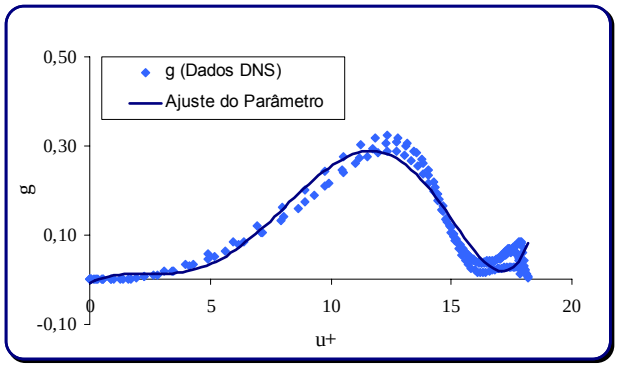


Figura 4.4 – Ajuste do Parâmetro g^+ em Klein (2006).

O problema na determinação dos parâmetros foi identificado na etapa de validação das correlações obtidas para cada parâmetro (no caso, os polinômios) onde se pretendia recalcular os componentes adimensionais do tensor de Reynolds, utilizando as expressões de cada parâmetro.

O resultado encontrado segue abaixo:

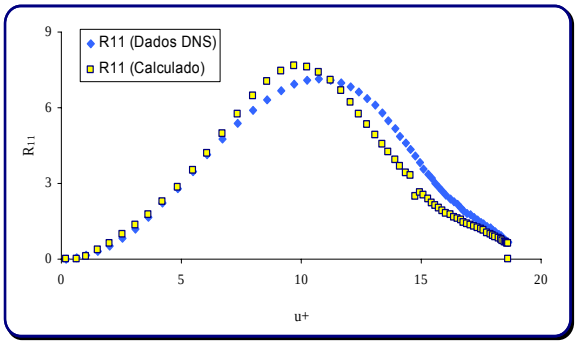


Figura 4.5 – Componente R_{11}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

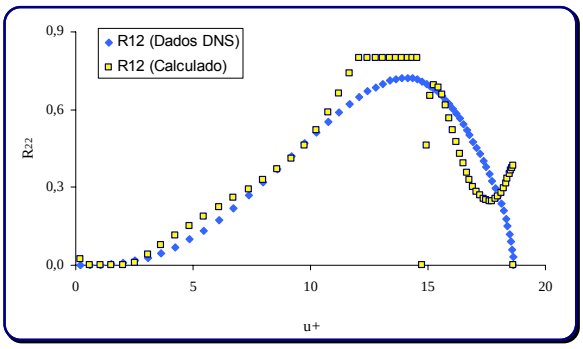


Figura 4.6 – Componente -R_{12}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

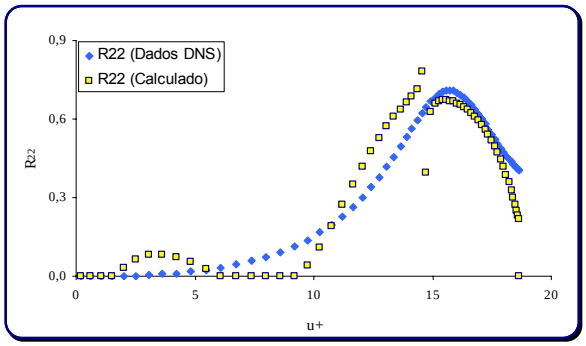


Figura 4.7 – Componente R_{22}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

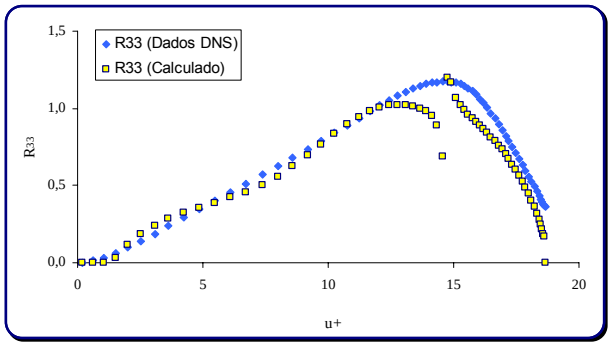


Figura 4.8 – Componente R_{33}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

Conforme se pode notar, o problema associado à determinação dos parâmetros é um comportamento característico ruim em torno de $v^{+} = 14{,}6$. Este comportamento ocorreu para todos os quatro Componentes do tensor de Reynolds para todos os arquivos de DNS testados.

Em Klein (2006), identificou-se que este problema ocorria devido ao fato de o parâmetro b_1^0 cruzar o eixo de v^{+} aproximadamente neste valor.

É importante ressaltar que todo o procedimento realizado em Klein (2006) foi repetido, porém utilizando as equações corretas do modelo deduzidas no Capítulo 3. Assim, todas as etapas para se chegar aos resultados acima serão descritas adiante.

4.2 Correção das Equações Utilizadas em Estudo Anterior

Após identificar uma pequena diferença entre as equações do artigo Alfradique e Telles (2006) e aquelas deduzidas no Capítulo 3 deste trabalho, os parâmetros do trabalho de Klein (2006) foram reobtidos de modo a testar se esta pequena diferença solucionaria o problema encontrado.

O passo a passo do procedimento realizado em Klein (2006) será descrito nesta seção, onde será realizado o mesmo trabalho, porém com as equações corrigidas pelo Capítulo 3 desta dissertação.

No trabalho de Klein (2006), foi proposto adotar a forma linear para as correlações dos termos R_{ijk} e S_{ij} para o primeiro nível do fechamento e também a forma linear para as correlações dos termos R_{ijkp}, S_{ijk} e S_{ij} para o segundo nível do fechamento, conforme sugerido pelo artigo de Alfradique e Telles (2006). Assim, as equações (3.5.1), (3.5.2), (3.5.3) e (3.5.4) assumem a seguinte forma:

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij}v_p + \delta_{jp}v_i + \delta_{pi}v_j] \tag{4.2.1}$$

$$S_{ij} = b_0^0\delta_{ij} + b_1^0 R_{ij} \tag{4.2.2}$$

$$R_{ijkp} = d_0^0\delta_{ij}\delta_{kp} + d_1^0(\delta_{ij}R_{kp} + \delta_{jk}R_{pi} + \delta_{kp}R_{ij} + \delta_{pi}R_{jk}) \tag{4.2.3}$$

$$S_{ijk} = c_0^1(\delta_{ij}v_k + \delta_{jk}v_i + \delta_{ki}v_j) + eR_{ijk} \tag{4.2.4}$$

Em Klein (2006), mostrou-se que para o primeiro nível do fechamento, com as correlações acima, obtém-se que R_{22} é igual a R_{33}, o que entra em conflito com observações experimentais e dados de DNS. Dessa forma, o primeiro nível do fechamento foi descartado.

Para o segundo nível do fechamento, obteve-se o seguinte conjunto de equações, agora corrigido pelas equações deduzidas no Capítulo 3 deste trabalho:

(1,1,1) $$\frac{d}{dx_2}[3R_{112}v_1 - 3R_{11}R_{12} + 6d_1^0R_{12}] = 3c_0^1v_1 + eR_{111} \tag{4.2.5}$$

(1,1,2) $$\frac{d}{dx_2}[2R_{122}v_1 - (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) + 3d_0^0 + 3d_1^0(R_{11} + R_{22})] = eR_{112} \tag{4.2.6}$$

(1,2,2) $$\frac{d}{dx_2}[R_{222}v_1 - 3R_{12}R_{22} + 6d_1^0R_{12}] = c_0^1v_1 + eR_{122} \tag{4.2.7}$$

(1,3,3) $$\frac{d}{dx_2}[R_{233}v_1 - R_{12}R_{33} + 3d_1^0R_{12}] = c_0^1v_1 + eR_{133} \quad (4.2.8)$$

(2,2,2) $$\frac{d}{dx_2}[-3R_{22}^2 + 3(d_0^0 + 4d_1^0R_{22})] = eR_{222} \quad (4.2.9)$$

(2,3,3) $$\frac{d}{dx_2}[-R_{22}R_{33} + 3d_1^0(R_{22} + R_{33})] = eR_{233} \quad (4.2.10)$$

(1,1) $$b_0^0 + b_1^0R_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + R_{112}\right] \quad (4.2.11)$$

(1,2) $$b_1^0R_{12} = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + 2R_{122}\right] \quad (4.2.12)$$

(2,2) $$b_0^0 + b_1^0R_{22} = 2\frac{dR_{222}}{dx_2} \quad (4.2.13)$$

(3,3) $$b_0^0 + b_1^0R_{33} = 2\frac{dR_{233}}{dx_2} \quad (4.2.14)$$

Deve-se ressaltar que, no conjunto de equações acima, os componentes do tensor que assumem valor zero no cenário proposto ($R_{13} = R_{23} = 0$) não foram explicitados. Uma vez substituindo os valores dos componentes do tensor de Reynolds que são nulos, obtêm-se momentos triplos que também são nulos e estes também não foram explicitados.

Em Klein (2006), foi proposto, conforme sugerido pelo artigo de Alfradique e Telles (2006), assumir que os parâmetros c_1^0 e e são zero. Substituindo o valor destes parâmetros nas equações (4.2.5) a (4.2.10) e integrando-as da parede ($x_2 = 0$, onde todas as variáveis em questão, velocidade e componentes do tensor de Reynolds são zero) a qualquer x_2, obtêm-se expressões explicitas para os momentos triplos R_{112}, R_{122}, R_{222} e R_{233} que podem ser substituídas nas equações (4.2.11) a (4.2.14), respectivamente.

Ainda em Klein (2006), optou-se por redefinir os parâmetros d_0^0 e d_1^0 em função de novos parâmetros, f e g, já descritos nas equações (4.1.5) e (4.1.6).

O sistema resultante da manipulação algébrica descrita acima é análogo ao encontrado em Klein (2006) – equações (4.1.1) a (4.1.4) – e segue abaixo (equações (4.2.15) a (4.2.18)). A única diferença está em algumas constantes que se devem à correção das equações conforme deduzido no Capítulo 3.

$$b_0^0 + b_1^0 R_{11} + 2f = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1}\right] \tag{4.2.15}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{22} + 12f = 6\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{22}}{v_1}\right] \tag{4.2.16}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{33} + 6f = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{33}}{v_1}\right] \tag{4.2.17}$$

$$b_1^0 R_{12} + 3g = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + \frac{R_{11}R_{12} + 2R_{12}^2}{v_1}\right] \tag{4.2.18}$$

Como se pretende trabalhar com bancos de dados de DNS cujos arquivos fornecem apenas o perfil das variáveis adimensionais, é conveniente avaliar o sistema de equações do balanço de momento que será utilizado para a determinação dos parâmetros de modo a adimensionalizá-lo e identificar também a forma adimensional dos parâmetros.

Substituindo na equação (3.1.20) as expressões de R_{ij}^+ e v_i^+, expressos nas equações (2.5.7) e (2.5.2), e zerando a derivada de R_{ij} em relação ao tempo uma vez que o cenário em estudo apresenta estado estacionário, obtém-se:

$$\frac{\rho}{\mu} v_\tau^4 \frac{\partial}{\partial y^+}[R_{jp}^+ v_i^+ + R_{ip}^+ v_j^+ + 2R_{ij}^+ v_p^+ + 2R_{ijp}^+] = S_{ij}^+ = b_0^0 \delta_{ij} + v_\tau^2 b_1^0 R_{ij}^+ \tag{4.2.19}$$

De modo a esta equação ficar análoga à equação (3.1.20), apenas com termos adimensionais:

$$\frac{\partial}{\partial y^+}[R^+_{jp}v^+_i + R^+_{ip}v^+_j + 2R^+_{ij}v^+_p + 2R^+_{ijp}] = \underbrace{\frac{\mu}{\rho}\frac{1}{v^4_\tau}b^0_0}_{b^{0+}_0}\delta_{ij} + \underbrace{\frac{\mu}{\rho}\frac{1}{v^2_\tau}b^0_1}_{b^{0+}_1}R^+_{ij} \tag{4.2.20}$$

E assim, pode-se escrever:

$$\frac{\partial}{\partial y^+}[R^+_{jp}v^+_i + R^+_{ip}v^+_j + 2R^+_{ij}v^+_p + 2R^+_{ijp}] = b^{0+}_0\delta_{ij} + b^{0+}_1R^+_{ij} \tag{4.2.21}$$

onde

$$b^0_0 = \frac{\rho}{\mu}v^4_\tau b^{0+}_0 \tag{4.2.22}$$

$$b^0_1 = \frac{\rho}{\mu}v^2_\tau b^{0+}_1 \tag{4.2.23}$$

Analogamente para a equação (3.1.21) e considerando que c^0_1 e e são zero, ou seja, S_{ijk}=0:

$$\begin{aligned}&\frac{\rho}{\mu}v^5_\tau\frac{\partial}{\partial y^+}[R^+_{jkp}v^+_i + R^+_{ikp}v^+_j + R^+_{ijp}v^+_k + 3R^+_{ijp}v^+_p - R^+_{ij}R^+_{kp} - R^+_{jk}R^+_{ip} - R^+_{ik}R^+_{jp}] + \\ &3\frac{\rho}{\mu}v_\tau\frac{\partial}{\partial y^+}[d^0_0\delta_{ij}\delta_{kp} + d^0_1(\delta_{ij}R_{kp} + \delta_{jk}R_{pi} + \delta_{kp}R_{ij} + \delta_{pi}R_{jk})] = 0\end{aligned} \tag{4.2.24}$$

De modo a esta equação ficar análoga à equação (3.1.21), apenas com termos adimensionais:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial y^+}[R^+_{jkp}v^+_i + R^+_{ikp}v^+_j + R^+_{ijp}v^+_k + 3R^+_{ijp}v^+_p - R^+_{ij}R^+_{kp} - R^+_{jk}R^+_{ip} - R^+_{ik}R^+_{jp}] + \\ &3\frac{\partial}{\partial y^+}[\underbrace{\frac{d^0_0}{v^4_\tau}}_{d^{0+}_0}\delta_{ij}\delta_{kp} + \underbrace{\frac{d^0_1}{v^2_\tau}}_{d^{0+}_1}(\delta_{ij}R_{kp} + \delta_{jk}R_{pi} + \delta_{kp}R_{ij} + \delta_{pi}R_{jk})] = 0\end{aligned} \tag{4.2.25}$$

E assim, pode-se escrever:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial y^+}[R^+_{jkp}v^+_i + R^+_{ikp}v^+_j + R^+_{ijp}v^+_k + 3R^+_{ijp}v^+_p - R^+_{ij}R^+_{kp} - R^+_{jk}R^+_{ip} - R^+_{ik}R^+_{jp}] + \\ &3\frac{\partial}{\partial y^+}[d^{0+}_0\delta_{ij}\delta_{kp} + d^{0+}_1(\delta_{ij}R_{kp} + \delta_{jk}R_{pi} + \delta_{kp}R_{ij} + \delta_{pi}R_{jk})] = 0\end{aligned} \tag{4.2.26}$$

onde

$$d_0^0 = v_\tau^4 d_0^{0+} \tag{4.2.27}$$

$$d_1^0 = v_\tau^2 d_1^{0+} \tag{4.2.28}$$

Pode-se observar que as equações (4.2.21) e (4.2.26) são análogas às equações (3.1.20) e (3.1.21), respectivamente, e assim, tudo aquilo que foi deduzido para o sistema dimensional pode ser reescrito sob a forma adimensional desde que substituindo as variáveis dimensionais por suas respectivas formas adimensionais.

Assim, o sistema de equações composto pelas equações (4.2.15) a (4.2.18) pode ser reescrito da seguinte forma:

$$b_0^{0+} + b_1^{0+} R_{11}^+ + 2f^+ = 2\frac{d}{dy^+}\left[R_{12}^+ v_1^+ + \frac{R_{11}^+ R_{12}^+}{v_1^+}\right] \tag{4.2.29}$$

$$b_0^{0+} + b_1^{0+} R_{22}^+ + 12f^+ = 6\frac{d}{dy^+}\left[\frac{R_{12}^+ R_{22}^+}{v_1^+}\right] \tag{4.2.30}$$

$$b_0^{0+} + b_1^{0+} R_{33}^+ + 6f^+ = 2\frac{d}{dy^+}\left[\frac{R_{12}^+ R_{33}^+}{v_1^+}\right] \tag{4.2.31}$$

$$b_1^{0+} R_{12}^+ + 3g^+ = \frac{d}{dy^+}\left[R_{22}^+ v_1^+ + \frac{R_{11}^+ R_{12}^+ + 2R_{12}^{+2}}{v_1^+}\right] \tag{4.2.32}$$

Resolvendo o sistema formado pelas equações (4.2.29) a (4.2.32) considerando b_0^{0+}, b_1^{0+}, f^+ e g^+ as variáveis e os demais termos como conhecidos dos arquivos de DNS, obtém-se a correlação para cada um dos quatro parâmetros (b_0^{0+}, b_1^{0+}, f^+ e g^+) do segundo nível de fechamento, expressos em função dos componentes adimensionais do tensor de Reynolds ($R_{11}^+, R_{12}^+, R_{22}^+$ e R_{33}^+) conforme equações (4.2.33) a (4.2.36).

$$b_0^{0+} = -\frac{3R_{11}^+ I_2 - 6R_{11}^+ I_3 + 6R_{33}^+ I_1 - R_{33}^+ I_2 + R_{22}^+ I_3 - 3R_{22}^+ I_1}{3R_{11}^+ + 2R_{22}^+ - 5R_{33}^+} \tag{4.2.33}$$

$$b_1^{0+} = \frac{3I_1 + 2I_2 - 5I_3}{3R_{11}^+ + 2R_{22}^+ - 5R_{33}^+} \tag{4.2.34}$$

$$f^+ = \frac{1}{2}\frac{R_{33}^+ I_1 - R_{33}^+ I_2 + R_{11}^+ I_2 - R_{11}^+ I_3 + R_{22}^+ I_3 - R_{22}^+ I_1}{3R_{11}^+ + 2R_{22}^+ - 5R_{33}^+} \tag{4.2.35}$$

$$g^+ = \frac{1}{3}\frac{-3R_{12}^+ I_1 - 2R_{12}^+ I_2 + 5R_{12}^+ I_3 - 5R_{33}^+ I_4 + 2R_{22}^+ I_4 + 3R_{11}^+ I_4}{3R_{11}^+ + 2R_{22}^+ - 5R_{33}^+} \tag{4.2.36}$$

Os parâmetros I_1, I_2, I_3 e I_4 foram definidos de modo a simplificar a correlação acima para os parâmetros e estão expressos abaixo:

$$I_1 = 2\frac{d}{dy^+}\left[R_{12}^+ v_1^+ + \frac{R_{11}^+ R_{12}^+}{v_1^+}\right] \tag{4.2.37}$$

$$I_2 = 6\frac{d}{dy^+}\left[\frac{R_{12}^+ R_{22}^+}{v_1^+}\right] \tag{4.2.38}$$

$$I_3 = 2\frac{d}{dy^+}\left[\frac{R_{12}^+ R_{33}^+}{v_1^+}\right] \tag{4.2.39}$$

$$I_4 = \frac{d}{dy^+}\left[R_{22}^+ v_1^+ + \frac{R_{11}^+ R_{12}^+ + 2R_{12}^{+2}}{v_1^+}\right] \tag{4.2.40}$$

Os dados de DNS utilizados para obter a relação entre os parâmetros (b_0^{0+}, b_1^{0+}, f^+ e g^+) e a velocidade adimensional v^+ são provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp*, "Turbulence and Heat Transfer Lab. / Frontier Energy System Lab". Deste site, três arquivos de DNS simulando o escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas foram utilizados na determinação dos parâmetros.

A obtenção dos parâmetros foi realizada através do ajuste de polinômios de sexto grau para os parâmetros b_0^{0+}, b_1^{0+} e g^+ e de quarto grau para o parâmetro f^+. Na Tabela 4.2, encontram-se os coeficientes dos polinômios – na forma da equação (4.1.7) – de cada um dos parâmetros e nas Figura 4.9 a Figura 4.12, pode-se ver os parâmetros obtidos pelos dados de DNS e pelo polinômio ajustado.

Deve-se apenas chamar a atenção de que para a determinação dos parâmetros, utilizou-se o valor de $-R_{12}^+$ uma vez que assim é que este aparecia nos arquivos de DNS.

Tabela 4.2 – Valor dos Coeficientes dos Polinômios de cada um dos Parâmetros.

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
b_0^{0+}	-1,7254E-06	8,7793E-05	-1,7107E-03	1,6204E-02	-7,2023E-02	7,7926E-02	-1,3541E-02
b_1^{0+}	1,5613E-06	-8,5018E-05	1,7002E-03	-1,4997E-02	4,8644E-02	1,6048E-02	9,8591E-02
f^+	-	-	7,1647E-06	-2,4442E-04	2,2126E-03	-2,5857E-03	8,8383E-04
g^+	1,2324E-07	-2,8902E-06	-2,3635E+00	9,0389E-04	-5,2055E-03	1,0485E-02	-2,6246E-03

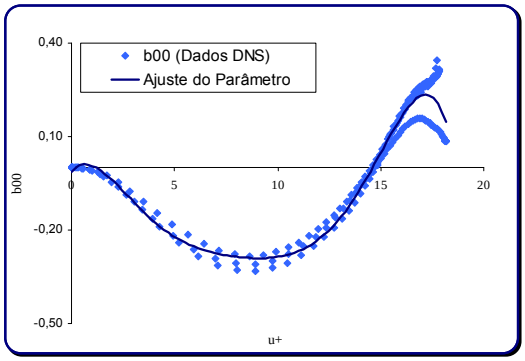


Figura 4.9 – Ajuste do Parâmetro b_0^{0+}.

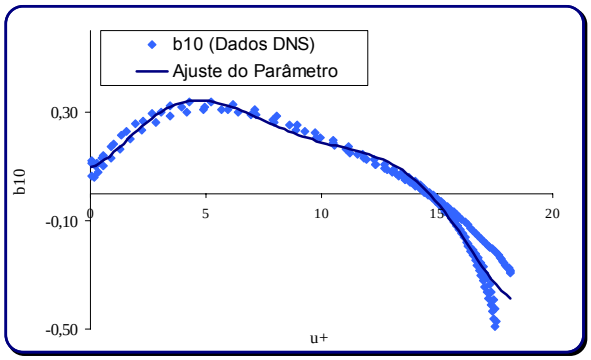


Figura 4.10 – Ajuste do Parâmetro b_1^{0+}.

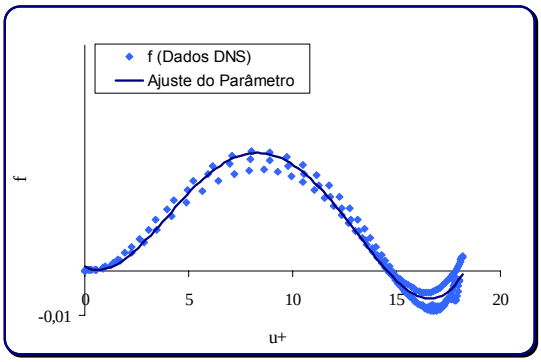


Figura 4.11 – Ajuste do Parâmetro f^+.

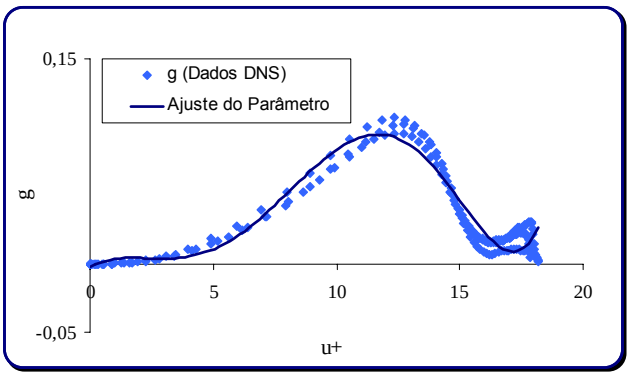


Figura 4.12 – Ajuste do Parâmetro g^+.

Uma vez determinados os parâmetros, a próxima etapa é a validação dos mesmos, através do cálculo dos componentes adimensionais do tensor de Reynolds.

Dessa forma, deseja-se prever os Componentes do tensor de Reynolds provenientes dos arquivos de simulação DNS através dos parâmetros em função do vetor v^+ de cada simulação.

Para isso, numa primeira análise, os parâmetros I_1, I_2, I_3 e I_4 foram considerados constantes, uma vez que é razoável assumir que escoamentos similares apresentem valores similares para estas derivadas complexas. Assim, os componentes adimensionais do tensor de Reynolds foram calculados através das equações (4.2.41) a (4.2.44) obtidas a partir do sistema formado pelas equações (4.2.29) a (4.2.32), porém agora assumindo os parâmetros como conhecidos, uma vez que só dependem da velocidade adimensional e colocando $R_{11}^+, R_{12}^+, R_{22}^+$ e R_{33}^+ como incógnitas.

$$R_{11}^+ = -\frac{b_0^{0+} + 2f^+ - I_1}{b_1^{0+}} \tag{4.2.41}$$

$$R_{12}^+ = -\frac{3g^+ - I_4}{b_1^{0+}} \tag{4.2.42}$$

$$R_{22}^+ = -\frac{b_0^{0+} + 12f^+ - I_2)}{b_1^{0+}} \tag{4.2.43}$$

$$R_{33}^{+} = -\frac{b_0^{0+} + 6f^{+} - I_3}{b_1^{0+}} \tag{4.2.44}$$

Dessa forma, para validar as correlações obtidas para os parâmetros, confrontaram-se os componentes do tensor de Reynolds calculados através dos parâmetros (expressos em função da velocidade adimensional v^{+} através de um polinômio com os coeficientes apresentados na Tabela 4.2) com os Componentes do tensor de Reynolds provenientes de simulações em DNS.

Para esta validação, foram utilizados cinco arquivos em DNS simulando escoamento plenamente desenvolvido em placas planas paralelas provenientes do site já citado (nenhum destes arquivos foi utilizado para a obtenção das correlações) e mais sete arquivos provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html*, "Kawamura Lab DNS Database of Turbulent Heat Transfer".

Novamente, deve-se ressaltar que foram recalculados os valores de $-R_{12}^{+}$, uma vez que estes foram os valores utilizados na determinação dos parâmetros.

De todos os arquivos testados, um resultado representativo, escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas com número de Reynolds, Re = 5731, encontra-se da Figura 4.13 a Figura 4.16. Estas figuras mostram respectivamente os componentes adimensionais R_{11}^{+}, R_{12}^{+}, R_{22}^{+} e R_{33}^{+} do tensor de Reynolds calculados através dos parâmetros confrontados com aqueles provenientes dos dados de DNS.

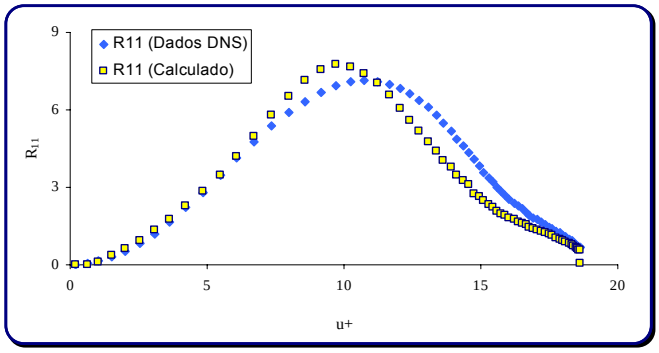


Figura 4.13 – Componente R_{11}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Ret=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, em 18/02/06

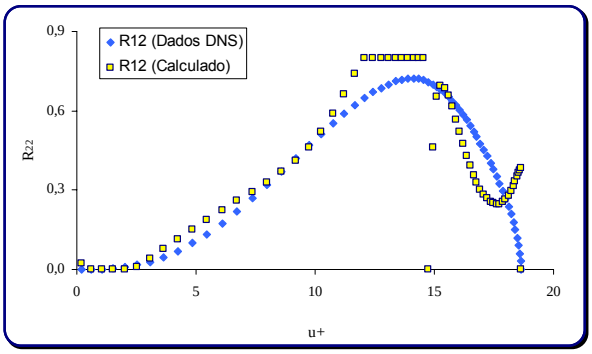


Figura 4.14 – Componente -R_{12}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

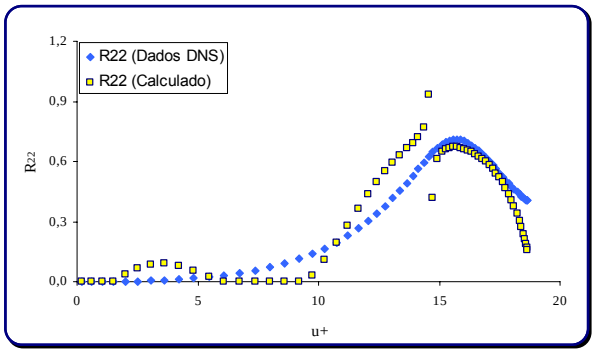


Figura 4.15 – Componente R_{22}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

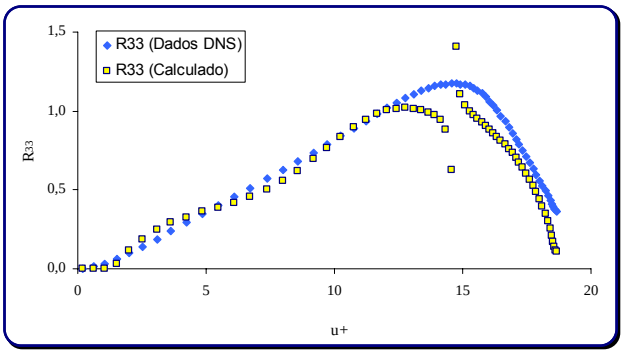


Figura 4.16 – Componente R_{33}^{+} calculado após modelagem dos parâmetros e correção das equações utilizadas em Klein (2006). Dados de DNS de escoamento com Re=5731 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

O resultado do teste com os demais arquivos de DNS encontra-se no Anexo 1.

Conforme se pode observar, a correção das equações originais do artigo de Alfradique e Telles não produziu nenhuma modificação significativa. Houve algumas modificações quantitativas, porém, qualitativamente, o resultado é o mesmo. O

parâmetro b_1^{0+} permanece cruzando o eixo da velocidade adimensional e estando no denominador das equações (4.2.41) a (4.2.44), gera o comportamento hiperbólico quando v^+ é aproximadamente 14,6.

Por esse motivo, para efeito de redução dos erros relativos de previsão, optou-se por impor limites superiores e inferiores para os valores de cada componente do tensor de Reynolds, conforme pôde-se notar nas Figura 4.13 a Figura 4.16. Estes limites foram determinados de forma arbitrária, apenas observando as ordens de grandeza dos respectivos componentes do tensor de Reynolds provenientes dos arquivos de DNS utilizados para determinação dos parâmetros.

Deve-se ainda citar que, a nível de experiência, determinou-se os parâmetros utilizando o verdadeiro valor de R_{12}^+ (não seu oposto) e recalculou-se os componentes do tensor de Reynolds para avaliar o desempenho: o resultado foi o mesmo apresentado acima, porém com sinais trocados para alguns dos parâmetros e recálculo do componente R_{12}^+ com seus valores originais negativos.

Dessa forma, o problema na determinação dos parâmetros permaneceu.

4.3 Abordagem Integral

O primeiro passo para resolver o problema encontrado na determinação inicial dos parâmetros foi mudar a forma de interpretar o sistema de equações.

A abordagem até então utilizada, redefinindo os parâmetros originais do modelo, d_0^0 e d_1^0, por f e g e assumindo os parâmetros l_1, l_2, l_3 e l_4 constantes, poderia ser a fonte do erro, uma vez que colocava apenas o parâmetro b_1^{0+} multiplicando os componentes adimensionais do tensor de Reynolds.

Assim, o sistema composto pelas equações (4.2.15) a (4.2.18) torna-se:

$$b_0^0 + b_1^0 R_{11} + 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{d_1^0 R_{12}}{v_1}\right] = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1}\right] \tag{4.3.1}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{22} + 12\frac{d}{dx_2}\left[\frac{d_1^0 R_{12}}{v_1}\right] = 6\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{22}}{v_1}\right] \tag{4.3.2}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{33} + 6\frac{d}{dx_2}\left[\frac{d_1^0 R_{12}}{v_1}\right] = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{33}}{v_1}\right] \tag{4.3.3}$$

$$b_1^0 R_{12} + 3\frac{d}{dx_2}\left[\frac{d_0^0 + d_1^0(R_{11}+R_{22})}{2v_1}\right] = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + \frac{R_{11}R_{12} + 2R_{12}^2}{v_1}\right] \tag{4.3.4}$$

Integrando ambos os lados das equações acima de uma posição genérica $x_2 = x_0$ a outra posição $x_2 = x_1$, sendo $(x_0 - x_1)$ um valor bem pequeno, o sistema, que estava inicialmente escrito em forma diferencial, passa a ser escrito na forma integral, conforme abaixo:

$$\int_{x_0}^{x_1}(b_0^0 + b_1^0 R_{11})dx_2 + 2\left[\frac{d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)}{v_1(x_0)}\right] = 2[R_{12}(x_1)v_1(x_1) - R_{12}(x_0)v_1(x_0)] + 2\left[\frac{R_{11}(x_1)R_{12}(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{R_{11}(x_0)R_{12}(x_0)}{v_1(x_0)}\right] \tag{4.3.5}$$

$$\int_{x_0}^{x_1}(b_0^0 + b_1^0 R_{22})dx_2 + 12\left[\frac{d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)}{v_1(x_0)}\right] = 6\left[\frac{R_{12}(x_1)R_{22}(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{R_{12}(x_0)R_{22}(x_0)}{v_1(x_0)}\right] \tag{4.3.6}$$

$$\int_{x_0}^{x_1}(b_0^0 + b_1^0 R_{33})dx_2 + 6\left[\frac{d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)}{v_1(x_0)}\right] = 2\left[\frac{R_{12}(x_1)R_{33}(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{R_{12}(x_0)R_{33}(x_0)}{v_1(x_0)}\right] \tag{4.3.7}$$

$$\int_{x_0}^{x_1}(b_1^0 R_{12})dx_2 + 3\left\{\frac{d_0^0(x_1) + d_1^0(x_1)[R_{11}(x_1) + R_{22}(x_1)]}{v_1(x_1)} - \frac{d_0^0(x_0) + d_1^0(x_0)[R_{11}(x_0) + R_{22}(x_0)]}{v_1(x_0)}\right\} = [R_{22}(x_1)v_1(x_1) - R_{22}(x_0)v_1(x_0)] + \left[\frac{R_{11}(x_1)R_{22}(x_1) + 2R_{12}^2(x_1)}{v_1(x_1)} - \frac{R_{11}(x_0)R_{22}(x_0) + 2R_{12}^2(x_0)}{v_1(x_0)}\right] \tag{4.3.8}$$

Como a velocidade pode assumir valor igual a zero, por exemplo, na parede, é interessante que a velocidade não esteja no denominador. Por esse motivo, as equações acima podem ser reescritas como abaixo:

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\int_{x_0}^{x_1}(b_0^0+b_1^0R_{11})dx_2+2\left[d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]= \tag{4.3.9}$$
$$2\left[R_{12}(x_1)v_1^2(x_1)v_1(x_0)-R_{12}(x_0)v_1(x_1)v_1^2(x_0)\right]+2\left[R_{11}(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-R_{11}(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]$$

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\int_{x_0}^{x_1}(b_0^0+b_1^0R_{22})dx_2+12\left[d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]= \tag{4.3.10}$$
$$6\left[R_{12}(x_1)R_{22}(x_1)v_1(x_0)-R_{12}(x_0)R_{22}(x_0)v_1(x_1)\right]$$

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\int_{x_0}^{x_1}(b_0^0+b_1^0R_{33})dx_2+6\left[d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]= \tag{4.3.11}$$
$$2\left[R_{12}(x_1)R_{33}(x_1)v_1(x_0)-R_{12}(x_0)R_{33}(x_0)v_1(x_1)\right]$$

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\int_{x_0}^{x_1}(b_1^0R_{12})dx_2+3\left\{v_1(x_0)\left[d_0^0(x_1)+d_1^0(x_1)(R_{11}(x_1)+R_{22}(x_1))\right]-v_1(x_1)\left[d_0^0(x_0)+d_1^0(x_0)(R_{11}(x_0)+R_{22}(x_0))\right]\right\}= \tag{4.3.12}$$
$$\left[R_{22}(x_1)v_1^2(x_1)v_1(x_0)-R_{22}(x_0)v_1(x_1)v_1^2(x_0)\right]+\left\{v_1(x_0)\left[R_{11}(x_1)R_{22}(x_1)+2R_{12}^2(x_1)\right]-v_1(x_1)\left[R_{11}(x_0)R_{22}(x_0)+2R_{12}^2(x_0)\right]\right\}$$

A princípio, a integração numérica pode ser realizada pela fórmula do trapézio de tal modo que:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx=\frac{f(x_{k+1})+f(x_k)}{2}(x_{k+1}-x_k)$$

Dessa forma, as equações (4.3.9) a (4.3.12) se tornam:

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\left\{\frac{\left[b_0^0+b_1^0R_{11}\right](x_1)+\left[b_0^0+b_1^0R_{11}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)\right\}+2\left[d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]= \tag{4.3.13}$$
$$2\left[R_{12}(x_1)v_1^2(x_1)v_1(x_0)-R_{12}(x_0)v_1(x_1)v_1^2(x_0)\right]+2\left[R_{11}(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-R_{11}(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]$$

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\left\{\frac{\left[b_0^0+b_1^0R_{22}\right](x_1)+\left[b_0^0+b_1^0R_{22}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)\right\}+12\left[d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]= \tag{4.3.14}$$
$$6\left[R_{12}(x_1)R_{22}(x_1)v_1(x_0)-R_{12}(x_0)R_{22}(x_0)v_1(x_1)\right]$$

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\left\{\frac{\left[b_0^0+b_1^0R_{33}\right](x_1)+\left[b_0^0+b_1^0R_{33}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)\right\}+6\left[d_1^0(x_1)R_{12}(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)\right]= \tag{4.3.15}$$
$$2\left[R_{12}(x_1)R_{33}(x_1)v_1(x_0)-R_{12}(x_0)R_{33}(x_0)v_1(x_1)\right]$$

$$v_1(x_1)v_1(x_0)\left\{\frac{\left[b_1^0R_{12}\right](x_1)+\left[b_1^0R_{12}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)\right\}+ \tag{4.3.16}$$
$$3\left\{v_1(x_0)\left[d_0^0(x_1)+d_1^0(x_1)(R_{11}(x_1)+R_{22}(x_1))\right]-v_1(x_1)\left[d_0^0(x_0)+d_1^0(x_0)(R_{11}(x_0)+R_{22}(x_0))\right]\right\}=$$
$$\left[R_{22}(x_1)v_1^2(x_1)v_1(x_0)-R_{22}(x_0)v_1(x_1)v_1^2(x_0)\right]+\left\{v_1(x_0)\left[R_{11}(x_1)R_{22}(x_1)+2R_{12}^2(x_1)\right]-v_1(x_1)\left[R_{11}(x_0)R_{22}(x_0)+2R_{12}^2(x_0)\right]\right\}$$

Deve-se ressaltar que nas equações acima, (x_0) e (x_1) indicam o valor da "função" que os precede na posição x_0 e x_1 respectivamente.

4.3.1 Método de Estimação dos Parâmetros

Para a estimação dos parâmetros foi utilizado o Pacote de Estimação de Parâmetros MAXIMA, desenvolvido pelo PEQ/COPPE, em linguagem Fortran, versão 6.6. Neste pacote, pode-se optar por fazer a estimação dos parâmetros pelo método dos mínimos quadrados, pelo método dos mínimos quadrados ponderados ou pelo método da máxima verossimilhança. O que diferencia o emprego destes três métodos é a matriz de covariâncias. Para o método dos mínimos quadrados, esta matriz seria a própria matriz identidade; para o método dos mínimos quadrados ponderados, a matriz de covariâncias seria uma matriz diagonal contendo a variância de cada medida; e no método da máxima verossimilhança, a matriz de covariâncias seria uma matriz completa, contendo a variância de cada medida na diagonal e a correlação entre cada duas medidas nas demais posições.

Como os "dados experimentais" utilizados neste trabalho para a determinação dos parâmetros são os dados provenientes de bancos de dados de DNS, não há porque acreditar que as variâncias de cada "medida" (componentes do tensor e velocidade) são diferentes entre si e nem que há correlação entre os "erros de medição" de cada variável, caracterizando uma matriz de covariâncias igual à matriz identidade. Desta forma, optou-se por utilizar o método dos mínimos quadrados.

Outras condições para que se utilize o método dos mínimos quadrados são: o experimento atender às hipóteses de Modelo Perfeito e Experimento Bem feito. A Hipótese do Modelo Perfeito, é por princípio impossível de ser 100% atendida, uma vez que não é possível se ter total controle sobre nenhum experimento, porém, acreditando-se que a estrutura do modelo matemático utilizado para representar os dados experimentais é muito boa, qualquer desvio entre o dado experimental e o dado

calculado pelo modelo seria devido às incertezas experimentais. A Hipótese do Experimento bem feito é atendida quando se pode afirmar que os erros das medidas são aleatórios e simétricos, espelhando um bom procedimento experimental que implica na média destes erros ser zero. Quando ambas hipóteses são atendidas, espera-se que o erro experimental não apresente qualquer tendência ou polarização, flutuando em torno do zero.

Pode-se dizer então que não há nenhuma questão que impeça ou condene o uso do método dos mínimos quadrados para obter os parâmetros do modelo de turbulência, utilizando como "dados experimentais" os arquivos de DNS.

4.3.2 Estimação dos Parâmetros

Neste pacote de estimação de parâmetros, devem ser fornecidos num arquivo de leitura um vetor com as variáveis independentes (neste caso, v^+), um vetor com as variáveis dependentes (valores dos componentes do tensor de Reynolds) e um vetor que corresponde aos "parâmetros do modelo" (os coeficientes do modelo matemático – um polinômio, por exemplo – para cada um dos parâmetros do modelo de turbulência). As equações do modelo também devem ser fornecidas, porém num outro arquivo.

Observando-se as equações (4.3.13), (4.3.14) e (4.3.15), repara-se que a primeira é uma função apenas de R_{11} e R_{12}, a segunda, uma função de R_{22} e R_{12} e a terceira, uma função de R_{12} e R_{33}. A equação (4.3.16) é uma função de R_{11}, R_{22} e R_{12}.

Dessa forma, para resolver o sistema de equações formado pelas equações (4.3.13) a (4.3.16) pode-se explicitar R_{11} em função de R_{12} pela equação (4.3.13), gerando a equação (4.3.17) e R_{22} em função de R_{12} pela (4.3.14), gerando a equação (4.3.19); substituir estas expressões na equação (4.3.21) proveniente da (4.3.16) e

aplicar um método de convergência para uma única equação não linear cuja variável a ser encontrada é R_{12}. Atingida a convergência, calcula-se R_{11}, R_{22} e R_{33}.

Inicialmente, o modelo matemático proposto para ajustar os parâmetros foi o de um polinômio de sexto grau de modo a dar bastante flexibilidade ao ajuste dos parâmetros, visando posteriormente, conhecendo a "cara" da curva, propor modelos mais enxutos e adequados.

Matematicamente, as equações ficaram estruturadas da seguinte forma: dado o valor estimado para os coeficientes do polinômio, estimava-se um valor inicial para R_{12} na posição x_1. Com isso, calculava-se R_{11} e R_{22} em função de R_{12} conforme equações (4.3.18) e (4.3.20), respectivamente. Estes valores eram substituídos na equação (4.3.21). O método de convergência teria alcançado a raiz quando F, da equação (4.3.21), fosse menor que a tolerância estipulada. Alcançada a convergência, calculava-se R_{33} pela equação (4.3.23).

$$R_{11}(x_1)\left[\underbrace{v_1(x_1)v_1(x_0)\frac{b_1^0(x_1)}{2}(x_1-x_0)}_{\alpha_{11}}-R_{12}(x_1)\underbrace{2v_1(x_0)}_{\alpha_{12}}\right]=R_{12}(x_1)\underbrace{2\left[v_1^2(x_1)v_1(x_0)-d_1^0(x_1)v_1(x_0)\right]}_{\alpha_{13}}$$
$$\underbrace{+2d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)-v_1(x_1)v_1(x_0)\frac{\left[b_0^0+b_1^0R_{11}\right](x_0)+b_0^0(x_1)}{2}(x_1-x_0)-2R_{12}(x_0)v_1(x_1)v_1^2(x_0)-2R_{11}(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)}_{\alpha_{14}} \tag{4.3.17}$$

$$R_{11}(x_1)=\frac{\alpha_{13}R_{12}(x_1)+\alpha_{14}}{\alpha_{11}-\alpha_{12}R_{12}(x_1)} \tag{4.3.18}$$

$$R_{22}(x_1)\left[\underbrace{v_1(x_1)v_1(x_0)\frac{b_1^0(x_1)}{2}(x_1-x_0)}_{\alpha_{21}}-R_{12}(x_1)\underbrace{6v_1(x_0)}_{\alpha_{22}}\right]=\underbrace{-12d_1^0(x_1)v_1(x_0)}_{\alpha_{23}}R_{12}(x_1)$$
$$\underbrace{-v_1(x_1)v_1(x_0)\frac{b_0^0(x_1)+\left[b_0^0+b_1^0R_{22}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)+12d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)-6R_{12}(x_0)R_{22}(x_0)v_1(x_1)}_{\alpha_{24}} \tag{4.3.19}$$

$$R_{22}(x_1)=\frac{\alpha_{23}R_{12}(x_1)+\alpha_{24}}{\alpha_{21}-\alpha_{22}R_{12}(x_1)} \tag{4.3.20}$$

$$
\begin{aligned}
F = & -v_1(x_1)v_1(x_0)\left\{\frac{\left[b_1^0 R_{12}\right](x_1)+\left[b_1^0 R_{12}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)\right\}- \\
& -3\left\{v_1(x_0)\left[d_0^0(x_1)+d_1^0(x_1)(R_{11}(x_1)+R_{22}(x_1))\right]-v_1(x_1)\left[d_0^0(x_0)+d_1^0(x_0)(R_{11}(x_0)+R_{22}(x_0))\right]\right\}+ \\
& \left[R_{22}(x_1)v_1^2(x_1)v_1(x_0)-R_{22}(x_0)v_1(x_1)v_1^2(x_0)\right]+\left\{v_1(x_0)\left[R_{11}(x_1)R_{22}(x_1)+2R_{12}^2(x_1)\right]-v_1(x_1)\left[R_{11}(x_0)R_{22}(x_0)+2R_{12}^2(x_0)\right]\right\}
\end{aligned}
\tag{4.3.21}
$$

$$
\begin{aligned}
& R_{33}(x_1)\left[\underbrace{v_1(x_1)v_1(x_0)\frac{b_1^0(x_1)}{2}(x_1-x_0)}_{\alpha_{31}}-R_{12}(x_1)\underbrace{2v_1(x_0)}_{\alpha_{32}}\right]=\underbrace{-6d_1^0(x_1)v_1(x_0)}_{\alpha_{33}}R_{12}(x_1) \\
& \underbrace{-v_1(x_1)v_1(x_0)\frac{b_0^0(x_1)+\left[b_0^0+b_1^0R_{33}\right](x_0)}{2}(x_1-x_0)-2R_{12}(x_0)R_{33}(x_0)v_1(x_1)+6d_1^0(x_0)R_{12}(x_0)v_1(x_1)}_{\alpha_{34}}
\end{aligned}
\tag{4.3.22}
$$

$$
R_{33}(x_1)=\frac{\alpha_{33}R_{12}(x_1)+\alpha_{34}}{\alpha_{31}-\alpha_{32}R_{12}(x_1)} \tag{4.3.23}
$$

Deve-se ressaltar que após a análise dimensional feita da equação (4.2.19) a (4.2.28), pode-se ler todas as equações acima em sua forma adimensional, pois a menos de fatores constantes, são iguais.

4.3.3 Resultado da Estimação dos Parâmetros

A determinação dos parâmetros com o estimador de parâmetros não foi bem sucedida. Isto é, o estimador de parâmetros não conseguiu ao menos passar de uma iteração na busca dos valores dos coeficientes dos polinômios para cada um dos parâmetros do modelo de turbulência.

Para convergência da equação (4.3.21), tentou-se desde o método de Newton Raphson ao método de busca direta, fazendo R_{12} variar com passo de 10^{-4}.

Imprimindo-se os resultados intermediários gerados durante o uso do pacote, percebeu-se que F (equação 4.3.21) para a maioria das posições de x_1 e x_0, simplesmente não atingia valor menor que a tolerância, mas sim, mudava de sinal, não convergindo para nenhum método numérico de busca da raiz desta equação.

Este comportamento é característico de uma função com caráter hiperbólico, pois não há uma raiz e quando F está aproximando do eixo x, repentinamente, passa para o outro quadrante com valor alto, muito longe da tolerância estipulada.

Com isso, observou-se que o sistema formado pelas equações (4.3.1) a (4.3.4) é matematicamente instável, não sendo um bom caminho para a implementação do novo modelo de turbulência.

4.4 Reobtenção dos Parâmetros

Após a observação acima, decidiu-se investigar melhor o sistema compreendido pelas equações (4.2.5) a (4.2.14).

Pode-se perceber que, ao estipular c_1^0 e e iguais a zero, nas abordagens anteriores do sistema de equações, simplesmente se ignorou as equações (4.2.9) e (4.2.10), compondo o sistema das equações (4.2.5) a (4.2.14) com as demais equações restantes.

Porém, deve-se perceber que, da equação (4.2.10), pode-se obter uma relação direta para o parâmetro d_1^0 e, dispondo deste, pela equação (4.2.9), pode-se obter diretamente uma expressão para o parâmetro d_0^0, ambos em função apenas dos próprios componentes do tensor de Reynolds.

Assim, da equação (4.2.10), obtém-se:

$$d_1^0 = \frac{1}{3}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}} \tag{4.4.1}$$

Substituindo o valor de d_1^0 expresso na equação (4.4.1) na equação (4.2.9), obtém-se:

$$d_0^0 = R_{22}^2\left[1 - \frac{4}{3}\frac{R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.4.2}$$

Assim, para a determinação dos dois parâmetros restantes, b_0^0 e b_1^0, tem-se as demais equações do sistema da equação (4.2.5) a (4.2.14), exceto as equações (4.2.9) e (4.2.10).

Entretanto, pode-se observar que, da equação (4.2.6), com c_1^0 e e iguais a zero, pode-se explicitar R_{122}:

$$R_{122} = \frac{1}{2v_1}\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) - 3d_0^0 - 3d_1^0(R_{11}+R_{22})\right] \tag{4.4.3}$$

Substituindo a equação (4.4.3) na equação (4.2.12), tem-se:

$$b_1^0 R_{12} = +\frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1\right] + \frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) - 3d_0^0 - 3d_1^0(R_{11}+R_{22})\right]\right] \tag{4.4.4}$$

Observando a equação (4.4.4), pode-se se perceber que, dispondo dos arquivos de DNS, a única incógnita é o parâmetro b_1^0. Assim, pode-se obter diretamente uma expressão para b_1^0:

$$b_1^0 = \frac{1}{R_{12}}\frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + \frac{1}{v_1}\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) - 3d_0^0 - 3d_1^0(R_{11}+R_{22})\right]\right] \tag{4.4.5}$$

Restam, assim, 6 equações ((4.2.5), (4.2.7), (4.2.8), (4.2.11), (4.2.13) e (4.2.14)) para a determinação do parâmetro b_0^0.

Para a determinação do parâmetro b_0^0, a seguinte manipulação matemática foi feita:

Somando-se as equações (4.2.5), (4.2.7), (4.2.8), obtém-se:

$$(R_{112} + R_{222} + R_{233}) = \frac{R_{12}}{v_1}\left[R_{11} + 3R_{22} + R_{33} - 11d_1^0\right] \tag{4.4.6}$$

Somando-se as equações (4.2.11), (4.2.13) e (4.2.14), obtém-se:

$$3b_0^0 + b_1^0(R_{11} + R_{22} + R_{33}) - 2\frac{d}{dx_2}[R_{12}v_1] = 2\frac{d}{dx_2}[R_{112} + R_{222} + R_{233}] \quad (4.4.7)$$

Substituindo-se a equação (4.4.6) na equação (4.4.7), e dispondo dos arquivos de DNS, novamente, chega-se a uma expressão direta para o parâmetro do modelo, desta vez b_0^0:

$$b_0^0 = \frac{1}{3}\left[2\frac{d}{dx_2}\left(\frac{R_{12}}{v_1}\left(R_{11} + 3R_{22} + R_{33} - 11d_1^0\right)\right) + 2\frac{d}{dx_2}(R_{12}v_1) - b_1^0(R_{11} + R_{22} + R_{33})\right] \quad (4.4.8)$$

4.4.1 Determinação dos Parâmetros

Novamente, é válido relembrar que, após a análise dimensional realizada, compreendida entre as equações (4.2.19) e (4.2.28), os parâmetros adimensionais (b_0^{0+}, b_1^{0+}, d_0^0 e d_1^0) podem ser escritos na forma:

$$b_0^{0+} = \frac{1}{3}\left[2\frac{d}{dx_2}\left(\frac{R_{12}^+}{v_1^+}\left(R_{11}^+ + 3R_{22}^+ + R_{33}^+ - 11d_1^{0+}\right)\right) + 2\frac{d}{dx_2}\left(R_{12}^+v_1^+\right) - b_1^{0+}(R_{11}^+ + R_{22}^+ + R_{33}^+)\right] \quad (4.4.9)$$

$$b_1^{0+} = \frac{1}{R_{12}^+}\frac{d}{dx_2}\left[R_{22}^+v_1^+ + \frac{1}{v_1^+}\left[(R_{11}^+R_{22}^+ + 2R_{12}^{+2}) - 3d_0^{0+} - 3d_1^{0+}(R_{11}^+ + R_{22}^+)\right]\right] \quad (4.4.10)$$

$$d_0^{0+} = R_{22}^{+2}\left[1 - \frac{4}{3}\frac{R_{33}^+}{R_{22}^+ + R_{33}^+}\right] \quad (4.4.11)$$

$$d_1^{0+} = \frac{1}{3}\frac{R_{22}^+R_{33}^+}{R_{22}^+ + R_{33}^+} \quad (4.4.12)$$

Para a determinação dos parâmetros adimensionais (b_0^{0+}, b_1^{0+}, d_0^{0+} e d_1^{0+}) e a velocidade adimensional v^+ foram utilizados quatro arquivos de DNS simulando o escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp*, “Turbulence and Heat Transfer Lab. / Frontier Energy System Lab”.

O resultado segue abaixo:

$$b_0^{0+} = P1 + \frac{P2}{P4\sqrt{\pi/2}} \exp\left[-2\frac{(v_1^+ - P3)^2}{P4^2}\right] \tag{4.4.13}$$

$$b_1^{0+} = \frac{P1 - P2}{1 + \exp[(v_1^+ - P3)/P4]} + P2 \tag{4.4.14}$$

$$d_0^{0+} = P1 + P2\exp\{-\exp[-(v_1^+ - P3)/P4)] - (v_1^+ - P3)/P4) + 1\} \tag{4.4.15}$$

$$d_1^{0+} = P1 + \frac{2P2}{\pi}\frac{P4}{4(v_1^+ - P3)^2 + P4^2} \tag{4.4.16}$$

Conforme se pode observar, todos os quatro parâmetros do modelo foram modelados por funções dependentes de quatro coeficientes P1, P2, P3 e P4. O valor destes parâmetros e o coeficiente de ajuste do modelo, R², seguem abaixo:

Tabela 4.3 – Coeficientes da modelagem dos parâmetros b_0^{0+}, b_1^{0+}, d_0^{0+} e d_1^{0+}.

	P1	P2	P3	P4	R²
b_0^{0+}	-0,13377	12,88555	9,64079	6,59331	0,8928
b_1^{0+}	-0,74939	0,24017	14,06607	1,36749	0,96593
d_0^{0+}	0,00009	0,09832	15,59867	1,68311	0,82962
d_1^{0+}	-0,00687	1,51748	14,82399	6,44291	0,94456

A visualização gráfica do ajuste dos parâmetros segue abaixo:

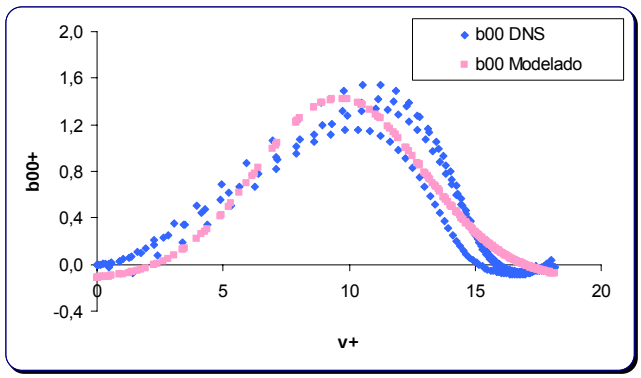


Figura 4.17 – Ajuste do Parâmetro b_0^{0+}.

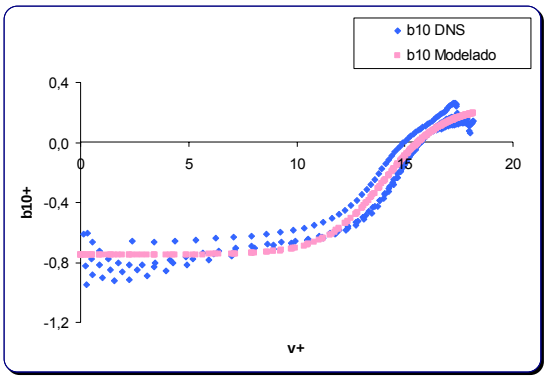


Figura 4.18 – Ajuste do Parâmetro b_1^{0+}.

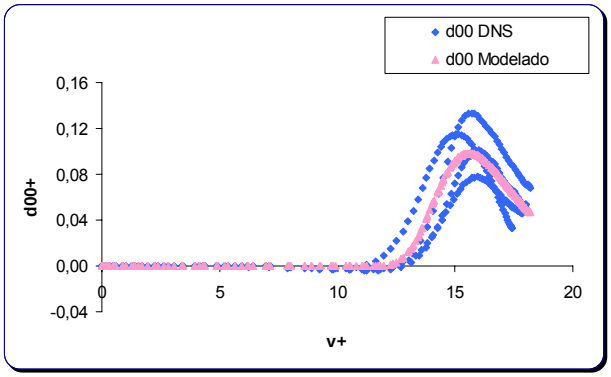


Figura 4.19 – Ajuste do Parâmetro d_0^{0+}.

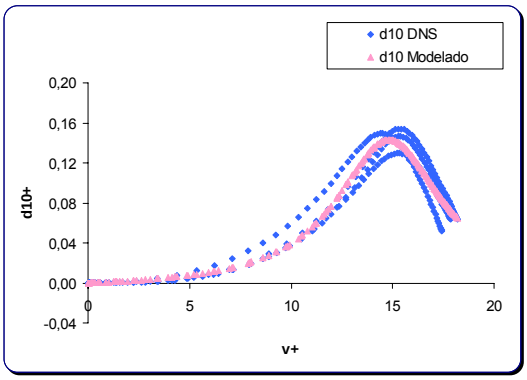


Figura 4.20 – Ajuste do Parâmetro d_1^{0+}.

Pode-se destacar como vantagens deste ajuste de parâmetros o fato de não serem polinômios, mas sim, funções assintóticas cujos valores não extrapolam fora da faixa apresentada para v^+.

Nota-se também que o ajuste dos parâmetros b_0^{0+}, b_1^{0+} e d_1^{0+} está bastante razoável, mas que não se pode dizer a mesmo para o ajuste do parâmetro d_0^{0+}.

Neste momento, são possíveis dois caminhos: utilizar uma modelagem para os parâmetros d_0^{0+} e d_1^{0+}, tornando-os funções explícitas da velocidade adimensional, v^+, ou substituir suas expressões "analíticas", que são funções explícitas de R_{22}^+ e R_{33}^+, nas demais equações do sistema.

A segunda opção sugere uma diminuição nos erros e por isso será adotada.

4.4.2 Validação dos Parâmetros

A validação dos parâmetros encontrados consiste em calcular os componentes do tensor de Reynolds, uma vez conhecidos os parâmetros em função da velocidade adimensional, v^+.

Para calcular os componentes do tensor de Reynolds, deve-se então reorganizar o sistema de equações formado pelas equações (4.2.5) a (4.2.14).

Deve-se perceber que substituindo o valor de d_1^{0+} na equação (4.2.10), ambos os lados serão iguais a zero e então, esta equação "sai" do sistema. O mesmo ocorre, substituindo o valor de d_0^{0+} e d_1^{0+} na equação (4.2.9). Assim, novamente, o sistema será formado pelas (4.3.1) a (4.3.4), porém substituindo os valores explícitos de d_0^{0+} e d_1^{0+} conforme equações (4.4.2) e (4.4.1) respectivamente.

O novo sistema assume a forma:

$$\underbrace{\frac{R_{12}}{v_1}}_{A11}\frac{dR_{11}}{dx_2}+\underbrace{\left[-\frac{2}{3}\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{33}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A12}\frac{dR_{22}}{dx_2}+\underbrace{\left[-\frac{2}{3}\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A13}\frac{dR_{33}}{dx_2}+$$

$$\underbrace{\left[v_1+\frac{R_{11}}{v_1}-\frac{2}{3}\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{1}{v_1}\right]}_{A14}\frac{dR_{12}}{dx_2}=\underbrace{\frac{b_0^0}{2}+\frac{b_1^0}{2}R_{11}-\frac{dv_1}{dx_2}R_{12}+\frac{1}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}R_{11}R_{12}-\frac{2}{3}\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{R_{12}}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}}_{B1} \tag{4.4.17}$$

$$\underbrace{\left[3\frac{R_{12}}{v_1}-2\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{33}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A22}\frac{dR_{22}}{dx_2}+\underbrace{\left[-2\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A23}\frac{dR_{33}}{dx_2}+\underbrace{\left[\frac{R_{22}}{v_1}-2\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{1}{v_1}\right]}_{A24}\frac{dR_{12}}{dx_2}=$$

$$\underbrace{\frac{b_0^0}{2}+\frac{b_1^0}{2}R_{22}+\frac{3}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}R_{12}R_{22}-2\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{R_{12}}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}}_{B2} \tag{4.4.18}$$

$$\underbrace{\left[-\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{33}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A32}\frac{dR_{22}}{dx_2}+\underbrace{\left[\frac{R_{12}}{v_1}-\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A33}\frac{dR_{33}}{dx_2}+\underbrace{\left[\frac{R_{33}}{v_1}-\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{1}{v_1}\right]}_{A34}\frac{dR_{12}}{dx_2}=$$

$$\underbrace{\frac{b_0^0}{2}+\frac{b_1^0}{2}R_{33}+\frac{1}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}R_{12}R_{33}-\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{R_{12}}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}}_{B3} \tag{4.4.19}$$

$$\underbrace{\left[\frac{R_{22}}{v_1}-\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{1}{v_1}\right]}_{A41}\frac{dR_{11}}{dx_2}+\underbrace{\left[\begin{array}{l}v_1+\frac{R_{11}}{v_1}-2\frac{R_{22}}{v_1}\frac{(3R_{22}-R_{33})}{(R_{22}+R_{33})}-4\frac{R_{33}}{v_1}\frac{R_{22}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}-\\ \frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{1}{v_1}-\frac{(R_{11}+R_{22})}{v_1}\frac{R_{33}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\end{array}\right]}_{A42}\frac{dR_{22}}{dx_2}+$$

$$\underbrace{\left[\frac{4}{v_1}\frac{R_{22}^3}{(R_{22}+R_{33})^2}-\frac{(R_{11}+R_{22})}{v_1}\frac{R_{22}^2}{(R_{22}+R_{33})^2}\right]}_{A43}\frac{dR_{33}}{dx_2}+\underbrace{\left[4\frac{R_{12}}{v_1}\right]}_{A44}\frac{dR_{12}}{dx_2}= \tag{4.4.20}$$

$$\underbrace{b_1^0R_{12}-\frac{dv_1}{dx_2}R_{22}+\frac{1}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}R_{11}R_{22}-+\frac{1}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}R_{12}^2-\frac{R_{22}^2}{v_1^2}\frac{(3R_{22}-R_{33})}{(R_{22}+R_{33})}\frac{dv_1}{dx_2}-\frac{R_{22}R_{33}}{(R_{22}+R_{33})}\frac{1}{v_1^2}\frac{dv_1}{dx_2}(R_{11}+R_{22})}_{B4}$$

Conforme se pode observar, o novo sistema a ser resolvido é um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias Não Lineares com Coeficientes Variáveis. Para resolver este sistema, utilizou-se o programa Matlab 6.5 da Mathworks.

Para implementação deste sistema no Matlab, é preciso fornecer ao programa um vetor cujas posições são as derivadas. Isso justifica a forma com a qual as equações (4.4.17) a (4.4.20) foram escritas. Os termos “Aij” formarão uma matriz A e os termos

“Bi” formarão um vetor que juntos, formarão um sistema de equações “lineares” onde as incógnitas são as derivadas. O esquema segue abaixo:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} A11 & A12 & A13 & A14 \\ 0 & A22 & A23 & A24 \\ 0 & A32 & A33 & A34 \\ A41 & A42 & A43 & A44 \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{A}}} \begin{bmatrix} \frac{dR_{11}}{dx_2} \\ \frac{dR_{22}}{dx_2} \\ \frac{dR_{33}}{dx_2} \\ \frac{dR_{12}}{dx_2} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} B1 \\ B2 \\ B3 \\ B4 \end{bmatrix}}_{\underline{B}} \tag{4.4.21}$$

Ao implementar uma rotina no Matlab para resolver este sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares de coeficientes variáveis, o programa não convergiu. “Recados” como “matriz pode ser singular” e “incapaz de atender às tolerâncias de integração” foram freqüentes durante as tentativas de convergência do Matlab.

De modo a tentar investigar o problema, resolveu-se comparar os valores das derivadas $\frac{dR_{11}}{dx_2}$, $\frac{dR_{22}}{dx_2}$, $\frac{dR_{33}}{dx_2}$ e $\frac{dR_{12}}{dx_2}$ quando calculadas diretamente dos arquivos de DNS e através da solução do Sistema (4.4.21), supondo conhecidos todos os integrantes dos componentes “Aij” e “Bi” da matriz A e do Vetor B, respectivamente. Estes dados são conhecidos para cada arquivo de DNS. Este teste foi realizado apenas para um arquivo de DNS, arquivo este utilizado na determinação dos parâmetros. O valor dos parâmetros utilizados foi o próprio valor utilizado para gerar a modelagem dos parâmetros. A idéia de utilizar um arquivo utilizado na determinação dos parâmetros e utilizar ainda o valor destes parâmetros igual ao gerado pelo próprio arquivo de DNS é buscar uma identidade. O teste foi realizado tanto em Matlab quanto em Excel, da Microsoft.

O resultado do teste segue abaixo:

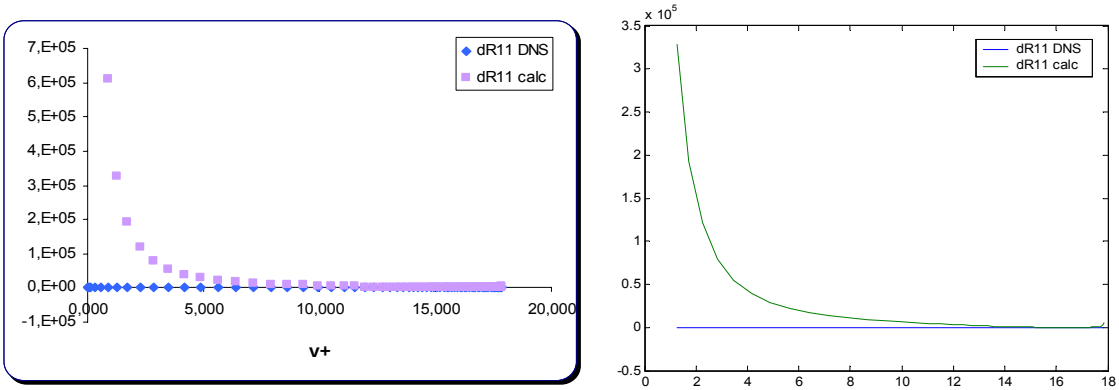


Figura 4.21 – Comparação de $\frac{dR_{11}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e pelo Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

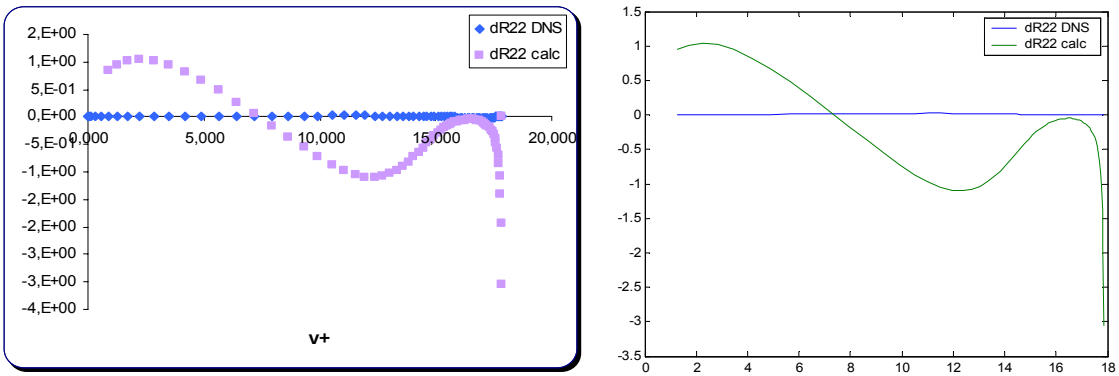


Figura 4.22 – Comparação de $\frac{dR_{22}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e pelo Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

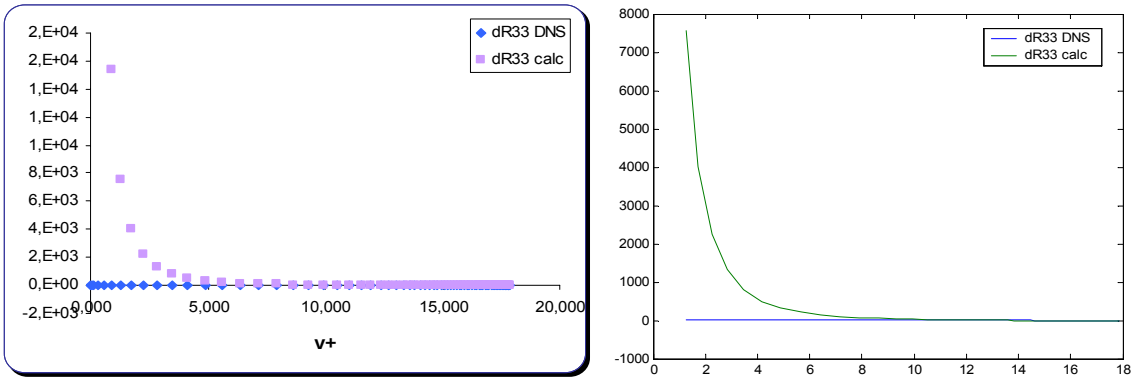


Figura 4.23 – Comparação de $\frac{dR_{33}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e pelo Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

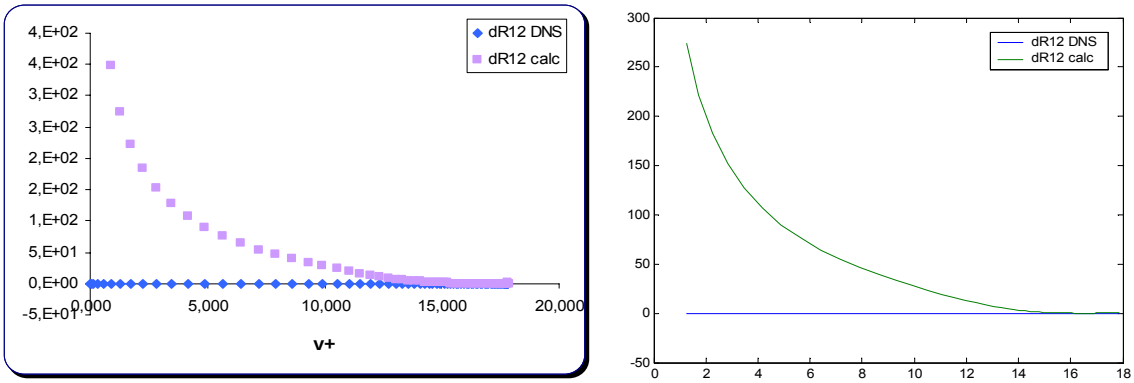


Figura 4.24 – Comparação de $\frac{dR_{12}}{dx_2}$ pelo arquivo em DNS e Sistema (4.4.21) no Excel (esquerda) e no Matlab (direita). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

Conforme se pode notar, não há absolutamente correlação entre as derivadas esperadas (valores provenientes do arquivo em DNS) e as derivadas calculadas pelo Sistema (4.4.21). Pode-se notar ainda que os resultados obtidos pelo Excel comprovam os resultados obtidos no Matlab. Este teste foi feito em dois programas paralelos de modo a se tentar identificar qualquer problema referente ao uso do Matlab.

Com este teste, deve-se concluir que o ajuste dos parâmetros não está bom, não tornando possível a "inversão" do sistema e recálculo dos componentes do tensor de Reynolds.

Com mais esta abordagem do sistema formado pelas equações (4.2.5) e (4.2.14), pode-se inferir que a arbitrariedade (por motivos de conveniência matemática) de escolher c_1^0 e e iguais a zero não obteve êxito.

Apenas a título de comprovação desta inferência, foi utilizado o único arquivo de DNS encontrado que apresentava os valores dos momentos triplos para um escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas, proveniente do site *http://cfd.me.umist.ac.uk/ercoftac/database/cases/case32/Case_data/*.

Através das equações (4.4.3) e (4.4.6) é possível comparar o valor estimado para R_{122} e para $R_{112}+R_{222}+R_{233}$ quando se coloca c_1^0 e e iguais a zero. Neste arquivo de DNS aparecem exatamente estes quatro momentos triplos e é comentado que os demais não são relevantes. Isto é um bom indicativo da aplicação deste novo modelo de turbulência.

O resultado da comparação dos momentos triplos segue abaixo:

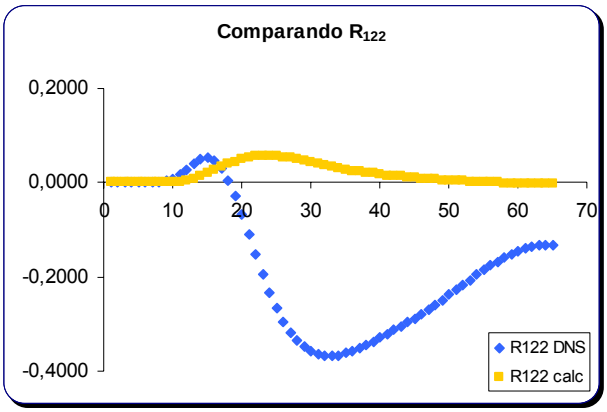


Figura 4.25 – Comparando R_{122} pelo arquivo de DNS e pela equação (4.4.3). Dados de DNS provenientes do site http://cfd.me.umist.ac.uk/ercoftac/database/cases/case32/Case_data/, *em 26/03/07*

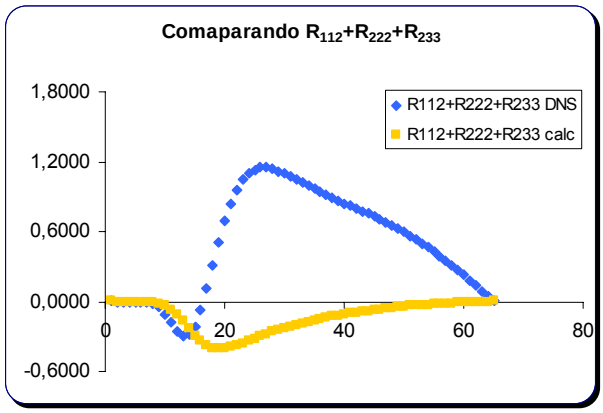


Figura 4.26 – Comparando $R_{112}+R_{222}+R_{233}$ pelo aqueu de DNS e pela equação (4.4.6). Dados de DNS provenientes do site http://cfd.me.umist.ac.uk/ercoftac/database/cases/case32/Case_data/, *em 26/03/07*

Conforme se pode notar, a comparação dos momentos triplos, tanto em termos de valores como de "forma", indica que c_1^0 e e não devem ser iguais a zero. Esta escolha implica em erros nos momentos triplos, além de não proporcionar um sistema

inversível que viabilize a implantação do novo modelo de turbulência proposto por Alfradique e Telles (2006).

4.5 Correlações Não Lineares

Uma vez tendo se concluído que não se deve colocar c_1^0 e e iguais a zero, deve-se novamente observar o sistema de equações formado pelas equações (4.2.5) e (4.2.14).

O principal objetivo em ter se colocado c_1^0 e e iguais a zero não era a facilidade matemática para a manipulação das equações, mas sim a oportunidade de se isolar os momentos triplos nas equações (4.2.5), (4.2.6), (4.2.7) e (4.2.8) e substituí-los nas equações (4.2.11), (4.2.12), (4.2.13) e (4.2.14), respectivamente, de modo que os momentos triplos simplesmente não participassem do sistema de equações.

Para a determinação dos parâmetros, a presença dos momentos triplos não traria muitos inconvenientes, apenas o de só se poder utilizar um arquivo de DNS para a modelagem dos mesmos, uma vez que só foi encontrado um arquivo de DNS apresentando os momentos triplos para um escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas. Porém, uma vez determinados os parâmetros, estes passariam a ser considerados conhecidos e ter-se-ia seis equações (a "junção" das equações (4.2.5) com (4.2.11), (4.2.6) com, (4.2.7) com (4.2.13), (4.2.8) com (4.2.14), equação (4.2.9) e equação (4.2.10)) e oito incógnitas (R_{11}, R_{12}, R_{22}, R_{33}, R_{112}, R_{122}, R_{222} e R_{233}), ou seja, um sistema indeterminado para a etapa de implementação do novo modelo de turbulência.

Dessa forma, a solução encontrada para este problema é a proposta de novas correlações para o termo S_{ijk}, cuja correlação na forma linear dá origem aos parâmetros c_1^0 e e. Uma vez que se irá modificar a proposta linear nos parâmetros para o termo $S_{ijk,}$

pode-se ainda propor novas correlações para S_{ij}. Não parece atrativo propor correlações não lineares para o termo R_{ijkp}, uma vez que sua expressão será inserida dentro de uma derivada, dificultando mais ainda a manipulação algébrica do sistema.

4.5.1 Primeiro Nível do Fechamento

Uma vez que as correlações para os termos turbulentos serão modificadas, deve-se tentar começar modificando as correlações para o primeiro nível do fechamento já que neste, os momentos triplos simplesmente não aparecem.

Em Klein (2006) foi demonstrado que para a correlação linear nos parâmetros, chegava-se à conclusão que $R_{22} = R_{33}$, o que é comprovadamente incorreto.

Chegava-se a esta conclusão porque na equação (3.1.20), o termo $\frac{\partial}{\partial x_p}[R_{jp}v_i + R_{ip}v_j + 2R_{ij}v_p]$ será sempre zero para as "posições" $i = 2$ e $j = 2$ ou $i = 3$ e $j = 3$, uma vez que $v_2 = v_3 = 0$ para o cenário estudado. Como o termo restante no lado esquerdo, $\frac{\partial R_{ijp}}{\partial x_p}$ também zerava, pois observando a correlação linear proposta para R_{ijp} na equação (4.2.1), este termo também zera para $i = 2$ e $j = 2$ ou $i = 3$ e $j = 3$, restava $S_{22} = S_{33} = 0$. A correlação linear proposta para este termo, S_{ij}, representada na equação (4.2.2), é simétrica para "ij", resultando em $R_{22} = R_{33}$.

Dessa forma, deve-se propor uma modificação para as correlações R_{ijp} e/ou S_{ij} de modo que se consiga fazer $R_{22} \neq R_{33}$.

Observando a equação (3.5.1), nota-se que todos os termos estão multiplicados por v_i, v_j e v_p de modo que para $i = 2$ e $j = 2$ ou $i = 3$ e $j = 3$, este termo sempre será zero. Assim, não há modificação a se propor para a correlação de R_{ijp}, respeitando a equação proposta no artigo de Alfradique e Telles. Observando-se a expressão para S_{ij},

na equação (3.5.2), observa-se que os únicos parâmetros cujos "argumentos posteriores" não serão nulos (pois os demais apresentam as velocidades v_i, v_j e v_p), são b_0^0, b_1^0 (já utilizados até agora na forma linear dos parâmetros) e b_2^0. Resta avaliar se o "argumento posterior" deste parâmetro será capaz de eliminar a igualdade entre R_{22} e R_{33}.

Assim, a nova correlação para S_{ij} proposta é:

$$S_{ij} = b_0^0 \delta_{ij} + b_1^0 R_{ij} + b_2^0 R_{ik} R_{ij} \tag{4.5.1}$$

Abaixo, se encontra o sistema de equações resultante desta modificação proposta para S_{ij}.

$$(1,1) \quad b_0^0 + b_1^0 R_{11} + b_2^0 \left(R_{11}^2 + R_{12}^2\right) = 2 \frac{d}{dx_2} \left[R_{12} v_1\right] \tag{4.5.2}$$

$$(2,2) \quad b_0^0 + b_1^0 R_{22} + b_2^0 \left(R_{12}^2 + R_{22}^2\right) = 0 \tag{4.5.3}$$

$$(3,3) \quad b_0^0 + b_1^0 R_{33} + b_2^0 R_{33}^2 = 0 \tag{4.5.4}$$

$$(1,2) \quad b_1^0 R_{12} + b_2^0 \left(R_{11}^2 + R_{22}^2\right) = \frac{d}{dx_2} \left[R_{22} v_1 + 2 a_0^1 v_1\right] \tag{4.5.5}$$

Conforme se pode observar, o parâmetro b_2^0 conseguiu eliminar a igualdade entre R_{22} e R_{33}.

4.5.1.1 Determinação dos parâmetros

Observando o sistema de equações formado pelas equações (4.5.2) a (4.5.5), pode-se perceber que a determinação dos parâmetros pode ser feita em duas etapas: a primeira, resolvendo um sistema 3x3 de equações lineares para os parâmetros b_0^0, b_1^0 e b_2^0, com as três primeiras equações; a segunda, resolvendo uma equação diferencial ordinária no parâmetro a_0^1, uma vez conhecidos os demais parâmetros.

As etapas seguem abaixo:

$$\begin{bmatrix} 1 & R_{11} & (R_{11}^2 + R_{12}^2) \\ 1 & R_{22} & (R_{12}^2 + R_{22}^2) \\ 1 & R_{33} & R_{33}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_1^0 \\ b_2^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\dfrac{d}{dx_2}[R_{12}v_1] \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.5.6}$$

$$\frac{da_0^1}{dx_2} = -\frac{1}{v_1}\frac{dv_1}{dx_2}a_0^1 + \frac{1}{2v_1}\left[b_1^0 R_{12} + b_2^0\left(R_{11}^2 + R_{22}^2\right) - \frac{d}{dx_2}\left(R_{22}v_1\right)\right] \tag{4.5.7}$$

Observando-se a equação (4.5.7), percebe-se que será necessário fornecer uma condição de contorno que permita sua resolução. Avaliando esta equação em $x_2 = 0$:

$$\lim_{x_2 \to 0} \frac{1}{2v_1}\left[b_1^0 R_{12} + b_2^0\left(R_{11}^2 + R_{22}^2\right) - \frac{d}{dx_2}\left(R_{22}v_1\right)\right] = 0 \tag{4.5.8}$$

Assim, para $x_2 = 0$:

$$\frac{da_0^1}{dx_2} = -\frac{1}{v_1}\frac{dv_1}{dx_2}a_0^1 \Rightarrow \frac{1}{a_0^1}da_0^1 = -\frac{1}{v_1}dv_1 \Rightarrow \ln a_0^1 = -\ln v_1 \Rightarrow a_0^1\Big|_{x_2=0} = \frac{1}{v_1} \tag{4.5.9}$$

O gráfico com o resultado da curva dos parâmetros b_0^0, b_1^0 e b_2^0 foi feito no Excel e a curva para o parâmetro a_0^1 foi feita no Matlab.

Deve-se relembrar que todos os termos dimensionais escritos nas equações acima podem ser vistos como seus respectivos termos adimensionais, uma vez que são iguais, a menos de uma constante.

Normalmente, para traçar o perfil dos parâmetros, é utilizado um conjunto de arquivos de DNS. Como ainda se está avaliando a viabilidade desta abordagem, o perfil dos parâmetros será determinado, inicialmente, apenas com um único arquivo de DNS.

Abaixo seguem os resultados:

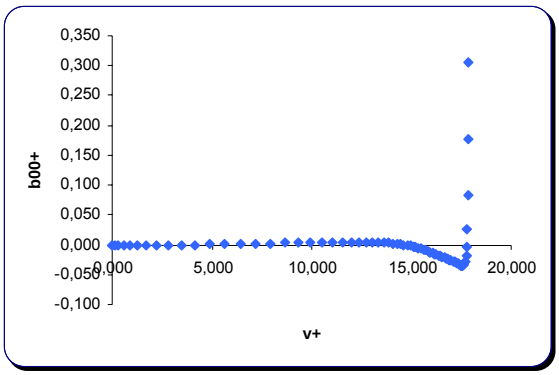


Figura 4.27 – b_0^{0+} **para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para** S_{ij}**.**

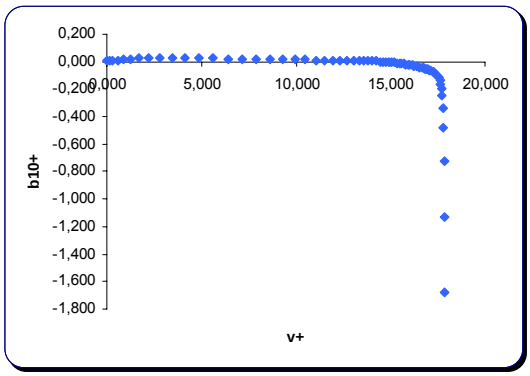


Figura 4.28 – b_1^{0+} **para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para** S_{ij}**.**

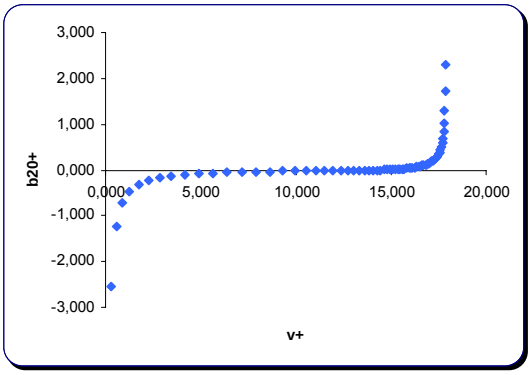


Figura 4.29 – b_2^{0+} **para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para** S_{ij}**.**

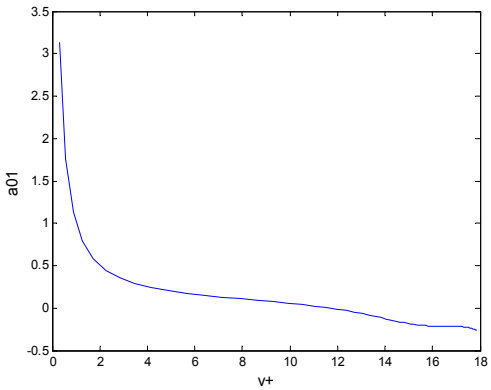


Figura 4.30 – a_0^{1+} **para o primeiro nível de fechamento após modificação na correlação para** S_{ij}**.**

4.5.1.2 Avaliação dos Parâmetros

Conforme se pode observar, o perfil dos parâmetros não é de fácil modelagem. Por esse motivo, decidiu-se, antes de ajustar uma curva para esses parâmetros, verificar a validação dos mesmos com o mesmo arquivo de DNS utilizado para traçar os perfis.

Observando o sistema de equações formado pelas equações (4.5.2) a (4.5.5), porém agora interpretando os componentes do tensor de Reynolds como as incógnitas e os parâmetros, como termos conhecidos, observa-se que novamente há uma "separação" no sistema. O componente R_{33} é independente das demais equações podendo ser diretamente obtido pela equação (4.5.4). As três outras equações, formam então um sistema com três incógnitas: R_{11}, R_{12} e R_{22}.

Deve-se notar ainda que a equação (4.5.4) para o componente R_{33} é uma equação do segundo grau. Desse modo, R_{33} apresentará sempre dois valores para um mesmo x_2, uma vez que uma equação do segundo grau possui sempre duas raízes. Isto pode dificultar a implementação futura do modelo de turbulência, caso o valor de R_{33} "que interessa" não seja totalmente expresso apenas por uma das raízes.

De modo a verificar esta questão, traçou-se num gráfico, no próprio Matlab, as raízes da equação (4.5.4) e o valor conhecido pelo arquivo de DNS utilizado para a determinação dos parâmetros do componente R_{33}. O resultado segue abaixo:

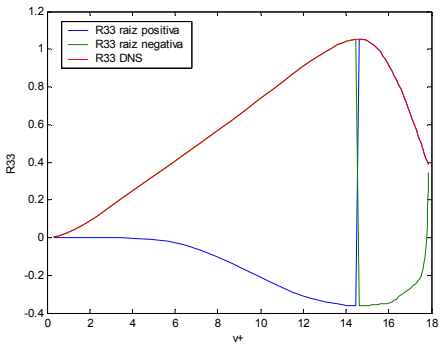


Figura 4.31 – Perfil de cálculo de R_{33}^{+} pela equação (4.5.4). Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06,* arquivo com código CH12__PG.WL1

Conforme se pode observar, o que se "temia" ocorreu: para representar o valor de R_{33}^{+}, é necessário utilizar até um dado valor de v^{+}, uma das raízes da equação (4.5.4), e posteriormente, a outra raiz desta mesma equação. Este comportamento se reflete num provável problema futuro, uma vez que para cada escoamento, o valor de v^{+} em que se tenha que mudar a raiz da equação pode variar e então se teria que fazer uma análise pela derivada de cada uma das raízes.

Analisando o sistema de equações para os demais três componentes do tensor de Reynolds, tem-se que as equações (4.5.2), (4.5.3) e (4.5.5) podem ser escritas da seguinte forma:

$$2v_1 \frac{dR_{12}}{dx_2} = b_0^0 + b_1^0 R_{11} + b_2^0 \left(R_{11}^2 + R_{12}^2\right) - 2R_{12} \frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.5.10}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{22} + b_2^0 \left(R_{12}^2 + R_{22}^2\right) = 0 \tag{4.5.11}$$

$$v_1 \frac{dR_{22}}{dx_2} = b_1^0 R_{12} + b_2^0 \left(R_{11}^2 + R_{22}^2\right) - R_{22} \frac{dv_1}{dx_2} - 2v_1 \frac{da_0^1}{dx_2} - 2 \frac{dv_1}{dx_2} a_0^1 \tag{4.5.12}$$

Observando o sistema acima, nota-se que é um sistema com duas equações diferenciais ordinárias não lineares de coeficientes variáveis e uma equação não linear. Deve-se observar também que, na equação (4.5.11), o componente R_{11} não aparece e que nas equações (4.5.10) e (4.5.12) aparecem todos os três componentes do tensor de Reynolds. Dessa forma, o natural seria isolar ou o componente R_{12} ou o componente R_{22} pela equação (4.5.11), substituir nas equações (4.5.10) e (4.5.12) e resolver um sistema 2x2 de equações diferenciais ordinárias não lineares de coeficientes variáveis. Porém, deve-se observar que tanto o componente R_{12} como o R_{22} na equação (4.5.11) aparecem de forma quadrática e então irão gerar o mesmo problema já apresentado pela equação de segundo grau do componente R_{33}. Além disso, e o que realmente inviabiliza esta abordagem, para isolar R_{12} ou R_{22} da equação (4.5.11) seria inevitável obter

expressões com o parâmetro b_2^0 no denominador. Pela Figura 4.29, observa-se que este parâmetro cruza o eixo de v^+ e isto geraria o mesmo problema já encontrado até o momento com um comportamento hiperbólico.

Dessa forma, novamente, o primeiro nível do fechamento é descartado.

4.5.2 Segundo Nível do Fechamento

Conforme já dito anteriormente, ao propor uma modificação na correlação para os termos turbulentos, o objetivo é tornar possível não zerar o lado direito do sistema de Equações formado pelas equações (4.2.5) e (4.2.14) e não permanecer com termos referentes aos momentos turbulentos.

Dessa forma, a primeira proposta de modificação para o segundo nível do fechamento foi:

$$S_{ijk} = c_0^1(\delta_{ij}v_k + \delta_{jk}v_i + \delta_{ki}v_j) + c_1^1(R_{ij}v_p + R_{jp}v_i + R_{pi}v_j) \tag{4.5.13}$$

No artigo de Alfradique e Telles (2006), só se encontra a correlação linear para o termo S_{ijk}, conforme expresso na equação (3.5.4), porém a equação (4.5.13) pôde ser facilmente obtida por analogia à equação (3.5.1).

Com esta nova correlação para o termo S_{ijk}, as equações (4.2.5) a (4.2.10), assumem a seguinte forma:

(1,1,1) $$\frac{d}{dx_2}[3R_{112}v_1 - 3R_{11}R_{12} + 6d_1^0R_{12}] = 3c_0^1v_1 + 3c_1^1R_{11}v_1 \tag{4.5.14}$$

(1,1,2) $$\frac{d}{dx_2}[2R_{122}v_1 - (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) + 3d_0^0 + 3d_1^0(R_{11} + R_{22})] = 2c_1^1R_{12}v_1 \tag{4.5.15}$$

(1,2,2) $$\frac{d}{dx_2}[R_{222}v_1 - 3R_{12}R_{22} + 6d_1^0R_{12}] = c_0^1v_1 + c_1^1R_{22}v_1 \tag{4.5.16}$$

(1,3,3) $$\frac{d}{dx_2}[R_{233}v_1 - R_{12}R_{33} + 3d_1^0R_{12}] = c_0^1v_1 + c_1^1R_{33}v_1 \tag{4.5.17}$$

(2,2,2) $$\frac{d}{dx_2}[-3R_{22}^2 + 3(d_0^0 + 4d_1^0R_{22})] = 0 \tag{4.5.18}$$

(2,3,3) $$\frac{d}{dx_2}[-R_{22}R_{33} + 3d_1^0(R_{22} + R_{33})] = 0 \tag{4.5.19}$$

Conforme se pode observar, as equações (4.5.18) e (4.5.19), implicarão, naturalmente, sem nenhuma arbitrariedade, nos mesmos valores para os parâmetros d_0^0 e d_1^0 utilizados até agora, expressos pelas equações (4.4.2) e (4.4.1), respectivamente. A expressão destes parâmetros pode ser substituída nas demais equações ((4.5.14) a (4.5.17)), restando então, quatro parâmetros a serem determinados.

O próximo passo é então manipular o sistema de modo a se poder substituir o momento triplo presente nas (4.5.14) a (4.5.17) nas equações (4.2.11) a (4.2.14). Estas equações não sofreram nenhuma modificação pois não dependiam do termo S_{ijk} que foi o único mudado até o momento.

Para isso, há duas opções: manter as equações (4.5.14) a (4.5.17) do mesmo modo que estão, abrindo as derivadas e isolando a derivada que pode ser substituída em cada uma das equações (4.2.11) a (4.2.14); ou integrar cada uma das equações (4.5.14) a (4.5.17), obtendo uma expressão direta para cada um dos momentos triplos e então substituí-los dentro das derivadas das equações (4.2.11) a (4.2.14). A primeira opção será descartada pelo fato de todos os momentos triplos, nas equações (4.5.14) a (4.5.17), estarem multiplicados, dentro da derivada, por v_1. Quando se faz a derivada do produto, expressa pela equação (4.5.20) abaixo, consegue-se isolar o termo de interesse para substituir nas equações (4.2.11) a (4.2.14), porém o momento triplo permanece multiplicado pela derivada da velocidade e não é eliminado do sistema, conforme se pretendia.

$$\frac{d}{dx_2}\left(R_{ijk}v_1\right) = v_1\frac{dR_{ijk}}{dx_2} + \underbrace{R_{ijk}\frac{dv_1}{dx_2}}_{\text{Problema!!!}} \tag{4.5.20}$$

Dessa forma, resta a segunda opção: integrar as equações (4.5.14) a (4.5.17) de $x_2 = 0$ a qualquer x_2. O resultado segue abaixo, já substituindo os valores de d_0^0 e d_1^0, expressos pelas equações (4.4.2) e (4.4.1), respectivamente.

$$R_{112} = \frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{11} v_1\right)dx_2 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1} - \frac{2}{3}\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}} \tag{4.5.21}$$

$$R_{122} = \frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_1^1 R_{12} v_1\right)dx_2 + \frac{1}{2v_1}\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) - 3R_{22}^2\left[1 - \frac{4}{3}\frac{R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] - \frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}(R_{11}+R_{22})\right] \tag{4.5.22}$$

$$R_{222} = \frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{22} v_1\right)dx_2 + 3\frac{R_{12}R_{22}}{v_1} - 2\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}} \tag{4.5.23}$$

$$R_{233} = \frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{33} v_1\right)dx_2 + \frac{R_{12}R_{33}}{v_1} - \frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}} \tag{4.5.24}$$

Substituindo as equações (4.5.21) a (4.5.24) nas equações (4.2.11) a (4.2.14), respectivamente:

$$b_0^0 + b_1^0 R_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{11} v_1\right)dx_2\right] + 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1} - \frac{2}{3}\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.5.25}$$

$$b_1^0 R_{12} = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_1^1 R_{12} v_1\right)dx_2\right] + \frac{d}{dx_2}\left[\begin{array}{l} R_{22}v_1 + \frac{R_{11}R_{22}}{v_1} + 2\frac{R_{12}^2}{v_1} - 3\frac{R_{22}^2}{v_1}\left[1 - \frac{4}{3}\frac{R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] - \\ \frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\frac{(R_{11}+R_{22})}{v_1} \end{array}\right] \tag{4.5.26}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{22} = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{22} v_1\right)dx_2\right] + 2\frac{d}{dx_2}\left[3\frac{R_{12}R_{22}}{v_1} - 2\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.5.27}$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{33} = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{33} v_1\right)dx_2\right] + 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{33}}{v_1} - \frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.5.28}$$

Nas equações acima, pode-se perceber que as integrais dentro das derivadas devem ser tratadas. Assim, abrindo o termo em questão:

$$\frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{ij} v_1\right)dx_2\right] = \frac{1}{v_1}\frac{d}{dx_2}\left[\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{ij} v_1\right)dx_2\right] + \frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\right]\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{ij} v_1\right)dx_2 \quad (4.5.29)$$

Pode-se notar que o primeiro termo do lado direito da equação (4.5.29) pode ser facilmente desenvolvido:

$$\frac{1}{v_1}\frac{d}{dx_2}\left[\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{ij} v_1\right)dx_2\right] = \frac{1}{v_1}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{ij} v_1\right) = c_0^1 + c_1^1 R_{ij} \quad (4.5.30)$$

Por outro lado, o segundo termo do lado direito da equação (4.5.29), torna-se um certo problema uma vez que os parâmetros c_0^1 e c_1^1 não são conhecidos. Dessa forma, sugere-se considerar este termo desprezível. Esta hipótese, por mais que implique num certo erro, não é de toda absurda pois o valor de $\frac{d}{dx_2}\left[\frac{1}{v_1}\right]$ é grande próximo à parede e muito pequeno no centro do escoamento e espera-se que $\int_0^{x_2}\left(c_0^1 v_1 + c_1^1 R_{ij} v_1\right)dx_2$ seja bem pequeno próximo à parede (uma vez que v_1 e R_{ij} o são) e grande no centro do escoamento. Além disso, como os parâmetros ainda serão determinados, espera-se que estes possam "compensar" o erro devido a esta aproximação.

Dessa forma, as equações (4.5.25) a (4.5.28) podem ser escritas da seguinte forma:

$$b_0^0 + b_1^0 R_{11} - 2c_0^1 - 2c_1^1 R_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12} v_1 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1} - \frac{2}{3}\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \quad (4.5.31)$$

$$b_1^0 R_{12} - 2c_1^1 R_{12} = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22} v_1 + \frac{R_{11}R_{22}}{v_1} + 2\frac{R_{12}^2}{v_1} - 3\frac{R_{22}^2}{v_1}\left[1 - \frac{4}{3}\frac{R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] - \frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\frac{(R_{11}+R_{22})}{v_1}\right] \quad (4.5.32)$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{22} - 2c_0^1 - 2c_1^1 R_{22} = 2\frac{d}{dx_2}\left[3\frac{R_{12}R_{22}}{v_1} - 2\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \quad (4.5.33)$$

$$b_0^0 + b_1^0 R_{33} - 2c_0^1 - 2c_1^1 R_{33} = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{33}}{v_1} - \frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \quad (4.5.34)$$

4.5.2.1 Determinação dos Parâmetros

Para a determinação dos parâmetros, pode-se redefinir o lado direito das equações (4.5.31) a (4.5.34), apenas para efeito de simplificação:

$$I1 = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + \frac{R_{11}R_{12}}{v_1} - \frac{2}{3}\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.5.35}$$

$$I2 = 2\frac{d}{dx_2}\left[3\frac{R_{12}R_{22}}{v_1} - 2\frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.5.36}$$

$$I3 = 2\frac{d}{dx_2}\left[\frac{R_{12}R_{33}}{v_1} - \frac{R_{12}}{v_1}\frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] \tag{4.5.37}$$

$$I4 = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + \frac{R_{11}R_{22}}{v_1} + 2\frac{R_{12}^2}{v_1} - 3\frac{R_{22}^2}{v_1}\left[1 - \frac{4}{3}\frac{R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\right] - \frac{R_{22}R_{33}}{R_{22}+R_{33}}\frac{(R_{11}+R_{22})}{v_1}\right] \tag{4.5.38}$$

Todos esses termos são conhecidos nos arquivos de DNS utilizados para a determinação dos parâmetros. Assim, as equações (4.5.31) a (4.5.34) podem ser encaradas como um sistema linear para a determinação dos parâmetros:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & R_{11} & -2 & -2R_{11} \\ 1 & R_{22} & -2 & -2R_{22} \\ 1 & R_{33} & -2 & -2R_{33} \\ 0 & R_{12} & 0 & -2R_{12} \end{bmatrix}}_{A}\begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_1^0 \\ c_0^1 \\ c_1^1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix}}_{I} \tag{4.5.39}$$

Conforme se pode notar, o Sistema (4.5.39) é um sistema impossível. O posto da matriz A é menor que o posto da matriz ([A I]), formada pela matriz A e o vetor I, utilizada na solução de sistemas lineares pelo método de Gauss-Jordan, o que caracteriza um sistema sem solução.

Com este resultado pode-se dizer que a correlação proposta para o termo S_{ijk} não foi apropriada, porém há outras possíveis correlações a serem propostas.

Deve-se observar que, uma vez que os parâmetros d_0^0 e d_1^0 eliminam do sistema de equações a ser resolvido as equações (4.5.18) e (4.5.19), restam 4 equações ((4.5.14) a (4.5.17)) que serão substituídas em outras 4 (equações (4.2.11) a (4.2.14)), tendo-se no final um sistema de 4 equações. Dessa forma, deve-se propor novas correlações para os termos S_{ij} e S_{ijk} que forneçam 4 parâmetros que impliquem em quatro linhas e quatro colunas linearmente independentes, para que o sistema tenha solução e esta seja única.

Pela equação (3.5.2) para as possíveis correlações de S_{ij}, e observando que este termo não sofre alterações ao ser substituído nas equações (4.2.11) a (4.2.14), tem-se abaixo as colunas do sistema para cada parâmetro da equação (3.5.2) para cada valor "ij" onde S_{ij} é não nulo.

$$\begin{array}{l}(1,1)\rightarrow\\(2,2)\rightarrow\\(3,3)\rightarrow\\(1,2)\rightarrow\end{array}\quad \underset{\textbf{Coluna 1}}{b_0^0\begin{bmatrix}1\\1\\1\\0\end{bmatrix}},\ \underset{\textbf{Coluna 2}}{b_0^2\begin{bmatrix}v_1^2\\0\\0\\0\end{bmatrix}},\ \underset{\textbf{Coluna 3}}{b_1^0\begin{bmatrix}R_{11}\\R_{22}\\R_{33}\\R_{12}\end{bmatrix}},\ \underset{\textbf{Coluna 4}}{b_2^0\begin{bmatrix}\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right)\\\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right)\\R_{33}^2\\R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right)\end{bmatrix}},\ \underset{\textbf{Coluna 5}}{b_1^2\begin{bmatrix}2R_{11}v_1^2\\0\\0\\R_{12}v_1^2\end{bmatrix}},\ \underset{\textbf{Coluna 6}}{b_2^2\begin{bmatrix}2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right)\\0\\0\\v_1^2R_{12}\left(R_{12}+R_{22}\right)\end{bmatrix}}$$

Por analogia à equação (3.5.1), pode-se inferir as possíveis correlações para o termo S_{ijk}:

$$S_{ijk}=c_0^1[\delta_{ij}v_k+\delta_{jk}v_i+\delta_{kl}v_j]+c_1^1[R_{ij}v_k+R_{jk}v_i+R_{kl}v_j]+c_2^1[R_{il}R_{jl}v_k+R_{jl}R_{kl}v_i+R_{kl}R_{il}v_j]+c_0^3\left[v_iv_jv_k\right]+eR_{ijk} \quad (4.5.40)$$

Pode-se então representar as colunas do sistema para cada parâmetro. Porém, antes deve-se observar a dedução feita da equação (4.5.21) à (4.5.34). Os parâmetros da correlação do termo S_{ijk}, ficam dentro das integrais e posteriormente são divididos por v_1. Além disso, são multiplicados por 2 e possuem sinal invertido, pois passam para o lado esquerdo, de modo a montar o sistema para a determinação dos parâmetros.

Dessa forma, obtêm-se as colunas relativas à correlação do termo S_{ijk} para cada valor "ijk" onde S_{ijk} é não nulo:

$$
\begin{array}{r}
(1,1,1) \rightarrow \\
(1,2,2) \rightarrow \\
(1,3,3) \rightarrow \\
(1,1,2) \rightarrow
\end{array}
\quad
\underset{\textbf{Coluna 7}}{c_0^1 \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \\ -2 \\ 0 \end{bmatrix}},
\underset{\textbf{Coluna 8}}{c_1^1 \begin{bmatrix} -2R_{11} \\ -2R_{22} \\ -2R_{33} \\ -2R_{12} \end{bmatrix}},
\underset{\textbf{Coluna 9}}{c_2^1 \begin{bmatrix} -2\left(R_{11}^2 + R_{12}^2\right) \\ -2\left(R_{12}^2 + R_{22}^2\right) \\ -2R_{33}^2 \\ -2R_{12}\left(R_{11} + R_{22}\right) \end{bmatrix}},
\underset{\textbf{Coluna 10}}{c_0^3 \begin{bmatrix} -2v_1^2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}}
$$

Dispondo de todas as possíveis correlações para os termos turbulentos, pode-se fazer uma análise combinatória determinando todos os possíveis sistemas de quatro parâmetros que fornecerão uma única solução e escolher para a determinação dos parâmetros o sistema que apresentar o melhor perfil de parâmetros cuja modelagem seja conveniente.

Porém, deve-se observar que, num mesmo sistema, os seguintes pares de colunas não podem coexistir: Coluna 1 e Coluna 7, Coluna 2 e Coluna 10, Coluna 3 e Coluna 8, Coluna 4 e Coluna 9, pois caso contrário haveria colunas linearmente dependentes, como ocorreu no Sistema (4.5.39). Da mesma forma, mas agora visando eliminar os sistemas com linhas linearmente dependentes, os seguintes trios de colunas não podem coexistir: Coluna 2, Coluna 5 e Coluna 10; Coluna 2, Coluna 6 e Coluna 10; Coluna 5, Coluna 6 e Coluna 10.

Deve-se ainda observar que há sistemas equivalentes que não devem ser contados mais de uma vez. Por exemplo, um sistema formado pelas Colunas 1, 2, 8 e 9 é equivalente aos seguintes sistemas: formado pelas Colunas 3, 4, 7,10; formado pelas Colunas 2, 3, 7,9; formado pelas Colunas 2, 4, 7,8; formado pelas Colunas 1, 3, 9,10; e formado pelas Colunas 1, 4, 8,10.

Assumiu-se que se devem utilizar dois parâmetros provenientes da correlação para S_{ij} e dois provenientes da correlação para S_{ijk}. Esta consideração foi feita apenas com o intuito de simplificar a análise combinatória, pois se fossem consideradas todas as possibilidades de sistemas (variando de nenhum parâmetro para S_{ij} e 4 para S_{ijk} a 4

para S_{ij} e nenhum para S_{ijk}), simplesmente haveria mais sistemas equivalentes, uma vez que todas as colunas de parâmetros para o termo S_{ijk} possuem uma equivalente no conjunto de colunas de parâmetros para o termo S_{ij}.

Dessa forma, chega-se ao número de 12 sistemas distintos possíveis para a determinação dos parâmetros.

Abaixo seguem os 12 sistemas possíveis, e o perfil dos parâmetros obtidos para cada sistema encontra-se no Anexo 2.

Para a determinação dos parâmetros foram utilizados 2 arquivos de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp*, "Turbulence and Heat Transfer Lab. / Frontier Energy System Lab". Quando um arquivo implicava em um perfil de parâmetro inviável, apenas este foi mostrado.

Deve-se destacar ainda que os sistemas abaixo descritos encontram-se escritos em sua forma dimensional, porém de acordo com a demonstração feita entre as equações (4.2.19) e (4.2.28), eles podem ser lidos exatamente iguais para as variáveis adimensionais, pois são realmente iguais, a menos de uma constante. Desse modo, os dados dos arquivos de DNS foram utilizados para modelar estes sistema e os parâmetros calculados estão na forma adimensional.

$$\begin{bmatrix} v_1^2 & R_{11} & -2 & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & R_{22} & -2 & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & R_{33} & -2 & -2R_{33}^2 \\ 0 & R_{12} & 0 & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^2 \\ b_1^0 \\ c_0^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.41}$$

$$\begin{bmatrix} v_1^2 & 2R_{11}v_1^2 & -2 & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & 0 & -2 & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & 0 & -2 & -2R_{33}^2 \\ 0 & R_{12}v_1^2 & 0 & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^2 \\ b_1^2 \\ c_0^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.42}$$

$$\begin{bmatrix} 2R_{11}v_1^2 & R_{11} & -2 & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & R_{22} & -2 & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & R_{33} & -2 & -2R_{33}^2 \\ R_{12}v_1^2 & R_{12} & 0 & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^2 \\ b_1^0 \\ c_0^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.43}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -2v_1^2 & -2R_{11} & 2R_{11}v_1^2 \\ 1 & 0 & -2R_{22} & 0 \\ 1 & 0 & -2R_{33} & 0 \\ 0 & 0 & -2R_{12} & R_{12}v_1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ c_0^3 \\ c_1^1 \\ b_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.44}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -2v_1^2 & -2R_{11} & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 1 & 0 & -2R_{22} & 0 \\ 1 & 0 & -2R_{33} & 0 \\ 0 & 0 & -2R_{12} & v_1^2R_{12}\left(R_{12}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ c_0^3 \\ c_1^1 \\ b_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.45}$$

$$\begin{bmatrix} 2R_{11}v_1^2 & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) & -2R_{11} & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & 0 & -2R_{22} & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & 0 & -2R_{33} & -2R_{33}^2 \\ R_{12}v_1^2 & v_1^2R_{12}(R_{12}+R_{22}) & -2R_{12} & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^2 \\ b_2^2 \\ c_1^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.46}$$

$$\begin{bmatrix} 2R_{11}v_1^2 & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) & -2 & -2R_{11} \\ 0 & 0 & -2 & -2R_{22} \\ 0 & 0 & -2 & -2R_{33} \\ R_{12}v_1^2 & v_1^2R_{12}(R_{12}+R_{22}) & 0 & -2R_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^2 \\ b_2^2 \\ c_0^1 \\ c_1^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.47}$$

$$\begin{bmatrix} 2R_{11}v_1^2 & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) & -2 & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & 0 & -2 & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & 0 & -2 & -2R_{33}^2 \\ R_{12}v_1^2 & v_1^2R_{12}\left(R_{12}+R_{22}\right) & 0 & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^2 \\ b_2^2 \\ c_0^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.48}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) & -2R_{11} & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 1 & 0 & -2R_{22} & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 1 & 0 & -2R_{33} & -2R_{33}^2 \\ 0 & v_1^2R_{12}\left(R_{12}+R_{22}\right) & -2R_{12} & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_2^2 \\ c_1^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.49}$$

$$\begin{bmatrix} v_1^2 & 2R_{11}v_1^2 & -2R_{11} & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & 0 & -2R_{22} & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & 0 & -2R_{33} & -2R_{33}^2 \\ 0 & R_{12}v_1^2 & -2R_{12} & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^2 \\ b_1^2 \\ c_1^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.50}$$

$$\begin{bmatrix} v_1^2 & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) & -2R_{11} & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 0 & 0 & -2R_{22} & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 0 & 0 & -2R_{33} & -2R_{33}^2 \\ 0 & v_1^2R_{12}\left(R_{12}+R_{22}\right) & -2R_{12} & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^2 \\ b_2^2 \\ c_1^1 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.51}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2v_1^2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) & -2v_1^2 & -2\left(R_{11}^2+R_{12}^2\right) \\ 1 & 0 & 0 & -2\left(R_{12}^2+R_{22}^2\right) \\ 1 & 0 & 0 & -2R_{33}^2 \\ 0 & v_1^2R_{12}\left(R_{12}+R_{22}\right) & 0 & -2R_{12}\left(R_{11}+R_{22}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_2^2 \\ c_0^3 \\ c_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I1 \\ I2 \\ I3 \\ I4 \end{bmatrix} \tag{4.5.52}$$

Conforme se pode observar no Anexo 2, nenhum dos sistemas apresentou para ambos os arquivos de DNS testados um perfil de parâmetros aceitável, uma vez que para todos os sistemas, pelo menos um parâmetro apresentava um comportamento hiperbólico. Este fato se explica pelo fato de o determinante dos sistemas cruzar o zero quando aplicado nos arquivos de DNS.

4.6 Mudança nas Correlações do Artigo de Alfradique e Telles (2006)

Após os últimos resultados obtidos, concluiu-se que, na forma em que o artigo de Alfradique e Telles (2006) está escrito, não é possível fazer a determinação dos parâmetros (e conseqüentemente a implementação deste modelo de turbulência em códigos de CFD, conforme idéia inicial) para os fechamentos de primeiro e segundo níveis.

O ideal seria trabalhar com o fechamento de primeiro nível, uma vez que neste aparecem unicamente as variáveis de interesse: os momentos duplos, conhecidos pelos componentes do tensor de Reynolds.

O fechamento de segundo nível já apresenta “complicações” intrínsecas, uma vez que, em seu balanço geral – sem simplificações de acordo com o cenário de escoamento escolhido – há a presença dos momentos triplos. Na teoria, esta complicação é apenas devida ao aumento significativo de variáveis a se calcular: os seis componentes do tensor de Reynolds mais os dez momentos triplos. O sistema geral seria um sistema 16x16. Por isso, resolveu-se investir neste nível de fechamento, mesmo tendo-se consciência de que um sistema deste porte requereria maior tempo de simulação. Porém, observou-se que para o cenário de escoamento escolhido – placas planas paralelas com perfil de fluido plenamente desenvolvido – este sistema apresentaria mais incógnitas do que equações, sendo um sistema impossível. Desse modo, foi necessário, optar por simplificações e manipulações algébricas que permitissem explicitar os momentos triplos em função dos componentes do tensor de Reynolds de modo a viabilizar a determinação dos parâmetros. Uma vez fracassadas todas as possíveis abordagens para o fechamento de segundo nível, poder-se-ia pensar no fechamento de terceiro nível, porém após todos os resultados já apresentados, esta proposta é facilmente recusável, especialmente se for considerado que haverá a presença não só dos momentos triplos como dos quádruplos e que o novo sistema seria significativamente maior que um “simples” 16x16.

Diante de toda a análise acima, decidiu-se estudar a possibilidade de modificar as correlações propostas no artigo de Alfradique e Telles (2006) de modo a viabilizar a implementação do novo modelo de turbulência.

Uma vez que o fechamento de primeiro nível é considerado o ideal para a abordagem do modelo de turbulência, as modificações serão propostas apenas para os termos turbulentos deste nível de fechamento.

O objetivo em modificar as correlações é então encontrar um sistema de modelagem possível para os parâmetros, que não apresente problemas de inversão (ou seja, que se consiga calcular os parâmetros e posteriormente os componentes do tensor de Reynolds) e, particularmente para o primeiro nível de fechamento, que não implique em $R_{22} = R_{33}$, conforme mostrado em Klein (2006) e no item 4.5.1 desta dissertação.

De modo a facilitar a compreensão das modificações necessárias, serão descritas abaixo as equações do modelo aplicadas no cenário de escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas com os termos turbulentos S_{ij} e R_{ijp} explícitos.

$$S_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + R_{112}\right] \tag{4.6.1}$$

$$S_{22} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{222}\right] \tag{4.6.2}$$

$$S_{33} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{233}\right] \tag{4.6.3}$$

$$S_{12} = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + 2R_{122}\right] \tag{4.6.4}$$

Deve-se notar, que a causa para a igualdade dos componentes R_{22} e R_{33} deve-se basicamente ao fato de a correlação para o termo R_{ijp}, expressa em sua forma completa e igual ao artigo de Alfradique e Telles na equação (3.5.1), sempre zerar quando “i” e “j” são mutuamente iguais a 2 ou 3. Isto ocorre pelo fato de todos os termos desta correlação estarem multiplicados por v_i, v_j e/ou v_p e “p”, no cenário de escoamento escolhido, ser sempre 2. Este fato, que implica nas equações (4.6.2) e (4.6.3) terem o

lado direito nulo, somado ao fato de as correlações para S_{ij} serem simétricas quando "i" e "j" são mutuamente iguais a 2 ou 3, implica em $R_{22} = R_{33}$.

Dessa forma, pensou-se numa forma de propor uma correlação para o termo R_{ijp} onde fosse possível respeitar os princípios das correlações do artigo de Alfradique e Telles. Como este termo zera devido à presença da velocidade com os subíndices "i", "j" ou "p" em todos termos, pensou-se que, se aparecesse v_1 em R_{ijp} para "i" e "j" com valores mutuamente iguais a 2 ou 3, seria possível obter o termo R_{ijp} diferente de zero.

A única forma de obter v_1 em R_{ijp} é se o subíndice "l" que varia sempre de 1 a 3 aparecer na velocidade. Assim, observando o último termo da equação (3.5.1), tem-se a idéia de modificar a posição dos subíndices de modo a colocar o subíndice "l" na velocidade v. Assim, a nova proposição para o termo R_{ijp} é:

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij}v_p + \delta_{jp}v_i + \delta_{pi}v_j] + a_1^1[R_{ij}v_p + R_{jp}v_i + R_{pi}v_j] + a_2^1[v_l R_{il} R_{jp} + v_l R_{lp} R_{ij} + v_l R_{lj} R_{ip}] \quad (4.6.5)$$

Como o cenário de escoamento escolhido apresenta para o primeiro nível do fechamento quatro componentes do tensor de Reynolds, deve-se ter quatro parâmetros de modo que se possa calculá-los, inverter o sistema e recalcular os momentos duplos.

4.6.1 Primeira Abordagem

Dessa forma, a primeira abordagem realizada baseou-se em manter a correlação linear para S_{ij} conforme equação (4.2.2) e propor para R_{ijp} a correlação expressa na equação (4.6.6). Esta correlação abordou os novos termos posteriores ao parâmetro a_2^1 e optou pelo parâmetro a_0^1 em detrimento do a_1^1 devido a maior simplicidade dos termos posteriores a este parâmetro.

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij}v_p + \delta_{jp}v_i + \delta_{pi}v_j] + a_2^1[v_l R_{il} R_{jp} + v_l R_{lp} R_{ij} + v_l R_{lj} R_{ip}] \quad (4.6.6)$$

Aplicando as correlações de S_{ij} e R_{ijp} nas equações (4.6.1) a (4.6.4), obtém-se o seguinte conjunto de equações:

$$(1,1)\quad b_0^0 + b_1^0 R_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + 3a_2^1 R_{11}R_{12}v_1\right] \tag{4.6.7}$$

$$(2,2)\quad b_0^0 + b_1^0 R_{22} = 6\frac{d}{dx_2}\left[3a_2^1 R_{12}R_{22}v_1\right] \tag{4.6.8}$$

$$(3,3)\quad b_0^0 + b_1^0 R_{33} = 2\frac{d}{dx_2}\left[a_2^1 R_{12}R_{33}v_1\right] \tag{4.6.9}$$

$$(1,2)\quad b_1^0 R_{12} = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + 2a_0^1 v_1 + 2a_2^1 v_1 (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)\right] \tag{4.6.10}$$

Este conjunto de equações, após abrir as derivadas, pode ser organizado de modo a formar dois sistemas lineares ((4.6.11) e (4.6.16)), conforme já feito anteriormente: um para a determinação dos parâmetros e outro para o cálculo dos componentes do tensor de Reynolds. A idéia de expressar este conjunto de equações diferencias na forma de sistemas lineares, deve-se à forma mais prática de resolver este sistema no programa Matlab. Abaixo seguem os sistemas citados.

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{R_{11}}{2} & 0 & -3v_1R_{11}R_{12} \\ \frac{1}{6} & \frac{R_{22}}{6} & 0 & -v_1R_{12}R_{22} \\ \frac{1}{2} & \frac{R_{33}}{2} & 0 & -v_1R_{12}R_{33} \\ 0 & \frac{R_{12}}{2} & -v_1 & -v_1(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_1^0 \\ \frac{da_0^1}{dx_2} \\ \frac{da_2^1}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} \tag{4.6.11}$$

Onde:

$$I_1 = v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} + 3a_2^1\left[R_{11}R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2}\right] \tag{4.6.12}$$

$$I_2 = a_2^1\left[R_{12}R_{22}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \tag{4.6.13}$$

$$I_3 = a_2^1\left[R_{12}R_{33}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{33}}{dx_2} + R_{33}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \tag{4.6.14}$$

$$I_4 = \frac{v_1}{2}\frac{dR_{22}}{dx_2} + \frac{R_{22}}{2}\frac{dv_1}{dx_2} + a_0^1\frac{dv_1}{dx_2} + a_2^1\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + 4R_{12}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \tag{4.6.15}$$

$$\begin{bmatrix} 3a_2^1R_{12}v_1 & 0 & 0 & v_1 + 3a_2^1R_{11}v_1 \\ 0 & a_2^1R_{12}v_1 & 0 & a_2^1R_{22}v_1 \\ 0 & 0 & a_2^1R_{12}v_1 & a_2^1R_{33}v_1 \\ a_2^1R_{22}v_1 & \frac{v_1}{2} + a_2^1R_{11}v_1 & 0 & 4a_2^1R_{12}v_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dR_{11}}{dx_2} \\ \frac{dR_{22}}{dx_2} \\ \frac{dR_{33}}{dx_2} \\ \frac{dR_{12}}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{bmatrix} \tag{4.6.16}$$

Onde:

$$B_1 = \frac{b_0^0}{2} + \frac{b_1^0}{2}R_{11} - 3R_{11}R_{12}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12} + 3R_{11}R_{12}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.17}$$

$$B_2 = \frac{b_0^0}{6} + \frac{b_1^0}{6}R_{22} - R_{12}R_{22}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - R_{12}R_{22}a_2^1\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.18}$$

$$B_3 = \frac{b_0^0}{2} + \frac{b_1^0}{2}R_{33} - R_{12}R_{33}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - R_{12}R_{33}a_2^1\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.19}$$

$$B_4 = \frac{b_1^0}{2}R_{12} - v_1\frac{da_0^1}{dx_2} - (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[\frac{R_{22}}{2} + a_0^1 + (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.20}$$

Para a determinação dos parâmetros foram utilizados 3 arquivos de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp*, “Turbulence and Heat Transfer Lab. / Frontier Energy System Lab”. O perfil dos parâmetros foi obtido resolvendo-se o sistema (4.6.11).

Deve-se observar que o sistema (4.6.11) apresenta como variáveis dois parâmetros b_0^0 e b_1^0 e duas derivadas, a dos parâmetros a_0^1 e a_2^1.

Novamente, deve-se enfocar que os sistemas (4.6.11) e (4.6.16) estão escritos em sua forma dimensional, mas podem ser lidos como adimensionais uma vez que o

sistema adimensional seria exatamente igual, mas com as variáveis adimensionais, conforme mostrado no desenvolvimento das equações (4.2.19) a (4.2.28).

Para resolver um sistema de equações diferenciais no Matlab, deve-se fornecer um vetor de integração, que no caso é o vetor posição x_2 proveniente dos arquivos em DNS, uma condição inicial (no caso a_0^1 deve ser zero em $x_2 = 0$, porém a_2^1 pode assumir qualquer valor uma vez que está sempre acompanhado de termos – R_{ij} e v_1 – que assumem valor zero em $x_2 = 0$) e uma expressão (ou valores discretos) da derivada da variável cujo valor deseja-se obter. Dessa forma, a praticidade de resolver o sistema de equações (4.6.7) a (4.6.10) consiste em poder indicar que o valor discreto das derivadas dos parâmetros é a solução do sistema linear (4.6.11) nas posições 3 e 4 do vetor solução do sistema. Assim, o Matlab retorna um vetor para os parâmetros a_0^1 e a_2^1 com o mesmo número de posições que o vetor de integração. Porém, os parâmetros b_0^0 e b_1^0 retornam com um número significativamente maior de posições, pois são soluções diretas do sistema linear e apresentam um número de posições igual ao número total de interpolações que o Matlab executa para resolver o sistema de equações diferenciais. Assim, após receber no programa principal os parâmetros b_0^0 e b_1^0 estes devem ser interpolados nas mesmas posições do vetor posição x_2 para apresentarem o mesmo número de posições e poderem posteriormente ser utilizados para recalcular os componentes do tensor de Reynolds nas mesmas posições do vetor posição x_2.

Devido a esta interpolação dos parâmetros b_0^0 e b_1^0, decidiu-se antes de fazer a modelagem dos parâmetros testar a identidade do sistema, ou seja, recalcular os componentes do tensor de Reynolds do próprio arquivo utilizado para a determinar o perfil dos parâmetros com os valores dos parâmetros discretos provenientes diretamente

da determinação dos mesmos. A idéia era testar os quatro arquivos de DNS mencionados acima.

O perfil dos parâmetros e o resultado do "teste de identidade" do sistema seguem abaixo. De modo a facilitar e melhorar a visualização do perfil dos parâmetros, os valores discretos destes foram exportados para o programa Excel onde então foram plotados.

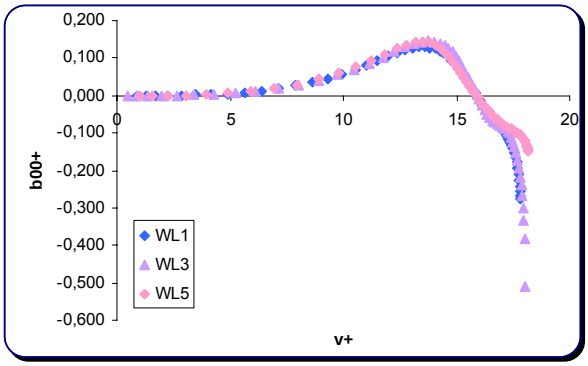


Figura 4.32 – Perfil do parâmetro b_0^{0+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11).

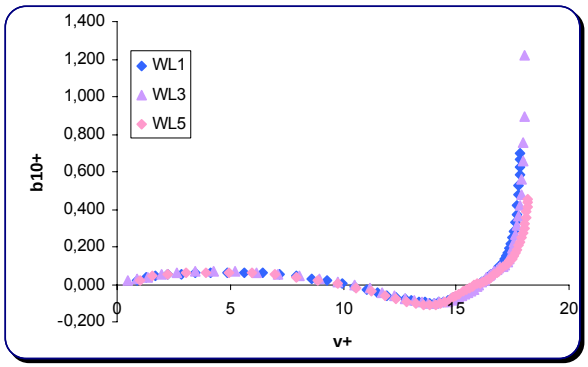


Figura 4.33 – Perfil do parâmetro b_1^{0+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11).

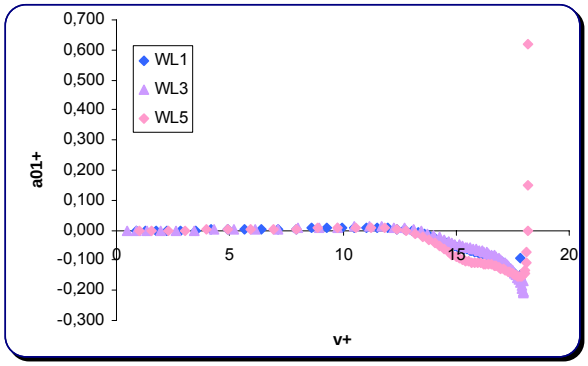


Figura 4.34 – Perfil do parâmetro a_0^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11).

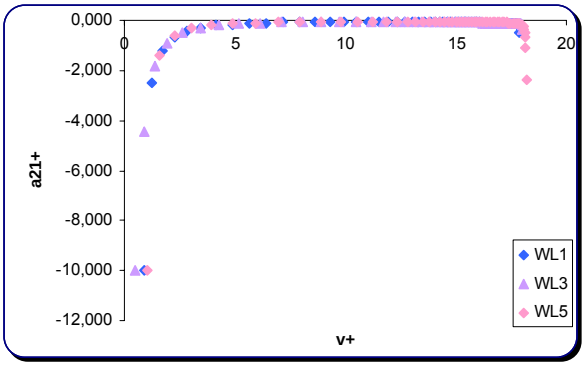


Figura 4.35 – Perfil do parâmetro a_2^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.11).

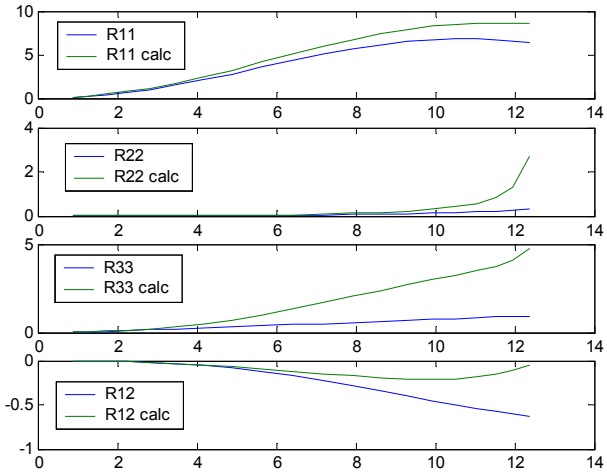


Figura 4.36 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL1. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

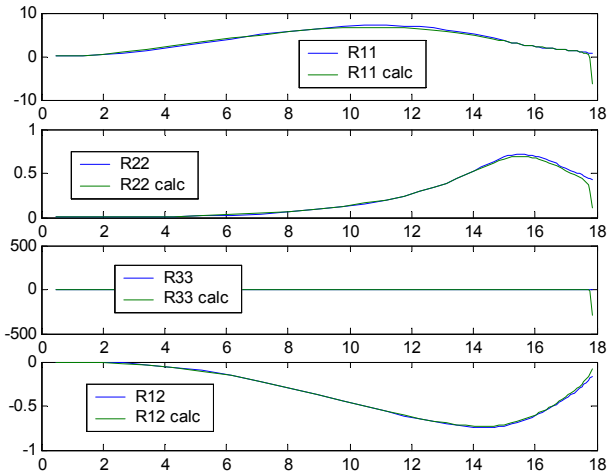


Figura 4.37 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL3. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL3

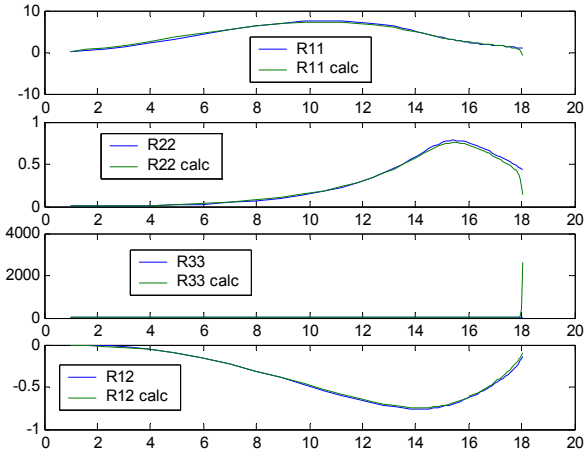


Figura 4.38 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL5. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06,* arquivo com código CH12__PG.WL5

Conforme se pode notar acima, o perfil dos parâmetros apresenta sempre um perfil final (mais no centro tubo) de difícil modelagem. Deve-se ainda ressaltar que os vetores provenientes dos arquivos de DNS começam da posição $x_2 = 0$, porém nas primeiras posições, onde as variáveis v_1 e R_{ij} são muito próximas de zero, o Matlab não consegue resolver o sistema (4.6.11) para obter o valor dos parâmetros sendo necessário excluir as primeiras posições para que o Matlab consiga executar.

Porém, pelo resultado do teste de identidade dos sistemas (4.6.11) e (4.6.16) não é válido modelar os parâmetros, pois o sistema apresenta problemas de inversão. Isto pode ser claramente observado no resultado do arquivo de DNS WL1, Figura 4.36. Das 67 posições do vetor posição, apenas 20 foram integradas. Pode-se notar pelo comportamento dos componentes do tensor que esta integração é interrompida pela "extrapolação" dos mesmos. Os demais arquivos de DNS testados também não foram integrados em todas as posições, porém a integração foi interrompida nas últimas posições do vetor posição, tendo sido integradas 55 das 61 posições do arquivo WL3 e 55 das 60 do WL5. Pode-se observar, especialmente no perfil do componente R_{33} que há uma extrapolação dos valores dos componentes, apesar de uma ótima reprodução até

que esta extrapolação ocorra. Dessa forma, esta abordagem é descartada, apesar de representar o melhor resultado até o momento.

4.6.2 Segunda Abordagem

A segunda abordagem testada consiste em propor para S_{ij} três parâmetros, conforme a equação (4.6.21) e para R_{ijp} apenas o parâmetro a_2^1 que traz a diferenciação na correlação para os momentos triplos R_{222} e R_{233}, resultando na equação (4.6.22). A idéia é testar os três parâmetros mais simples possíveis para o termo S_{ij}.

$$S_{ij} = b_0^0 \delta_{ij} + b_0^2 v_i v_j + b_1^0 R_{ij} \tag{4.6.21}$$

$$R_{ijp} = a_2^1 [v_l R_{il} R_{jp} + v_l R_{lp} R_{ij} + v_l R_{lj} R_{ip}] \tag{4.6.22}$$

Aplicando estas correlações nas equações (4.6.1) a (4.6.4), nota-se que as equações para (2,2) e (3,3) são idênticas às equações (4.6.8) e (4.6.9). Assim, precisa-se apenas reescrever as equações para as posições (1,1) e (1,2):

$$(1,1) \quad b_0^0 + b_0^2 v_1^2 + b_1^0 R_{11} = 2 \frac{d}{dx_2} \left[R_{12} v_1 + 3 a_2^1 R_{11} R_{12} v_1 \right] \tag{4.6.23}$$

$$(1,2) \quad b_1^0 R_{12} = \frac{d}{dx_2} \left[R_{22} v_1 + 2 a_2^1 v_1 (R_{11} R_{22} + 2 R_{12}^2) \right] \tag{4.6.24}$$

Assim, os sistemas lineares para calcular os parâmetros e recalcular os componentes do tensor de Reynolds precisam ser redefinidos.

Na realidade, apenas o sistema para calcular os parâmetros precisa ser redefinido, pois o sistema para recalcular os componentes do tensor de Reynolds permanece com a mesma forma do sistema (4.6.16), com alterações apenas em B_1 e B_4.

Deve-se notar que, como as equações (4.6.8) e (4.6.9) não sofreram alteração com a mudança da correlação dos termos turbulentos, os termos I_2, I_3, B_2 e B_3 expressos

nas equações (4.6.13), (4.6.14), (4.6.18) e (4.6.19), respectivamente, não foram alterados.

Deve-se ainda observar que o termo I_1 também não sofreu alteração, permanecendo como expresso na equação (4.6.12), bastando se redefinir os novos I_4, B_1 e B_4.

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{R_{11}}{2} & \frac{v_1^2}{2} & -3v_1R_{11}R_{12} \\ \frac{1}{6} & \frac{R_{22}}{6} & 0 & -v_1R_{12}R_{22} \\ \frac{1}{2} & \frac{R_{33}}{2} & 0 & -v_1R_{12}R_{33} \\ 0 & \frac{R_{12}}{2} & 0 & -v_1(R_{11}R_{22}+2R_{12}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_1^0 \\ b_0^2 \\ \frac{da_2^1}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} \tag{4.6.25}$$

Onde:

$$I_4 = \frac{v_1}{2}\frac{dR_{22}}{dx_2} + \frac{R_{22}}{2}\frac{dv_1}{dx_2} + a_2^1\left[(R_{11}R_{22}+2R_{12}^2)\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + 4R_{12}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \tag{4.6.26}$$

$$B_1 = \frac{b_0^0}{2} + \frac{b_1^0}{2}R_{11} + \frac{b_0^2}{2} - 3R_{11}R_{12}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12} + 3R_{11}R_{12}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.27}$$

$$B_4 = \frac{b_1^0}{2}R_{12} - (R_{11}R_{22}+2R_{12}^2)v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[\frac{R_{22}}{2} + (R_{11}R_{22}+2R_{12}^2)a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.28}$$

Toda a metodologia descrita para a Primeira Abordagem, no item 4.6.1, foi mantida, porém testou-se apenas o arquivo de DNS WL1. Ao observar os resultados deste arquivo, notou-se que além de um perfil significativamente pior para os parâmetros, a resposta ao teste da identidade dos sistemas (4.6.25) e (4.6.16) foi extremamente parecido com os resultados da primeira abordagem que então, pelo mesmo motivo, descartaram esta segunda abordagem.

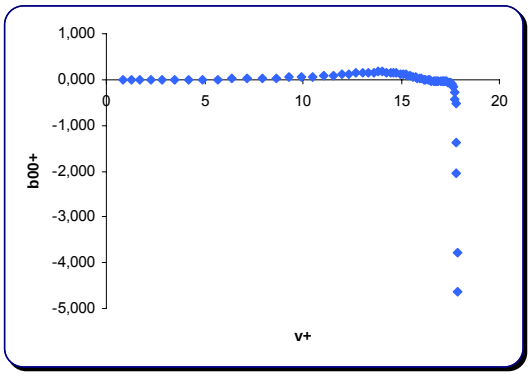


Figura 4.39 – Perfil do parâmetro b_0^{0+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25).

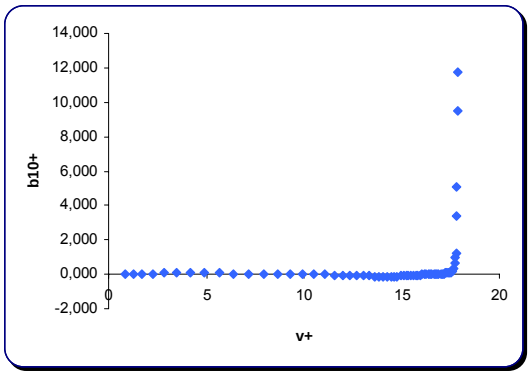


Figura 4.40 – Perfil do parâmetro b_1^{0+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25).

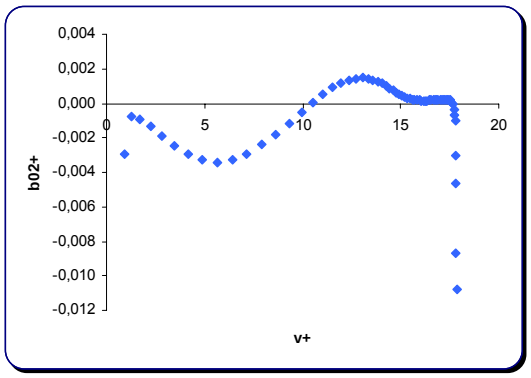


Figura 4.41 – Perfil do parâmetro b_0^{2+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25).

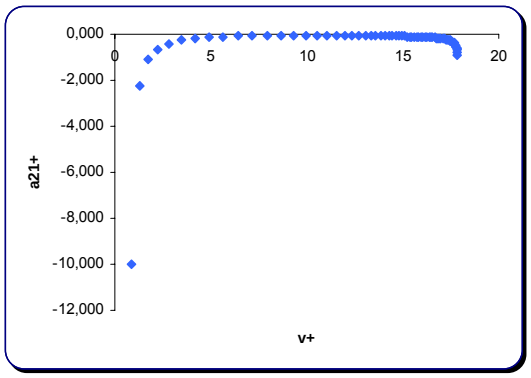


Figura 4.42 – Perfil do parâmetro a_2^{1+} para o arquivo de DNS WL1 para o sistema (4.6.25).

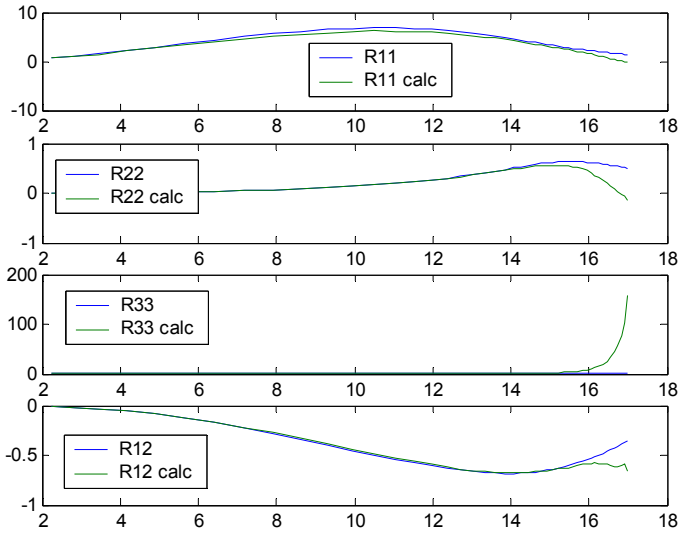


Figura 4.43 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.25) e (4.6.16) para o arquivo de DNS WL1. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

4.6.3 Terceira Abordagem

Diante do resultado anterior, decidiu-se não mais tentar termos com as variáveis R_{ij} e v elevadas ao quadrado, uma vez que estes termos sempre levam a parâmetros com grandes extrapolações no centro do tubo o que foge do controle da modelagem. Esta conclusão está respaldada também nos resultados obtidos no item 4.5 deste trabalho onde todas os possíveis parâmetros para a correlação do termo S_{ij} foram testados e notou-se que quanto mais "elaborado" o termo posterior ao parâmetro, pior para modelagem seu perfil.

Na abordagem anterior, testou-se um esquema com três parâmetros para o termo S_{ij} e apenas um parâmetro para o termo R_{ijp}. Assim, nesta abordagem, será testado o esquema onde há três parâmetros para R_{ijp} e apenas 1 parâmetro para S_{ij}.

As expressões para S_{ij} e R_{ijp} seguem abaixo:

$$S_{ij} = b_1^0 R_{ij} \tag{4.6.29}$$

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij}v_p + \delta_{jp}v_i + \delta_{pi}v_j] + a_1^1[R_{ij}v_p + R_{ip}v_j + R_{jp}v_i] + a_2^1[v_l R_{il} R_{jp} + v_l R_{lp} R_{ij} + v_l R_{lj} R_{ip}] \quad (4.6.30)$$

Estas expressões, quando aplicadas nas equações (4.6.1) a (4.6.4), novamente apresentam equações novas para as posições (1,1) e (1,2) e "repetem" as equações (4.6.8) e (4.6.9) para as posições (2,2) e (3,3).

$$(1,1) \quad b_1^0 R_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1(1+2a_1^1) + 3a_2^1 R_{11}R_{12}v_1\right] \quad (4.6.31)$$

$$(1,2) \quad b_1^0 R_{12} = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1(1+2a_1^1) + 2a_0^1 v_1 + 2a_2^1 v_1(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)\right] \quad (4.6.32)$$

O sistema para a determinação do perfil dos parâmetros segue abaixo com as novas versões dos termos I1 e I4. Os termos I2 e I3 permanecem como nas equações (4.6.13) e (4.6.14) respectivamente.

$$\begin{bmatrix} \frac{R_{11}}{2} & 0 & -2R_{12}v_1 & -3v_1R_{11}R_{12} \\ \frac{R_{22}}{6} & 0 & 0 & -v_1R_{12}R_{22} \\ \frac{R_{33}}{2} & 0 & 0 & -v_1R_{12}R_{33} \\ \frac{R_{12}}{2} & -v & -R_{22}v_1 & -v_1(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^0 \\ \frac{da_0^1}{dx_2} \\ \frac{da_1^1}{dx_2} \\ \frac{da_2^1}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} \quad (4.6.33)$$

Onde

$$I_1 = \left[v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2}\right](1+2a_1^1) + 3a_2^1\left[R_{11}R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2}\right] \quad (4.6.34)$$

$$I_4 = \left[\frac{v_1}{2}\frac{dR_{22}}{dx_2} + \frac{R_{22}}{2}\frac{dv_1}{dx_2}\right](1+2a_1^1) + a_0^1\frac{dv_1}{dx_2} + a_2^1\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + 4R_{12}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \quad (4.6.35)$$

A princípio, neste momento seria apresentado o sistema para o recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, porém após o resultado dos perfis dos parâmetros, este se torna desnecessário. Para os quatro arquivos de DNS testados, obteve-se um resultado inesperado: os parâmetros b_0^0 e a_2^1 apresentaram valor constante e igual a

zero! Este resultado simplesmente inviabiliza continuar esta abordagem uma vez que o parâmetro a_2^1 anula totalmente do sistema os componentes R_{11} e R_{33}.

Diante deste resultado, não se pôde deixar de confirmar que se S_{ij} fosse definido pela equação (4.6.36) o resultado seria o mesmo. A hipótese foi confirmada.

$$S_{ij} = b_0^0 \delta_{ij} \tag{4.6.36}$$

4.6.4 Quarta Abordagem

Uma vez que não se deseja testar novas alternativas para o termo S_{ij}, por motivos já explicados no item 4.6.3, as possibilidades de modificação das correlações para o primeiro nível do fechamento estariam esgotadas.

Porém, observando-se a equação (3.5.1) novamente, percebe-se que é possível propor uma nova combinação de índices para os termos que sucedem o parâmetro a_1^1 de modo que este não venha a zerar para as posições (2,2) e (3,3). Intuitivamente, pode-se pensar que esta solução pode realmente apresentar melhores perfis de parâmetros uma vez que para a_1^1, não haverá (pelo princípio de numeração dos índices) variáveis (R_{ij} e/ou v) elevadas ao quadrado.

Assim, pode-se propor uma nova abordagem, onde S_{ij} permanece com as correlações lineares conforme expresso na equação (4.2.2) e R_{ijp} apresenta o termo a_0^1, o mais simples, e os novos termos do parâmetro a_1^1, conforme abaixo:

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij} v_p + \delta_{jp} v_i + \delta_{pi} v_j] + a_1^1[v_l R_{il} \delta_{jp} + v_l R_{pl} \delta_{ij} + v_l R_{jl} \delta_{ip}] \tag{4.6.37}$$

Aplicando então as correlações propostas para S_{ij} e R_{ijp} nesta abordagem nas equações (4.6.1) a (4.6.4), chega-se a um conjunto de quatro novas equações:

$$(1,1)\quad b_0^0 + b_1^0 R_{11} = 2\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}v_1 + a_1^1 R_{12}v_1\right] \tag{4.6.38}$$

$$(2,2)\quad b_0^0 + b_1^0 R_{22} = 6\frac{d}{dx_2}\left[a_1^1 R_{12}v_1\right] \tag{4.6.39}$$

$$(3,3)\quad b_0^0 + b_1^0 R_{33} = 2\frac{d}{dx_2}\left[a_1^1 R_{12}v_1\right] \tag{4.6.40}$$

$$(1,2)\quad b_1^0 R_{12} = \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}v_1 + 2a_0^1 v_1 + 2a_1^1 R_{11}v_1\right] \tag{4.6.41}$$

O conjunto de equações acima deve ser organizado na forma dos dois sistemas lineares, um para a determinação do perfil dos parâmetros e outro para o recálculo dos componentes do tensor de Reynolds. Seguem os sistemas:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{R_{11}}{2} & 0 & -R_{12}v_1 \\ \frac{1}{6} & \frac{R_{22}}{6} & 0 & -R_{12}v_1 \\ \frac{1}{2} & \frac{R_{33}}{2} & 0 & -R_{12}v_1 \\ 0 & \frac{R_{12}}{2} & -v_1 & -R_{11}v_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_1^0 \\ \frac{da_0^1}{dx_2} \\ \frac{da_1^1}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} \tag{4.6.42}$$

Onde

$$I_1 = \left[v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2}\right](1 + a_1^1) + R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} \tag{4.6.43}$$

$$I_2 = \left[v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2}\right]a_1^1 + R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} \tag{4.6.44}$$

$$I_3 = \left[v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2}\right]a_1^1 + R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} \tag{4.6.45}$$

$$I_4 = \frac{v_1}{2}\frac{dR_{22}}{dx_2} + \frac{R_{22}}{2}\frac{dv_1}{dx_2} + a_0^1\frac{dv_1}{dx_2} + a_1^1\left[v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + R_{11}\frac{dv_1}{dx_2}\right] \tag{4.6.46}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & v_1(1+a_1^1) \\ 0 & 0 & 0 & v_1 a_1^1 \\ 0 & 0 & -\frac{b_1^0}{2} & v_1 a_1^1 \\ v_1 a_1^1 & \frac{v_1}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dR_{11}}{dx_2} \\ \frac{dR_{22}}{dx_2} \\ \frac{dR_{33}}{dx_2} \\ \frac{dR_{12}}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{bmatrix} \tag{4.6.47}$$

Onde:

$$B_1 = \frac{b_0^0}{2} + \frac{b_1^0}{2} R_{11} - R_{12} v_1 \frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12}(1+a_1^1)\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.48}$$

$$B_2 = \frac{b_0^0}{6} + \frac{b_1^0}{6} R_{22} - R_{12} v_1 \frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12} a_1^1 \frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.49}$$

$$B_3 = \frac{b_0^0}{2} - R_{12} v_1 \frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12} a_1^1 \frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.50}$$

$$B_4 = \frac{b_1^0}{2} R_{12} - v_1 \frac{da_0^1}{dx_2} - v_1 R_{11} \frac{da_1^1}{dx_2} - \left[\frac{R_{22}}{2} + a_0^1 + R_{11} a_1^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.51}$$

Antes mesmo de se iniciar os cálculos, pode-se perceber que esta abordagem não funcionará. Inicialmente, pelo conjunto de equações (4.6.38) a (4.6.41), o fato de não aparecer o componente R_{33} na derivada chama a atenção para o fato de que ter-se-ia que resolver um sistema de equações diferenciais apenas para os três outros componentes do tensor de Reynolds, porém isto ainda não seria em si um problema. Porém, o fato de as expressões de I_2 e I_3 nas equações (4.6.44) e (4.6.45) serem idênticas, gera uma preocupação com o sistema (4.6.47), justificada: duas linhas linearmente dependentes que tornam este sistema sem solução.

4.6.5 Quinta Abordagem

Com o resultado anterior, conclui-se que para se ter um conjunto de equações que propicie linhas linearmente independentes e que ainda implique em correlações distintas para R_{222} e R_{233}, deve-se ter na correlação do termo R_{ijp}, o parâmetro a_2^1 redefinido, conforme as Abordagens 1, 2, e 3 tratadas nos itens 4.6.1, 4.6.2 e 4.6.3.

Assim, esta abordagem visa testar a correlação linear para o termo S_{ij} (equação (4.2.2)) e ambos os termos redefinidos para os parâmetros a_1^1 e a_2^1, de modo que a expressão para R_{ijp} fica:

$$R_{ijp} = a_1^1[v_l R_{il}\delta_{jp} + v_l R_{pl}\delta_{ij} + v_l R_{jl}\delta_{ip}] + a_2^1[v_l R_{il} R_{jp} + v_l R_{lp} R_{ij} + v_l R_{lj} R_{ip}] \quad (4.6.52)$$

Aplicando estas correlações nas equações (4.6.1) a (4.6.4), chega-se a um conjunto de equações que fornecem os seguintes sistemas lineares para cálculo do perfil dos parâmetros e recálculo dos componentes do tensor de Reynolds:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{R_{11}}{2} & -R_{12}v_1 & -3R_{11}R_{12}v_1 \\ \frac{1}{6} & \frac{R_{22}}{6} & -R_{12}v_1 & -R_{12}R_{22}v_1 \\ \frac{1}{2} & \frac{R_{33}}{2} & -R_{12}v_1 & -R_{12}R_{33}v_1 \\ 0 & \frac{R_{12}}{2} & -R_{11}v_1 & -v_1(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^0 \\ b_1^0 \\ \frac{da_1^1}{dx_2} \\ \frac{da_2^1}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} \quad (4.6.53)$$

Onde

$$I_1 = \left[v_1 \frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} \right](1 + a_1^1) + +3a_2^1 \left[R_{11}R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} \right] \quad (4.6.54)$$

$$I_2 = \left[v_1 \frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} \right] a_1^1 + a_2^1 \left[R_{12}R_{22}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} \right] \quad (4.6.55)$$

$$I_3 = \left[v_1 \frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dv_1}{dx_2} \right] a_1^1 + a_2^1 \left[R_{12}R_{33}\frac{dv_1}{dx_2} + R_{12}v_1\frac{dR_{33}}{dx_2} + R_{33}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2} \right] \quad (4.6.56)$$

$$I_4 = \frac{v_1}{2}\frac{dR_{22}}{dx_2} + \frac{R_{22}}{2}\frac{dv_1}{dx_2} + a_1^1\left[v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + R_{11}\frac{dv_1}{dx_2}\right] + a_2^1\left[(R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + 4R_{12}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \quad (4.6.57)$$

$$\begin{bmatrix} \underbrace{3a_2^1R_{12}v_1}_{A11} & 0 & 0 & \underbrace{v_1(1+a_1^1) + 3a_2^1R_{11}v_1}_{A14} \\ 0 & \underbrace{a_2^1R_{12}v_1}_{A22} & 0 & \underbrace{v_1a_1^1 + a_2^1R_{22}v_1}_{A24} \\ 0 & 0 & \underbrace{a_2^1R_{12}v_1}_{A33} & \underbrace{v_1a_1^1 + a_2^1R_{33}v_1}_{A34} \\ \underbrace{v_1a_1^1 + a_2^1R_{22}v_1}_{A41} & \underbrace{\frac{v_1}{2} + a_2^1R_{11}v_1}_{A42} & 0 & \underbrace{4a_2^1R_{12}v_1}_{A44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dR_{11}}{dx_2} \\ \frac{dR_{22}}{dx_2} \\ \frac{dR_{33}}{dx_2} \\ \frac{dR_{12}}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{bmatrix} \quad (4.6.58)$$

Onde:

$$B_1 = \frac{b_0^0}{2} + \frac{b_1^0}{2}R_{11} - R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - 3R_{11}R_{12}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12}(1+a_1^1) + 3R_{11}R_{12}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \quad (4.6.59)$$

$$B_2 = \frac{b_0^0}{6} + \frac{b_1^0}{6}R_{22} - R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12}R_{22}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12}a_1^1 + R_{12}R_{22}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \quad (4.6.60)$$

$$B_3 = \frac{b_0^0}{2} + \frac{b_1^0}{2}R_{33} - R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12}R_{33}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12}a_1^1 + R_{12}R_{33}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \quad (4.6.61)$$

$$B_4 = \frac{b_1^0}{2}R_{12} - R_{11}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[\frac{R_{22}}{2} + R_{11}a_1^1 + (R_{11}R_{22} + 2R_{12}^2)a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \quad (4.6.62)$$

Conforme já havia sido comentado anteriormente, programou-se em Matlab de modo que os parâmetros sejam calculados de forma discreta e reutilizados para recalcular os componentes do tensor de Reynolds do mesmo arquivo de DNS que os gerou, testando assim a identidade dos sistemas, neste caso, (4.6.53) e (4.6.58).

Conforme já havia sido dito, para que o Matlab consiga executar e resolver o sistema para a determinação dos perfis dos parâmetros, é necessário excluir os pontos mais próximos à parede, onde os valores de R_{ij} e v são muito próximos de zero. Dessa forma, o sistema para recálculo dos componentes do tensor de Reynolds é resolvido a partir deste mesmo vetor posição x_2 com as primeiras posições excluídas. O que ocorre é que o Matlab não roda e não imprime nenhum resultado.

Em nível de teste, decidiu-se retirar mais algumas posições iniciais do vetor posição x_2 para ver se o Matlab seria capaz então de recalcular os componentes do tensor de Reynolds. O que ocorre é que o Matlab imprime um resultado, porém referente às únicas duas integrações que conseguiu realizar. Retirando-se mais algumas posições do vetor posição x_2, novamente o Matlab imprime um resultado, porém só consegue realizar 6 integrações.

O que está se observando é que provavelmente o determinante deste sistema está oscilando em torno do zero e por isso o Matlab "se perde" nas integrações, pois a cada ponto em o determinante cruza o zero, os valores dos componentes do tensor de Reynolds extrapolam. Dessa forma, esta abordagem também é descartada.

4.6.6 Sexta Abordagem

Apesar da abordagem anterior não ter tido sucesso, acredita-se que ainda se deve testar outras combinações de correlações para os termos turbulentos S_{ij} e R_{ijp} de modo que R_{ijp} tenha ambos os parâmetros cujos termos posteriores foram modificados, a_1^1 e a_2^1.

Assim, propôs-se para esta sexta abordagem, a seguinte correlação para S_{ij} e R_{ijp}: S_{ij} será apenas função do parâmetro b_1^0, estando expresso na equação (4.6.29) e R_{ijp} assumirá a seguinte forma:

$$R_{ijp} = a_0^1[\delta_{ij}v_p + \delta_{jp}v_i + \delta_{pi}v_j] + a_1^1[v_l R_{il}\delta_{jp} + v_l R_{pl}\delta_{ij} + v_l R_{jl}\delta_{ip}] + a_2^1[v_l R_{il} R_{jp} + v_l R_{lp} R_{ij} + v_l R_{lj} R_{ip}] \quad (4.6.63)$$

O conjunto de equações resultante da aplicação destas correlações nas equações (4.6.1) a (4.6.4) dá origem ao sistema (4.6.64) para a determinação dos perfis dos parâmetros, onde os termos I_1, I_2 e I_3 são idênticos aos descritos nas equações (4.6.54), (4.6.55) e (4.6.56) respectivamente. Para recálculo dos componentes do tensor de

Reynolds, o sistema resultante desta abordagem é idêntico ao sistema (4.6.58), porém com novas expressões para os termos B_1, B_2, B_3 e B_4 expressas nas equações (4.6.66), (4.6.67), (4.6.68) e (4.6.69), respectivamente.

$$\begin{bmatrix} \frac{R_{11}}{2} & 0 & -R_{12}v_1 & -3v_1R_{11}R_{12} \\ \frac{R_{22}}{6} & 0 & -R_{12}v_1 & -v_1R_{12}R_{22} \\ \frac{R_{33}}{2} & 0 & -R_{12}v_1 & -v_1R_{12}R_{33} \\ \frac{R_{12}}{2} & -v & -R_{11}v_1 & -v_1(R_{11}R_{22}+2R_{12}^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^0 \\ \frac{da_0^1}{dx_2} \\ \frac{da_1^1}{dx_2} \\ \frac{da_2^1}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{bmatrix} \tag{4.6.64}$$

Onde

$$I_4 = \frac{v_1}{2}\frac{dR_{22}}{dx_2} + \frac{R_{22}}{2}\frac{dv_1}{dx_2} + a_0^1\frac{dv_1}{dx_2} + a_1^1\left[v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + R_{11}\frac{dv_1}{dx_2}\right] + a_2^1\left[(R_{11}R_{22}+2R_{12}^2)\frac{dv_1}{dx_2} + R_{11}v_1\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}v_1\frac{dR_{11}}{dx_2} + 4R_{12}v_1\frac{dR_{12}}{dx_2}\right] \tag{4.6.65}$$

$$B_1 = \frac{b_1^0}{2}R_{11} - R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - 3R_{11}R_{12}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12}(1+a_1^1) + 3R_{11}R_{12}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.66}$$

$$B_2 = \frac{b_1^0}{6}R_{22} - R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12}R_{22}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12}a_1^1 + R_{12}R_{22}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.67}$$

$$B_3 = \frac{b_1^0}{2}R_{33} - R_{12}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - R_{12}R_{33}v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[R_{12}a_1^1 + R_{12}R_{33}a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.68}$$

$$B_4 = \frac{b_1^0}{2}R_{12} - v_1\frac{da_0^1}{dx_2} - R_{11}v_1\frac{da_1^1}{dx_2} - (R_{11}R_{22}+2R_{12}^2)v_1\frac{da_2^1}{dx_2} - \left[\frac{R_{22}}{2} + a_0^1 + R_{11}a_1^1 + (R_{11}R_{22}+2R_{12}^2)a_2^1\right]\frac{dv_1}{dx_2} \tag{4.6.69}$$

O perfil dos parâmetros e o resultado do “teste de identidade”, através do recálculo dos componentes do tensor de Reynolds seguem abaixo. De modo a facilitar e melhorar a visualização do perfil dos parâmetros, os valores discretos destes foram exportados para o programa Excel onde então foram plotados.

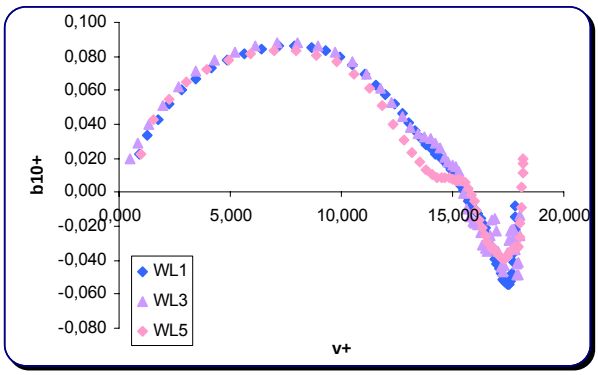


Figura 4.44 – Perfil do parâmetro b_1^{0+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64).

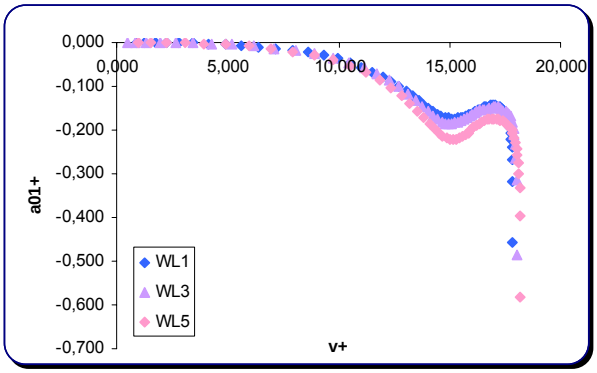


Figura 4.45 – Perfil do parâmetro a_0^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64).

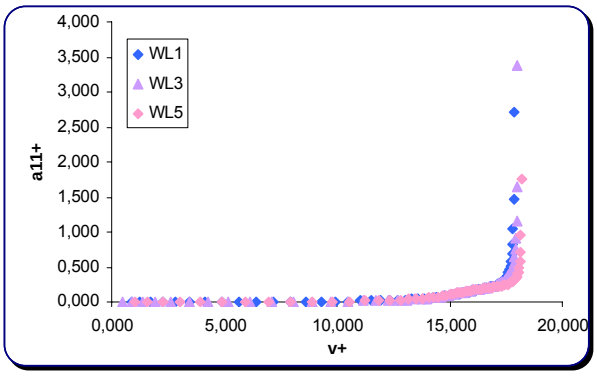


Figura 4.46 – Perfil do parâmetro a_1^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64).

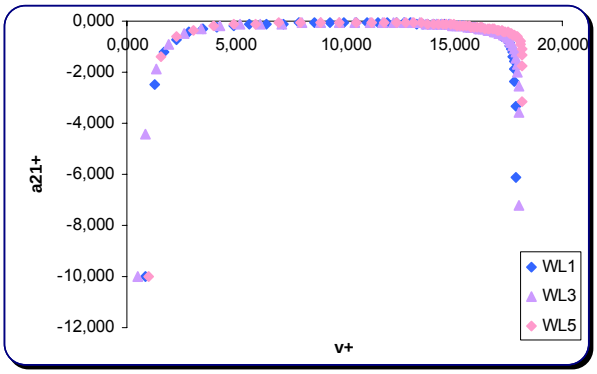


Figura 4.47 – Perfil do parâmetro a_2^{1+} para cada um dos arquivos de DNS para o sistema (4.6.64).

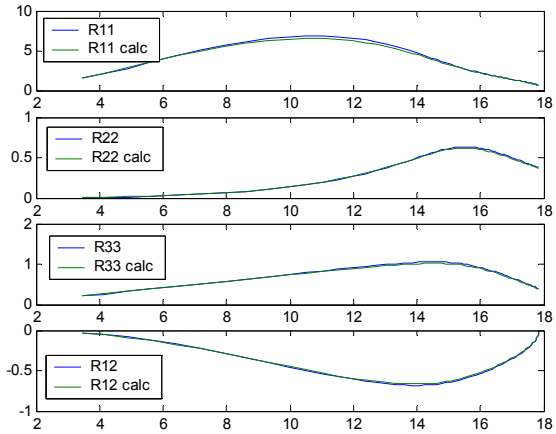


Figura 4.48 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL1. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

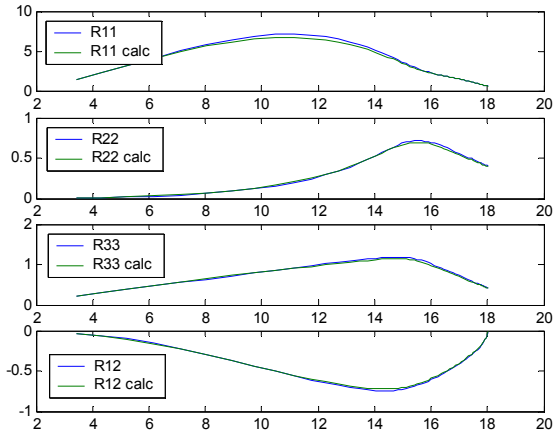


Figura 4.49 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL3. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL3

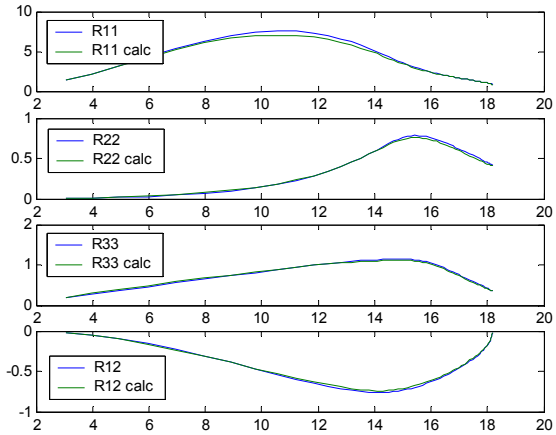


Figura 4.50 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL5. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL5

Pode-se observar que o perfil dos parâmetros não é ideal para a modelagem, porém o recálculo dos componentes do tensor de Reynolds foi realizado com sucesso para todos os quatro arquivos de DNS.

Deve-se ressaltar que para obter o resultado acima foi necessário excluir algumas posições do vetor posição x_2, aproximadamente até $y^+ \sim 3$. Se estas posições não são retiradas, o comportamento do recalculo dos componentes do tensor de Reynolds varia de arquivo para arquivo de DNS: para uns, ele recalcula bem todos os componentes, exceto o R_{33}, como na Figura 4.51 para o arquivo WL1; ara outros, o Matlab não consegue executar.

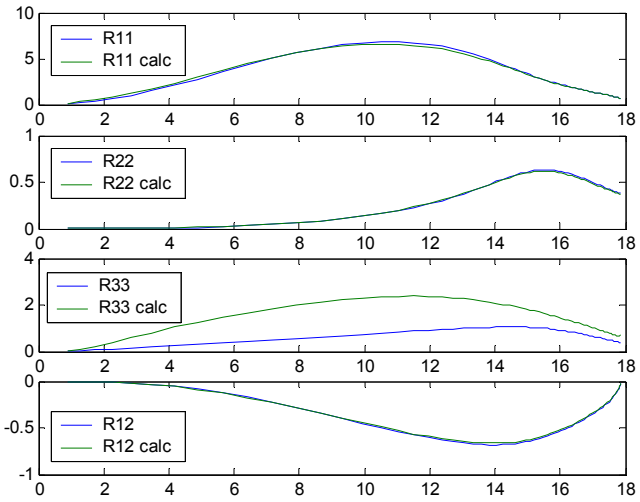


Figura 4.51 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds, testando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58) para o arquivo de DNS WL1, integrando todas as posições do vetor x_2. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

Porém, uma vez definido o início da integração, todas as demais posições do vetor x_2 são integradas até o fim e com reprodução fiel dos componentes do tensor de Reynolds do arquivo de DNS gerador dos parâmetros, conforme se pode notar nas Figura 4.48 a Figura 4.50, validando a identidade dos sistemas (4.6.64) e (4.6.58).

4.7 Determinação dos Parâmetros do Novo Modelo de Turbulência

A determinação dos parâmetros do novo modelo de turbulência proposto por Alfradique e Telles (2006) consiste na modelagem do perfil destes parâmetros que se encontram ilustrados nas Figura 4.44 a Figura 4.47.

Conforme se pode notar nas Figura 4.44 a Figura 4.47, os parâmetros não apresentam um perfil de modelagem simples, especialmente pelo comportamento dos parâmetros no centro do escoamento (maiores valores da velocidade adimensional).

O grau de precisão do ajuste dos parâmetros será determinado através do recálculo dos componentes do tensor de Reynolds para um único arquivo de DNS, WL1, utilizando os parâmetros modelados.

A primeira modelagem proposta foi uma modelagem grosseira, através de polinômios. Grosseira porque, conforme se pode observar nas Figura 4.52 a Figura 4.55, o ajuste com polinômio é bastante imperfeito, apesar de o coeficiente de ajuste R^2 atingir valores extremamente razoáveis em alguns casos. Na Tabela 4.4 constam os valores dos coeficientes dos polinômios utilizados e seus respectivos coeficientes de ajuste. O objetivo de testar o recálculo dos componentes do tensor de Reynolds com os parâmetros calculados por estes polinômios é averiguar a sensibilidade do sistema em que se está trabalhando.

Tabela 4.4 – Coeficientes e grau de ajuste dos polinômios que modelam cada parâmetro.

	b_1^0	a_0^1	a_1^1	a_2^1
a_0	4,5998E-07	-	5,9025E-06	-2,7962E-07
a_1	-2,4247E-05	-5,7020E-06	-3,0908E-04	1,6050E-05
a_2	4,8311E-04	2,5601E-04	6,1657E-03	-3,5500E-04
a_3	-4,4914E-03	-3,9821E-03	-5,8143E-02	3,6498E-03
a_4	1,8009E-02	2,3615E-02	2,6094E-01	-1,7277E-02
a_5	-1,3155E-02	-4,3006E-02	-4,8995E-01	3,3470E-02
a_6	2,6559E-02	-	2,6758E-01	-1,8122E-02
R^2	0,949	0,744	0,522	0,941

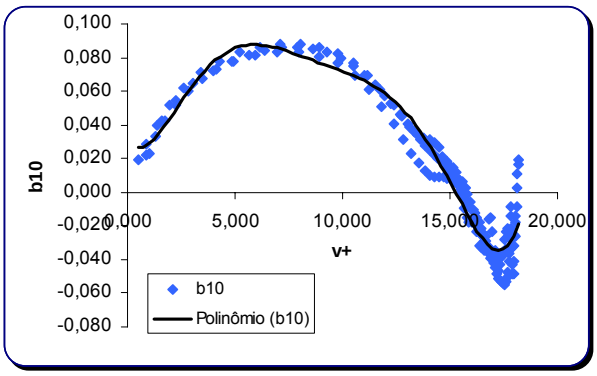


Figura 4.52 – Polinômio ajustado no parâmetro b_1^0.

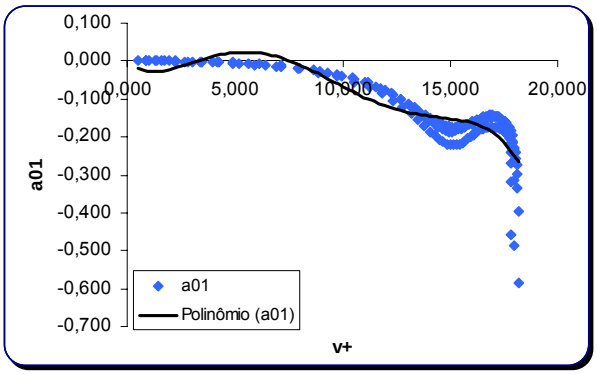


Figura 4.53 – Polinômio ajustado no parâmetro a_0^1.

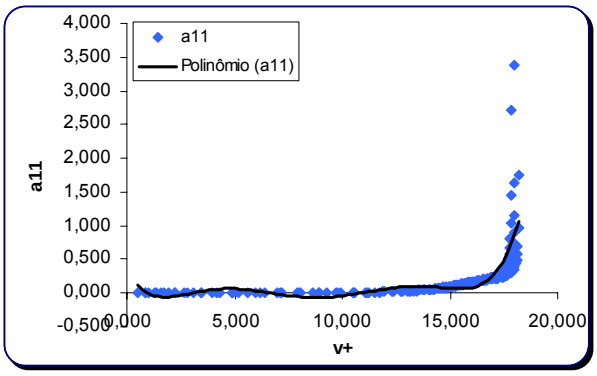


Figura 4.54 – Polinômio ajustado no parâmetro a_1^1.

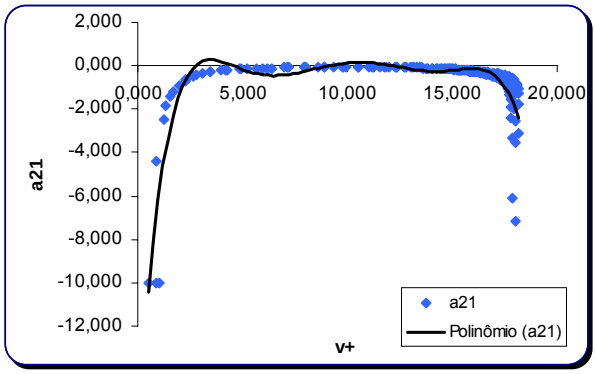


Figura 4.55 – Polinômio ajustado no parâmetro a_2^1.

Elaborou-se um programa em Matlab que então recalculasse os componentes do tensor de Reynolds, utilizando os parâmetros calculados através dos polinômios acima ilustrados em função apenas da velocidade adimensional v^+. A derivada dos parâmetros, foi calculada pela expressão da derivada teórica de cada polinômio.

Porém, o Matlab não foi capaz de recalcular os componentes do tensor de Reynolds por este arquivo que considerava os parâmetros modelados pelos polinômios.

Com o intuito de compreender o que estava ocorrendo no Matlab, decidiu-se fazer um estudo do comportamento e sensibilidade do sistema.

Para isso, elaboraram-se gráficos no Excel para avaliar certos termos que foram definidos apenas com este intuito comparativo. Chamou-se então de I1_param a expressão da primeira linha do resultado da operação matricial do lado esquerdo do sistema (4.6.64), I2_param, a segunda linha e assim por diante. Espera-se que utilizando os parâmetros discretos provenientes do Matlab as curvas Ii e Ii_param (i = 1,2,3,4) sejam praticamente sobrepostas. Dito e feito: os resultados podem ser conferidos abaixo:

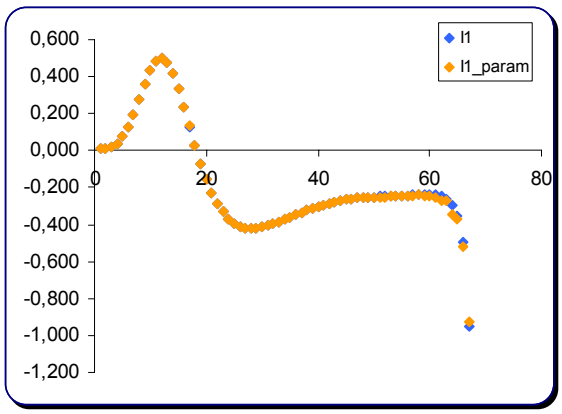


Figura 4.56 – I1 e I1_param com os parâmetros provenientes do Matlab.

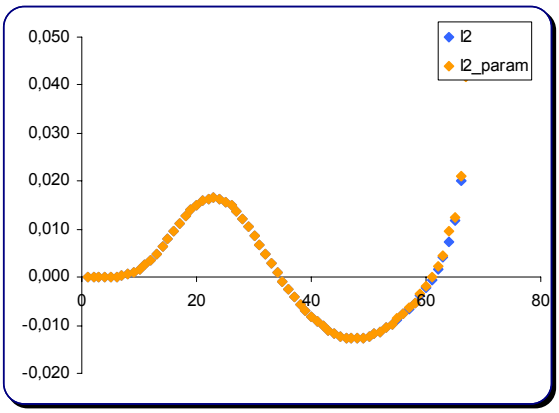


Figura 4.57 – I2 e I2_param com os parâmetros provenientes do Matlab.

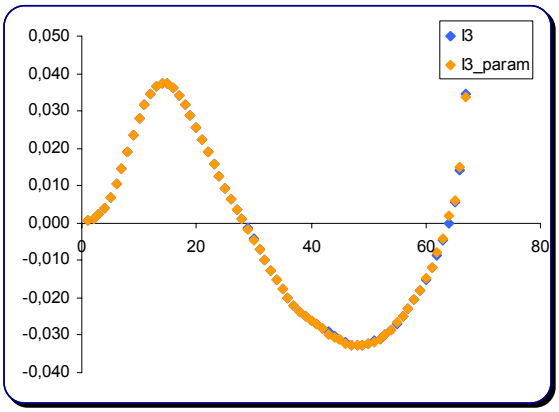


Figura 4.58 – I3 e I3_param com os parâmetros provenientes do Matlab.

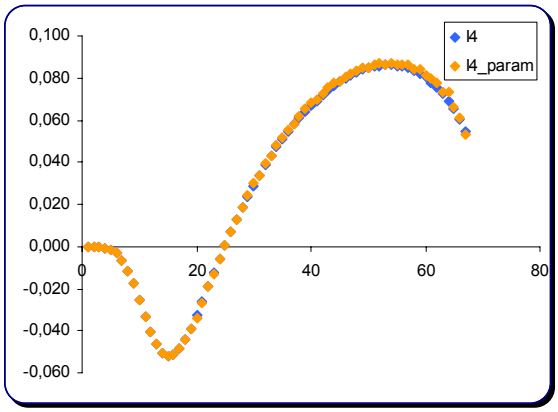


Figura 4.59 – I4 e I4_param com os parâmetros provenientes do Matlab.

O outro termo que foi criado para comparação chamou-se dR_{ij}_calc. O sistema (4.6.58) foi escrito de forma simbólica no Matlab de modo a se obter uma expressão

analítica para cada derivada de cada componente do tensor de Reynolds em função dos parâmetros, da velocidade e dos próprios componentes do tensor de Reynolds. Este resultado será comparado com a derivada de cada componente de tensor de Reynolds proveniente do arquivo de DNS. Novamente, espera-se que para os parâmetros provenientes do Matlab, o ajuste destes termos seja praticamente perfeito, resultado que também pode ser conferido abaixo:

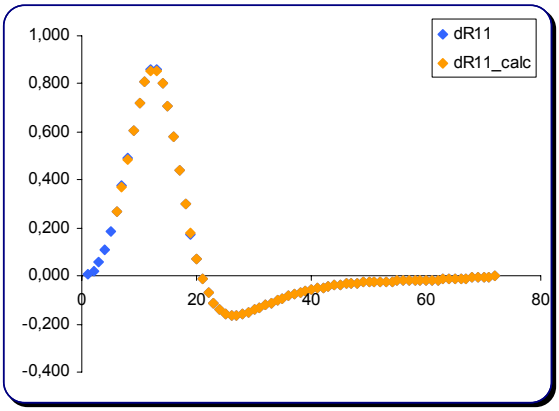


Figura 4.60 – dR_{11} e dR_{11}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab.

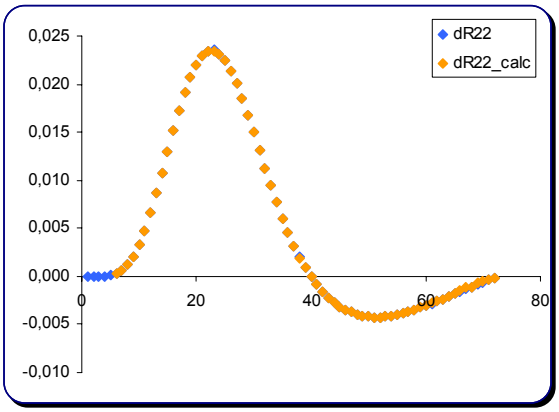


Figura 4.61 – dR_{22} e dR_{22}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab.

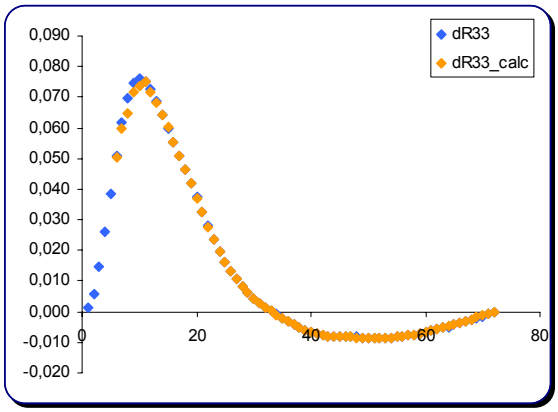


Figura 4.62 – dR_{33} e dR_{33}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab.

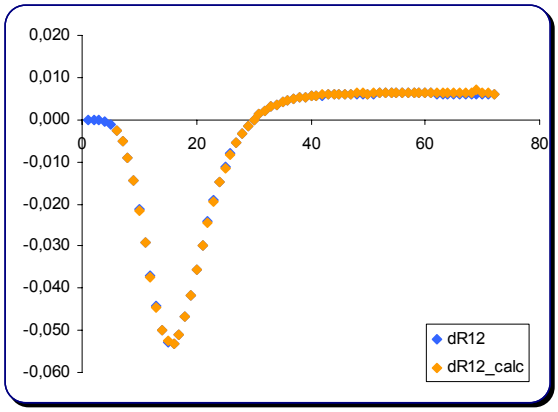


Figura 4.63 – dR_{12} e dR_{12}_calc com os parâmetros provenientes do Matlab.

Apenas a nível de explicação e coerência, deve-se ressaltar que, nas Figura 4.60 a Figura 4.63, os dRij e dRij_calc só não estão sobrepostos nos primeiros pontos (próximo à parede) devido a, nestes primeiros pontos, o Matlab não ter sido capaz de calcular os parâmetros através do sistema (4.6.64), conforme já dito anteriormente.

Agora, a próxima etapa do teste é recalcular os parâmetros Ii_param e dRij_calc com os parâmetros calculados pelos polinômios e verificar quão distantes dos valores esperados Ii e dRij eles ficarão e assim, tentar compreender a não solução resultante do Matlab.

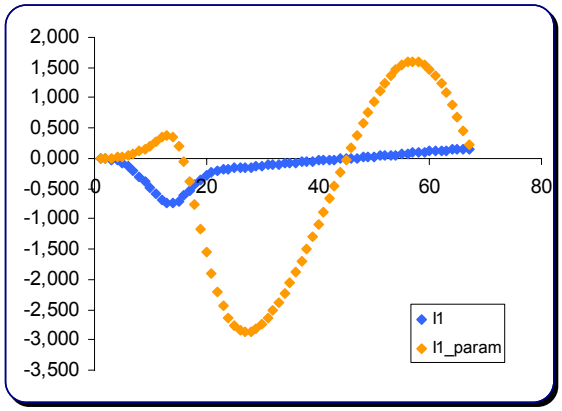


Figura 4.64 – I1 e I1_param com os parâmetros modelados pelo polinômio.

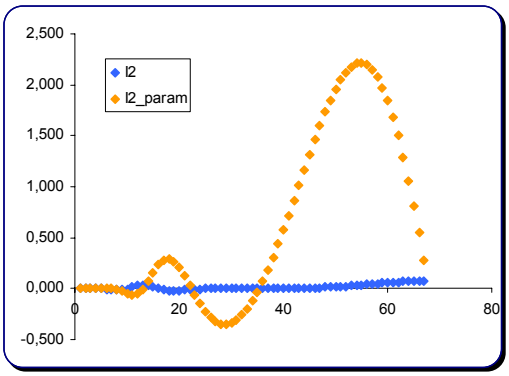


Figura 4.65 – I2 e I2_param com os parâmetros modelados pelo polinômio.

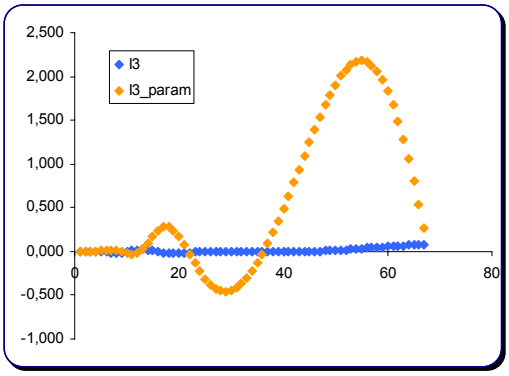


Figura 4.66 – I3 e I3_param com os parâmetros modelados pelo polinômio.

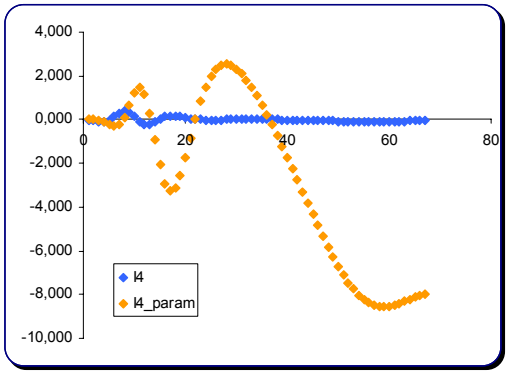


Figura 4.67 – I4 e I4_param com os parâmetros modelados pelo polinômio.

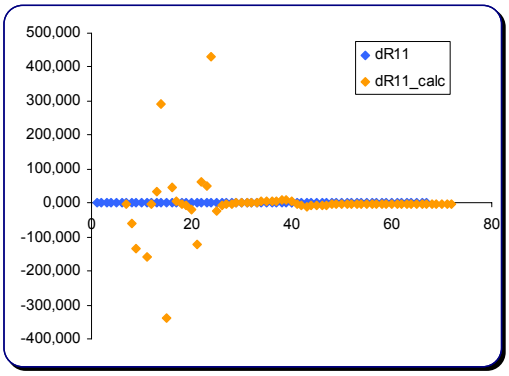


Figura 4.68 – dR_{11} e dR_{11}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio.

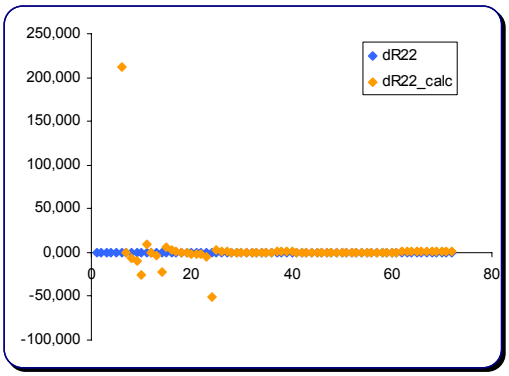


Figura 4.69– dR_{22} e dR_{22}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio.

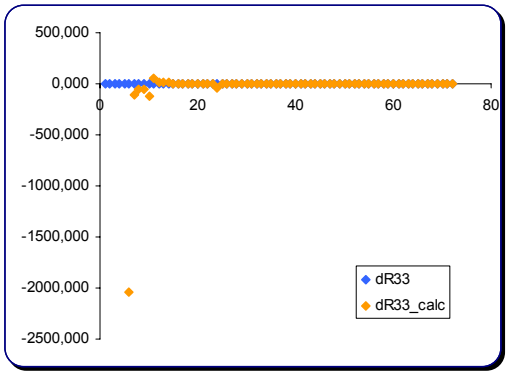


Figura 4.70 – dR_{33} e dR_{33}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio.

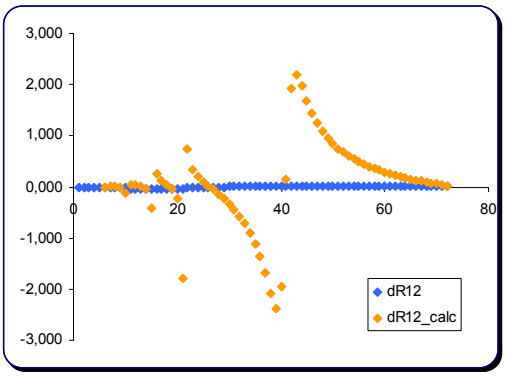


Figura 4.71 – dR_{12} e dR_{12}_calc com os parâmetros modelados pelo polinômio.

Após os últimos resultados, não é mais difícil compreender porque o Matlab não foi capaz de recalcular os componentes do tensor de Reynolds. Além de o mapeamento dos Ii_param's como os Ii's estar completamente deturpado, o perfil dos dRij_calc são "assustadores", prevendo um eventual problema intrínseco ao sistema: sua inversão. Além disso, outra conclusão que se pode extrair dos resultados acima é que o sistema é

extremamente sensível a uma boa modelagem nos parâmetros, uma vez que a modelagem grosseira implicou em respostas totalmente desfavoráveis.

De modo a melhorar o ajuste dos parâmetros, precisa-se decompor o ajuste em faixas da velocidade adimensional, v^+. Assim, inicialmente, propôs-se fazer um ajuste para os parâmetros em duas faixas: $v^+ \leq 17$ e $v^+ > 17$. Porém, percebeu-se que para o parâmetro a_0^1, dever-se-ia fazer um corte também em $v^+ = 15$. O ajuste dos parâmetros para $v^+ \leq 17$ segue abaixo.

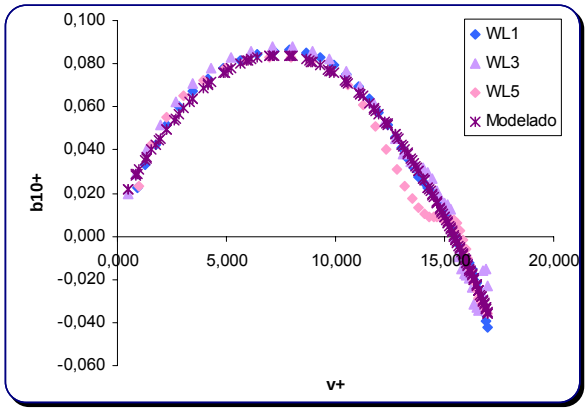


Figura 4.72 – Ajuste do parâmetro b_1^{0+} para $v^+ \leq 17$.

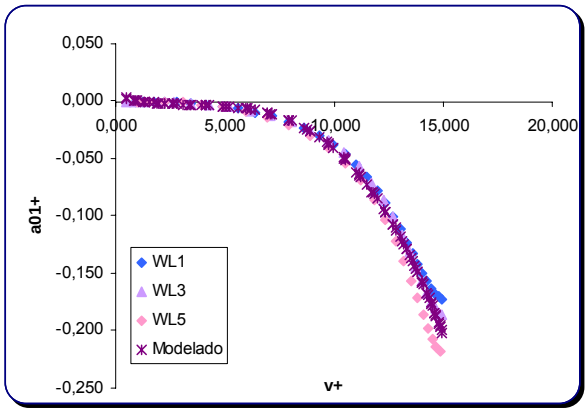


Figura 4.73 –Ajuste do parâmetro a_0^{1+} para $v^+ \leq 15$.

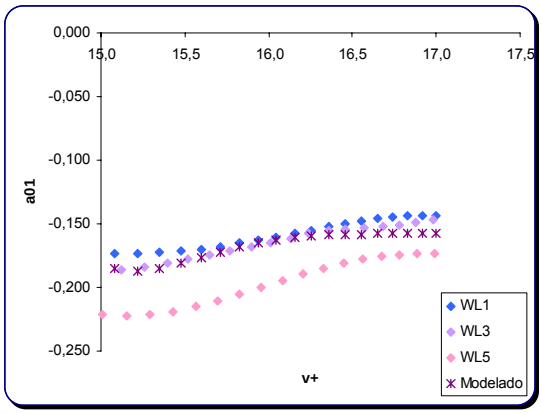


Figura 4.74 – Ajuste do parâmetro a_0^{1+} para $15 \leq v^+ \leq 17$.

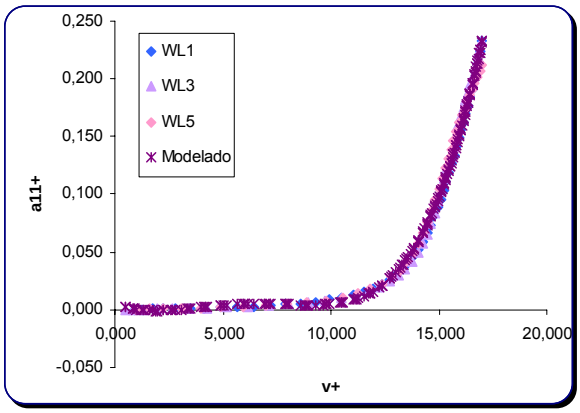


Figura 4.75 – Ajuste do parâmetro a_1^{1+} para $v^+ \leq 17$.

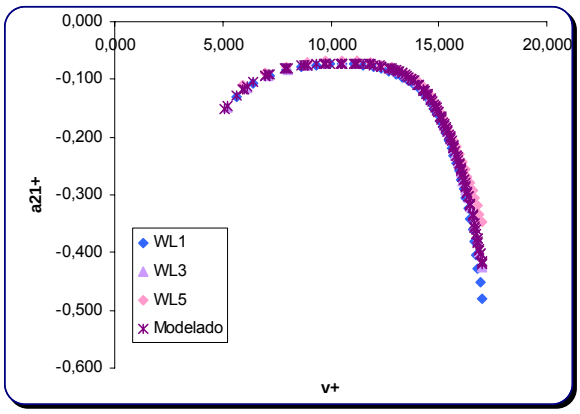


Figura 4.76 – Ajuste do parâmetro a_2^{1+} para $v^+ \leq 17$.

Nesta figura, ocultou-se os valores para v < 5 para melhorar a visualização gráfica.

Pode-se observar que o ajuste dos parâmetros ficou bastante razoável para a primeira faixa de valores de v^+. Os ajustes foram feitos através de polinômios.

Normalmente, o problema de se utilizar polinômios deve-se ao desconhecimento de seu comportamento em faixas não estudadas. Como neste caso, os polinômios serão utilizados numa faixa definida e conhecida de valores, esta preocupação não se justifica.

A princípio, a expressão das derivadas dos parâmetros seria a expressão da derivada destes polinômios. Porém, comparando-se a derivada dos parâmetros provenientes do Matlab com a derivada calculada pela expressão derivada dos polinômios, o ajuste não ficou muito bom, exceto para o parâmetro a_2^1. Assim, as derivadas dos parâmetros a_0^1 e a_1^1 foram modeladas de forma independente, também em faixas de v^+. Os ajustes seguem abaixo.

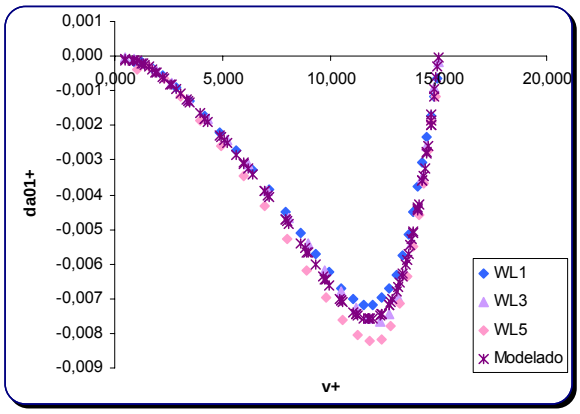


Figura 4.77 – Ajuste da derivada do parâmetro a_0^{1+} para $v^+ \leq 15$.

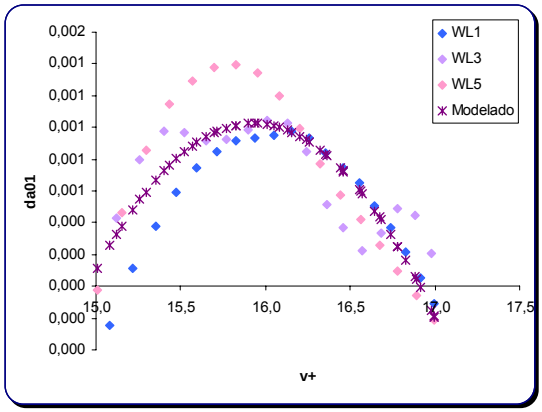


Figura 4.78 – Ajuste da derivada do parâmetro a_0^{1+} para $15 < v^+ < 17$.

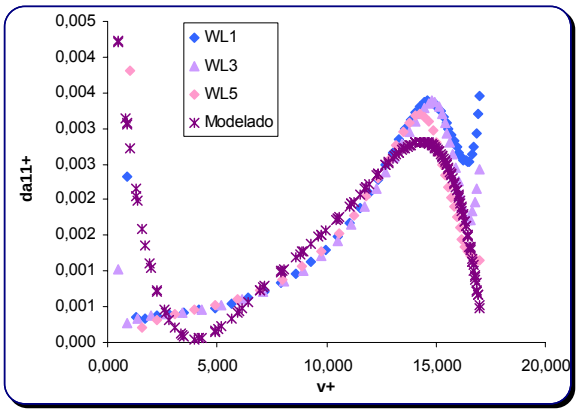


Figura 4.79 – Ajuste da derivada do parâmetro a_1^{1+} para $v^+ \leq 17$.

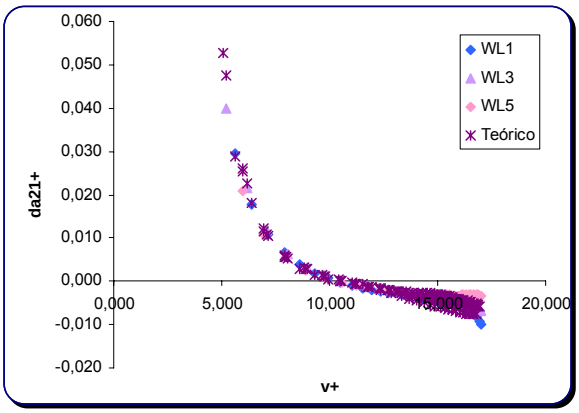


Figura 4.80 – Ajuste da derivada do parâmetro a_2^{1+} para $v^+ \leq 17$.

Feito o ajuste dos parâmetros até $v^+ \leq 17$, pode-se recalcular os termos Ii_param de modo a avaliar se com um ajuste muito mais apropriado, consegue-se reproduzir os termos Ii's. Segue o resultado da comparação.

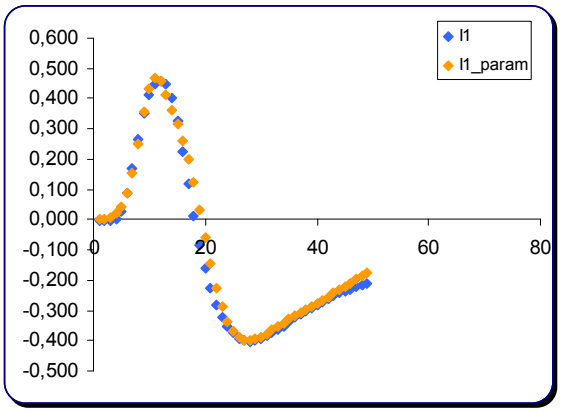


Figura 4.81 – I1 e I1_param para $v^+ \leq 17$ com os parâmetros modelados.

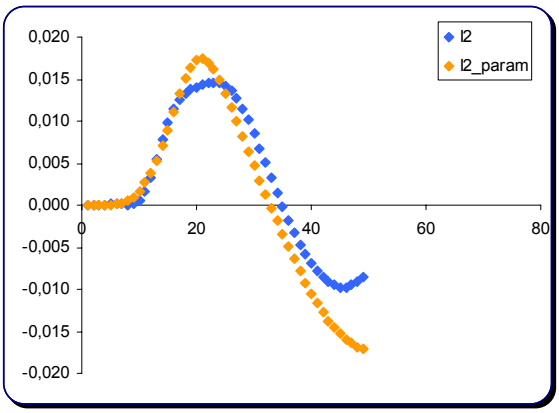


Figura 4.82 – I2 e I2_param para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

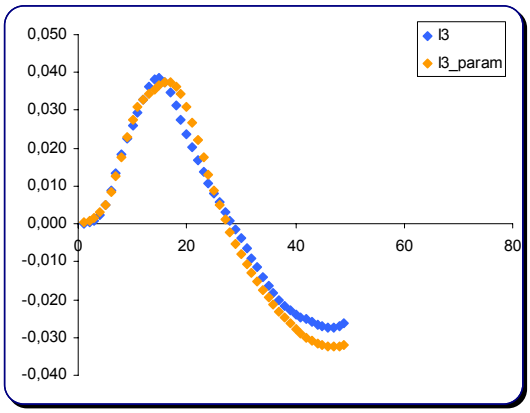


Figura 4.83 – I3 e I3_param para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

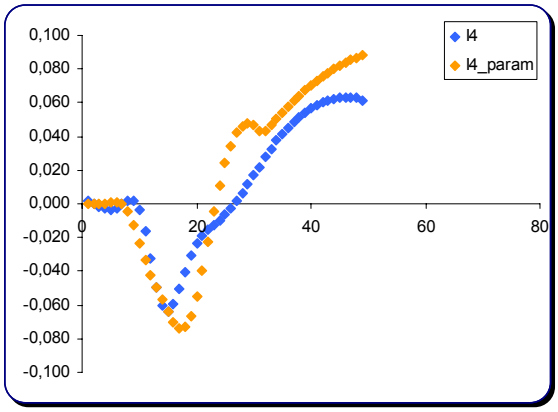


Figura 4.84 – I4 e I4_param para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

Conforme se pode notar, agora, pode-se dizer que os parâmetros estão fielmente ajustados e que os termos Ii's originais não estão mais descaracterizados. Resta avaliar agora o comportamento dos termos dRij_calc para se poder assegurar ou não uma

solução proveniente do Matlab quando os parâmetros forem calculados pelos modelos propostos nas Figura 4.72 a Figura 4.80. Seguem abaixo:

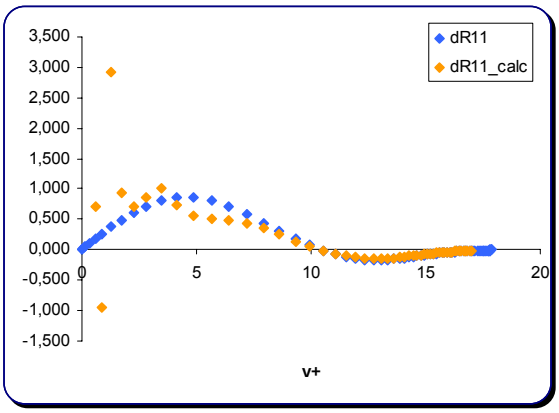


Figura 4.85 – dR_{11} e dR_{11}_calc para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

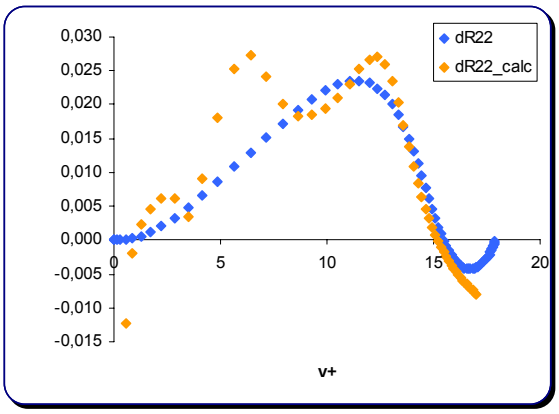


Figura 4.86 – dR_{22} e dR_{22}_calc para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

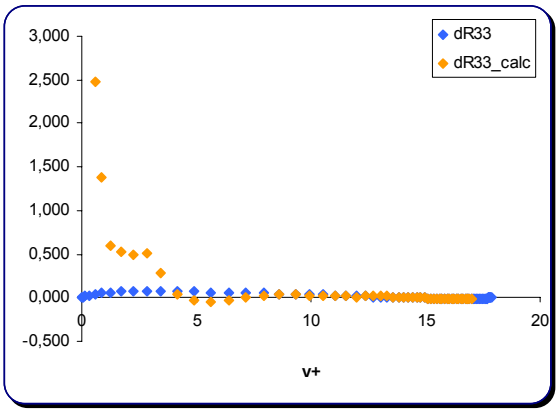


Figura 4.87 – dR_{33} e dR_{33}_calc para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

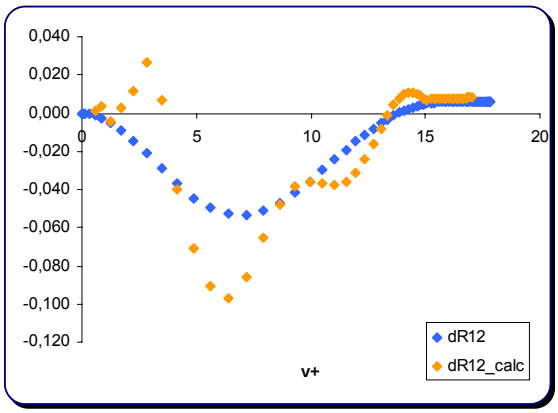


Figura 4.88 – dR_{12} e dR_{12}_calc para v ≤ 17 com os parâmetros modelados.

Os últimos resultados desanimam. Percebe-se que apesar de um ajuste bastante representativo dos parâmetros originais, há um problema de inversão no sistema para baixos valores de y^+ e v^+, ou seja, próximo à parede. De modo a confirmar esta conclusão, traçou-se um gráfico com o denominador das expressões de cada dRij_calc que é, na verdade, o determinante do sistema a menos de um termo da matriz.

Conforme se pode observar na Figura 4.89, próximo à parede (círculo em vermelho), o denominador do sistema é muito próximo de zero, o que o torna suscetível a oscilar, cruzando o eixo e então gerando o comportamento presente nas Figura 4.85 a Figura 4.88.

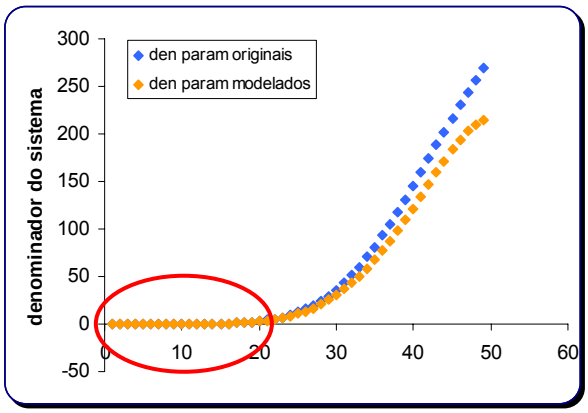


Figura 4.89 – Denominador do Sistema com os parâmetros originais e modelados.

Como o ajuste longe da parede está razoável, resolveu-se mesmo assim tentar fazer o sistema rodar no Matlab. O resultado pode ser observado na Figura 4.90.

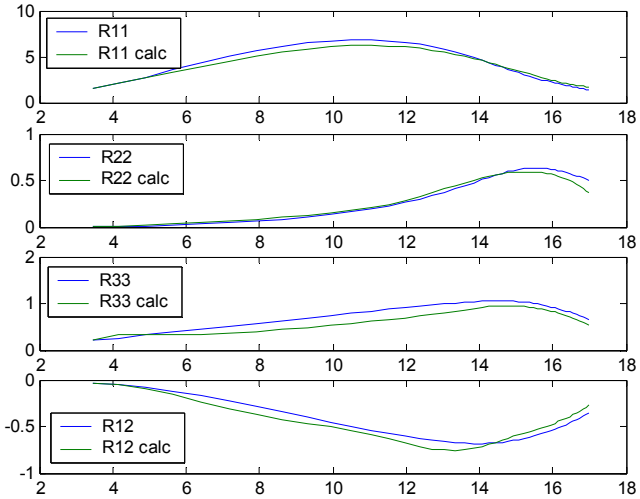


Figura 4.90 – Recálculo dos componentes do tensor de Reynolds do arquivo de DNS WL1 com os parâmetros modelados até $v^+ \leq 17$. Dados de DNS provenientes do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp, em 18/02/06*, arquivo com código CH12__PG.WL1

Este último resultado é extremamente animador: apesar de se conhecer o perfil de dRij_calc pelas Figura 4.85 a Figura 4.88, o Matlab foi capaz de recalcular os componentes do tensor de Reynolds. Deve-se apenas ressaltar que, para que o Matlab fosse capaz de executar, teve-se que considerar o vetor posição começando em $y^+ \sim 3$, igualmente feito para que fosse capaz de calcular os parâmetros. Observando-se as Figura 4.85 a Figura 4.88, pode-se notar que o problema não é localizado em $y^+ \sim 3$, não descaracterizando então a solução.

Resta então a modelagem dos parâmetros para $v^+ > 17$. Deve-se observar nas Figura 4.91 a Figura 4.94 que não é possível fazer uma modelagem apenas em função da temperatura v^+, conforme feito até o momento e conforme desejado. Deve-se observar que cada arquivo de DNS possui um perfil independente. Porém, exceto pelo parâmetro b_1^{0+}, estes perfis são iguais, mas "deslocados".

Assim, para o parâmetro b_1^{0+}, optou-se por buscar uma perfil "médio" para os três arquivos de DNS, não fitando muito bem nenhum, mas que atendesse à características de todos: valores pequenos próximo de $v^+ = 17$ e valores altos no centro do escoamento.

Para os demais parâmetros, optou-se por modelar o parâmetro para o arquivo de DNS WL1 através de uma função exponencial e fazer um ajuste via o Re_τ de cada arquivo de DNS, de modo que os parâmetros do modelo permaneceriam em função de variáveis constitutivas.

O resultado dos ajustes segue baixo:

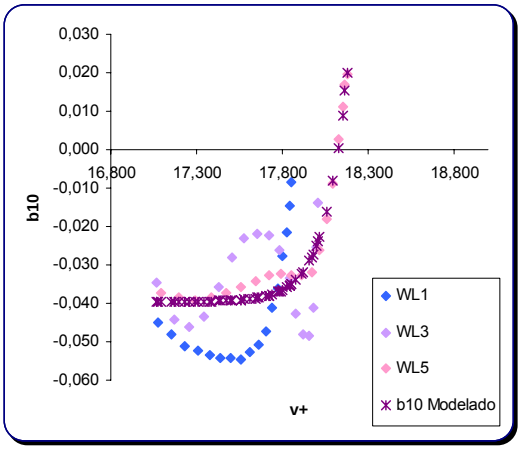


Figura 4.91 - Ajuste do parâmetro b_1^{0+} para $v^+ > 17$.

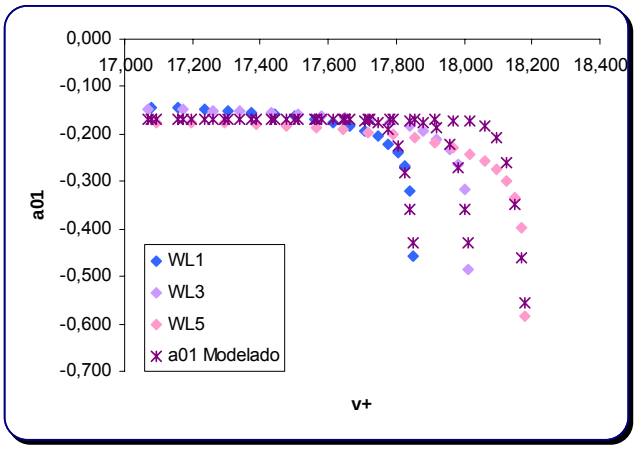


Figura 4.92 - Ajuste do parâmetro a_0^{1+} para $v^+ > 17$.

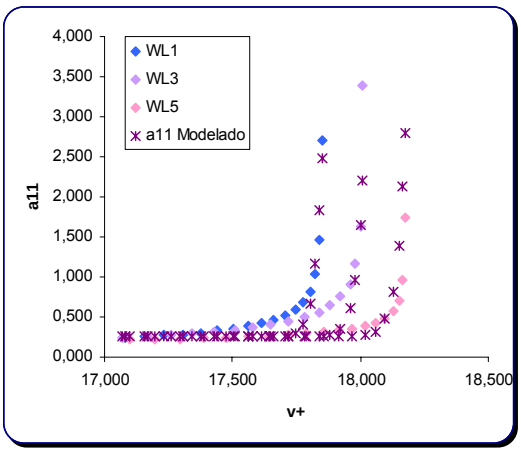


Figura 4.93 - Ajuste do parâmetro a_1^{1+} para $v^+ > 17$.

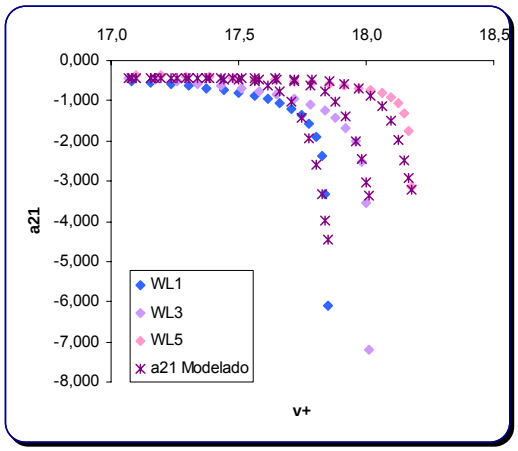


Figura 4.94 - Ajuste do parâmetro a_2^{1+} para $v^+ > 17$.

Novamente, pensava-se que a expressão das derivadas dos parâmetros a_0^1, a_1^1 e a_2^1 seria a expressão da derivada teórica destas funções exponenciais. Porém, comparando-se a derivada dos parâmetros provenientes do Matlab com a derivada calculada pela expressão derivada destes ajustes, o resultado foi ruim. Assim, as derivadas dos parâmetros a_0^1, a_1^1 e a_2^1 foram modeladas de forma independente para $v^+ > 17$. Os ajustes seguem abaixo.

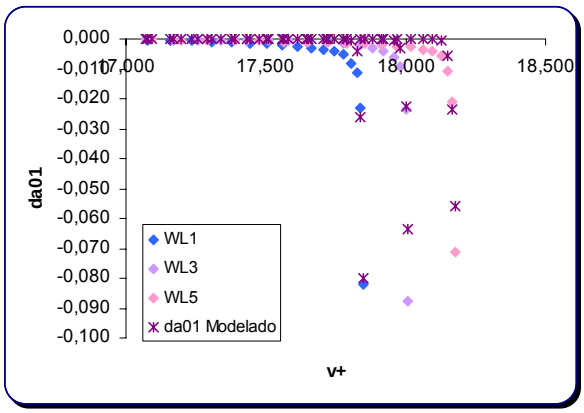


Figura 4.95 – Ajuste da derivada do parâmetro a_0^{1+} para v^+>17.

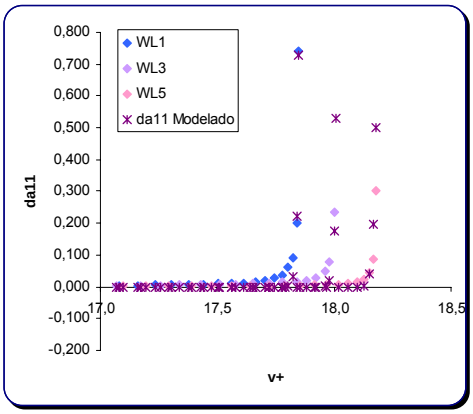


Figura 4.96 – Ajuste da derivada do parâmetro a_1^{1+} para v^+>17.

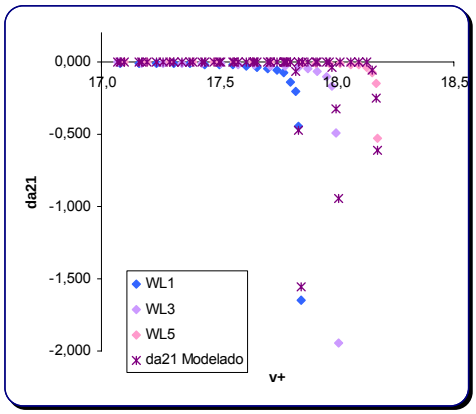


Figura 4.97 – Ajuste da derivada do parâmetro a_2^{1+} para v^+>17.

Com isso, pode-se dizer que os parâmetros estão modelados. Até $v^+ = 17$, todos os parâmetros e suas derivadas foram modelados com polinômios que obedecem a lei geral da equação (4.1.7). Para valores de $v^+ > 17$, todos os polinômios foram modelados

com a função exponencial descrita na equação (4.7.1), onde f é uma expressão em função do Re_τ do escoamento.

$$\text{Paramêtro}(v) = y_0 + A_1 \exp\left(\frac{v^+ - x_0}{t_1 / f}\right) \tag{4.7.1}$$

Nas tabelas abaixo, seguem os valores dos coeficientes das expressões que descrevem cada parâmetro na faixa de v^+ especificada.

Tabela 4.5 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $v^+ \leq 17$.

$0 \leq v^+ \leq 17$							
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
b_1^{0+}	-	-	-	-	-1,299819E-03	1,922769E-02	1,292008E-02
a_1^{1+}	-	-	1,848279E-05	-4,353588E-04	3,349213E-03	-8,568441E-03	6,025620E-03
a_2^{1+}	-1,705239E-07	4,200225E-06	-4,523355E-05	1,114485E-03	-2,369108E-02	2,138860E-01	-7,538292E-01
da_1^{1+}	-	-1,661811E-07	7,480048E-06	-1,305918E-04	1,106944E-03	-4,275012E-03	6,048649E-03
da_2^{1+}		-1,023143E-06	2,100113E-05	-1,809342E-04	3,343455E-03	-4,738216E-02	2,138860E-01

Tabela 4.6 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $v^+ \leq 15$.

$0 \leq v^+ \leq 15$							
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
a_0^{1+}	-	-	-	-1,295480E-04	1,390383E-03	-5,580058E-03	5,072625E-03
da_0^{1+}	-	2,253586E-07	-6,374132E-06	6,790116E-05	-3,677791E-04	3,626007E-04	-2,004298E-04

Tabela 4.7 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $15 < v^+ \leq 17$.

$15 < v^+ \leq 17$							
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
a_0^{1+}	-	-	-	-	-1,069000E-03	3,405800E-02	-2,702450E-01
da_0^{1+}	-	-1,536108E-02	1,253017E+00	-4,086313E+01	6,659563E+02	-5,423608E+03	1,765767E+04

Tabela 4.8 – Coeficientes dos Polinômios dos Parâmetros para $v^+ > 17$.

$v^+ > 17$					
	y_0	A_1	x_0	t_1	f
b_1^{0+}	-0,03954	5,8000E-04	17,59663	0,12525	-
a_0^{1+}	-0,170	-9,5388E-26	16,23283	0,02873	$\left[150/Re_\tau\right]^{-0,52}$
a_1^{1+}	0,250	1,9485E-24	16,35846	0,02691	$\left[150/Re_\tau\right]^{0,575}$
a_2^{1+}	-0,450	-2,5651E-11	15,28603	0,07327	$\left[150/Re_\tau\right]^{\frac{1,15}{3}}$
da_0^{1+}	-	-1,4630E-45	17,03333	0,00810	$\left[150/Re_\tau\right]$
da_1^{1+}	-	3,7843E-50	16,98325	0,00763	$\left[150/Re_\tau\right]^{-0,95}$
da_2^{1+}	-	-2,8062E-45	17,05787	0,00768	$\left[150/Re_\tau\right]^{\frac{25}{24}}$

É válido comentar que, efetivamente, os quatro parâmetros iniciais do modelo tornaram-se sete parâmetros, uma vez que as derivadas dos parâmetros também foram modeladas. Apenas relembrando, elas também foram modeladas devido ao fato de o ajuste feito pela derivada da expressão de cada parâmetro (exceto o a_2^1 para v ≤ 17) não modelar de forma satisfatória os pontos discretos da curva das derivadas dos parâmetros provenientes do Matlab. De qualquer forma, isto não implica em nenhum problema efetivo até porque todas as expressões propostas são simples e de fácil implementação em qualquer código de programação, inclusive em códigos de CFD. Na realidade, este fato pode até ser visto como uma vantagem, pois evita o cálculo da derivada numérica de cada parâmetro para cada nó da malha, que poderia implicar num erro sem controle.

4.8 Validação da Determinação dos Parâmetros

A etapa da validação da determinação dos parâmetros consiste em recalcular os componentes do tensor de Reynolds dos demais arquivos de DNS dos quais se dispõem utilizando a modelagem definida no item 4.7 desta dissertação para cada parâmetro do modelo.

Para a validação dos parâmetros, foram testados 9 arquivos de DNS do site *http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp*, "Turbulence and Heat Transfer Lab. / Frontier Energy System Lab", inclusive os três utilizados para a determinação dos parâmetros e 8 arquivos de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html*, "Kawamura Lab DNS Database of Turbulent Heat Transfer".

Na Figura 4.98, segue o recálculo dos componentes do tensor de Reynolds para o arquivo de DNS Ch180_b, com Re_τ = 180 e Re = 5962, que apresentou uma reprodução muito boa dos componentes do tensor de Reynolds. Deve-se comentar que

das 29 posições do vetor posição, foram integradas 26. As últimas três posições o Matlab não foi capaz de integrar.

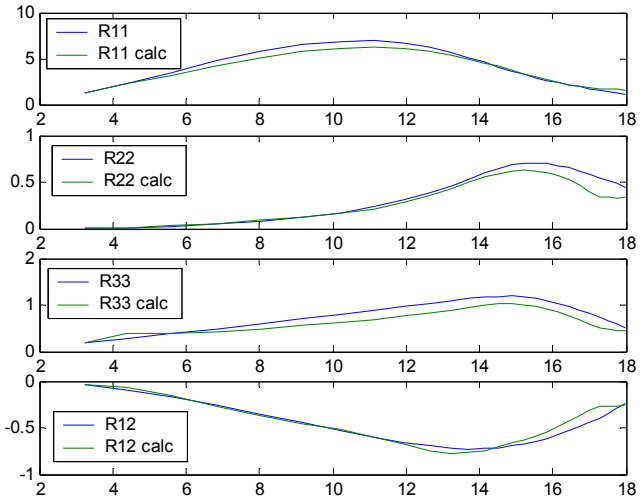


Figura 4.98 – Reprodução dos Componentes do tensor de Reynolds para o Arquivo de DNS Ch180_b (Re_τ = 180 e Re = 5962), onde das 29 posições, 26 foram integradas. Dados de DNS provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

A reprodução dos componentes do tensor de Reynolds dos demais arquivos de DNS testados encontra-se no Anexo 3.

Pelo resultado apresentado no Anexo 3, pode-se fazer a seguinte análise:

Para os arquivos com Re_τ baixos (até 300), a reprodução dos componentes do tensor de Reynolds foi muito boa, apesar de um pequeno "problema" no início do cálculo do componente R_{33} de alguns arquivos de DNS que eventualmente poderá ser tratado e de uma tendência de extrapolação quanto mais ao centro do escoamento que provavelmente foi a responsável pela não integração das últimas posições em alguns arquivos de DNS, inclusive naquele apresentado na Figura 4.98.

Esta tendência pôde ser confirmada nos arquivos de DNS com Re_τ = 395. Nestes arquivos, pôde-se notar uma clara extrapolação dos valores dos componentes do tensor de Reynolds, especialmente no componente R_{33}. Porém, quando "cortou-se" do

gráfico os pontos para $y^+ > 17$, pôde-se observar que, até este ponto, a reprodução dos componentes do tensor de Reynolds estava boa.

Para os escoamentos com Re_τ alto (valores a partir de 600), quando se colocou o Matlab para integrar todas as posições, este não conseguiu. Colocando para fazer a integração até $y^+ \leq 17$, obteve-se boas reproduções dos componentes do tensor de Reynolds.

O motivo pelo qual optou-se em avaliar a reprodução dos componentes do tensor de Reynolds nos arquivos de DNS que apresentaram problemas de integração no centro do escoamento para valores de $y^+ \leq 17$, deve-se ao fato de ter-se dividido a determinação dos parâmetros do novo modelo de turbulência também nesta faixa.

Como o ajuste de todos os arquivos de DNS apresentou uma boa reprodução dos componentes do tensor de Reynolds para $y^+ \leq 17$, especialmente os componentes R_{11} e R_{12} que são os mais importantes para o cenário de escoamento tratado, pode-se confirmar a validação dos parâmetros do modelo nesta faixa.

Para valores de $y^+ \geq 17$, já não se pode falar o mesmo.

Mesmo para os arquivos de DNS simulando escoamentos com Re_τ baixo, houve alguns problemas de extrapolação dos valores dos componentes do tensor de Reynolds no centro do escoamento, quanto mais próximo da meia distância entre as placas planas paralelas.

Este problema se deve provavelmente à modelagem dos parâmetros para $y^+ \geq 17$ com funções exponenciais. O ajuste destas funções feito com o Re_τ dos arquivos de DNS utilizados para a determinação dos parâmetros não foi suficiente para ajustar adequadamente os parâmetros do novo modelo de turbulência. Assim, não se pode considerar validados os ajustes para os parâmetros do modelo para valores de $y^+ \geq 17$.

4.9 Dimensionalização dos Parâmetros

Uma vez que se pode considerar que o novo modelo de turbulência tem seus parâmetros determinados, ao menos para $v^+ \leq 17$, é conveniente determinar a relação entre os parâmetros dimensionais e adimensionais e especificar suas unidades.

Assim, pelo mesmo raciocínio empregado nas equações (4.2.19) a (4.2.28), chega-se às seguintes relações:

$$b_1^0 = \frac{\rho v_\tau^2}{\mu} b_1^{0+} \rightarrow \left[b_1^0\right] = s^{-1} \tag{4.9.1}$$

$$a_0^1 = v_\tau^2 a_0^{1+} \rightarrow \left[a_0^1\right] = m^2 s^{-2} \tag{4.9.2}$$

$$a_1^1 = a_1^{1+} \rightarrow \left[a_1^1\right] = 1 \tag{4.9.3}$$

$$a_2^1 = \frac{1}{v_\tau^2} a_2^{1+} \rightarrow \left[a_2^1\right] = m^{-2} s^2 \tag{4.9.4}$$

Como se determinou expressões independentes para as derivadas dos parâmetros, é conveniente também determinar as relações e unidades destes novos parâmetros que foram estipulados:

$$\frac{da_0^1}{dx_2} = \frac{\rho v_\tau^3}{\mu} \frac{da_0^{1+}}{dy^+} \rightarrow \left[\frac{da_0^1}{dx_2}\right] = m s^{-2} \tag{4.9.5}$$

$$\frac{da_1^1}{dx_2} = \frac{\rho v_\tau}{\mu} \frac{da_1^{1+}}{dy^+} \rightarrow \left[\frac{da_1^1}{dx_2}\right] = m^{-1} \tag{4.9.6}$$

$$\frac{da_2^1}{dx_2} = \frac{\rho}{v_\tau \mu} \frac{da_2^{1+}}{dy^+} \rightarrow \left[\frac{da_2^1}{dx_2}\right] = m^{-3} s^2 \tag{4.9.7}$$

CAPÍTULO 5 – IMPLEMENTAÇÃO DO NOVO MODELO DE TURBULÊNCIA NUM CÓDIGO DE CFD

De modo a validar os resultados apresentados no Capítulo 4, decidiu-se implementar o novo modelo de turbulência em um código de CFD e testá-lo para um escoamento equivalente a um dos arquivos de DNS testados. O código de CFD escolhido foi o software CFX.11 da Ansys.

Uma vez que se iria criar geometria e malha para o escoamento de fluido plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas decidiu-se também simular este escoamento com modelos de turbulência tradicionais para comparar seus resultados com aqueles dos arquivos de DNS.

Os modelos tradicionais escolhidos para comparação foram o k-ε, o SSG Reynolds Stress e o SST (Shear Stress Transport). Optou-se pelo k-ε devido a ser um modelo amplamente difundido e aplicado; Optou-se pelo Reynolds Stress SSG porque este modelo se propõe a calcular cada um dos componentes do tensor de Reynolds e é considerado um dos mais eficientes nesta categoria de modelos; e optou-se pelo SST (Shear Stress Transport) pois este modelo, a princípio, apresenta melhores resoluções na parede.

Optou-se por fazer esta simulação com petróleo, uma vez que se deseja poder aplicar este novo modelo de turbulência em aplicações na indústria de Óleo e Gás.

5.1 Geometria e Malha

A primeira etapa quando se pensa em utilizar a ferramenta CFD é determinar a geometria do escoamento e sua malha.

A geometria deve ser a mais real possível ao caso que se deseja simular. Neste caso, isto não será absolutamente um problema pois a geometria que será simulada é extremamente simples: placas planas paralelas.

A malha é um fator determinante no sucesso dos resultados da simulação e deve fornecer uma distribuição de elementos e nós que permita uma boa discretização do volume da geometria.

5.1.1 Geometria

Conforme já citado, a geometria a ser criada é extremamente simples, placas planas paralelas, e assim, só se precisa determinar a altura entre as placas e comprimento das mesmas.

Para determinar a altura entre as placas, precisa-se determinar qual arquivo de DNS será simulado como um escoamento equivalente. O arquivo de DNS escolhido foi aquele representado na Figura 4.98. Escolheu-se este escoamento por ter apresentado uma boa reprodução de todos os componentes do tensor de Reynolds e por ter um número de Reynolds baixo, podendo-se então utilizar a determinação dos parâmetros para toda a faixa de v^+ do escoamento.

Um escoamento equivalente é caracterizado por apresentar mesmo número de Reynolds. Dessa forma, conhecendo-se o escoamento cuja equivalência se deseja reproduzir, dispondo-se de seu Número de Reynolds e conhecendo-se o fluido que será simulado no escoamento equivalente, dispondo de sua densidade e viscosidade, precisa-se determinar arbitrariamente ou a velocidade, para determinar a altura entre as placas, ou a altura entre as placas para determinar a velocidade.

Em Klein (2006), determinou-se a geometria para comparação de performance dos modelos de turbulência com água, que é muito menos viscosa que petróleo. Assim, a simulação com petróleo, com a mesma geometria determinada a partir da água, apresentou uma velocidade muito alta. Por esse motivo, decidiu-se criar outra malha, baseada na velocidade de escoamento do petróleo. Arbitrou-se a velocidade do petróleo como sendo 5 m/s.

Escolheu-se um petróleo pesado para ser simulado de modo que os resultados pudessem ser interpretados também para o petróleo brasileiro. A caracterização do petróleo utilizado, petróleo proveniente do campo de Doba da cidade de Chad, foi determinada por Dehkissia *et al.* (2004). Nesta caracterização, o petróleo foi classificado como fluido newtoniano, especialmente a 60ºC, temperatura na qual a viscosidade se mantém constante. A densidade deste petróleo a 60ºC foi obtida pelo gráfico apresentado em (Dehkissia *et al.*,2004) onde a densidade estava em função da temperatura.

Desta forma, conhece-se para o petróleo estudado, a 60ºC:

$\rho = 915 \text{ kg m}^{-3}$

$\mu = 0{,}109 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$

Assim, para $\mathrm{Re} = 5692$ (arquivo de DNS da Figura 4.98), a altura entre as placas será dada pela equação (5.1.1).

$$d = \frac{\mu \mathrm{Re}}{v\rho} = \frac{0{,}109 * 5692}{5 * 915} = 0{,}1356 \text{ m} = 13{,}56 \text{ cm} \qquad (5.1.1)$$

Deve-se ressaltar que as simulações em DNS apresentam resultados apenas até a metade da altura entre as placas, uma vez que a outra metade é simétrica. Dessa forma, optou-se por simular também apenas metade da altura entre as placas indicando simetria no plano central do escoamento.

Dessa forma, a altura da geometria foi especificada em 6,78 cm.

O comprimento das placas foi estipulado, inicialmente, em 50cm. A largura das placas é um fator que não influencia no resultado uma vez que a velocidade só depende da altura entre as placas. Dessa forma, optou-se por usar um valor bem pequeno de modo a reduzir o volume a ser integrado pelo CFX.

Dessa forma, a geometria empregada na simulação é a apresentada na Figura 5.1.

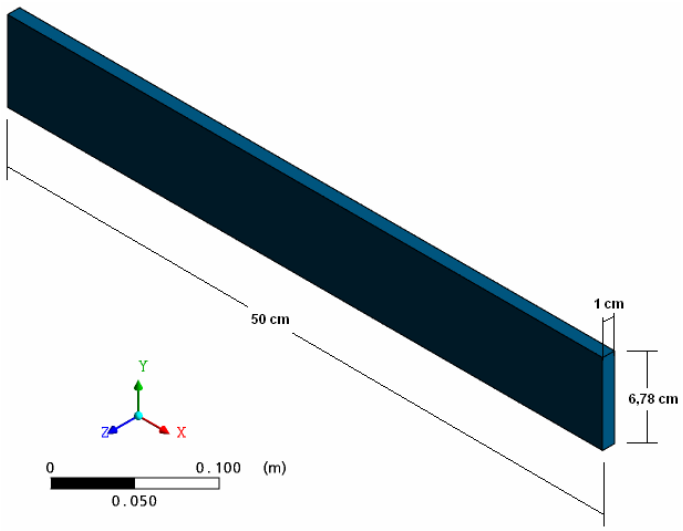


Figura 5.1 – Geometria das placas planas paralelas.

5.1.2 Malha

A malha utilizada para esta simulação foi gentilmente cedida pela empresa ESSS, uma vez fornecida a geometria.

A malha foi solicitada à empresa ESSS, pois se desejava poder implementar uma malha hexaédrica que pudesse apresentar um número menor de nós e elementos, o que seria importante para reduzir os esforços computacionais na implementação do novo modelo de turbulência.

Na Figura 5.2 encontra-se uma ilustração da malha fornecida pela ESSS.

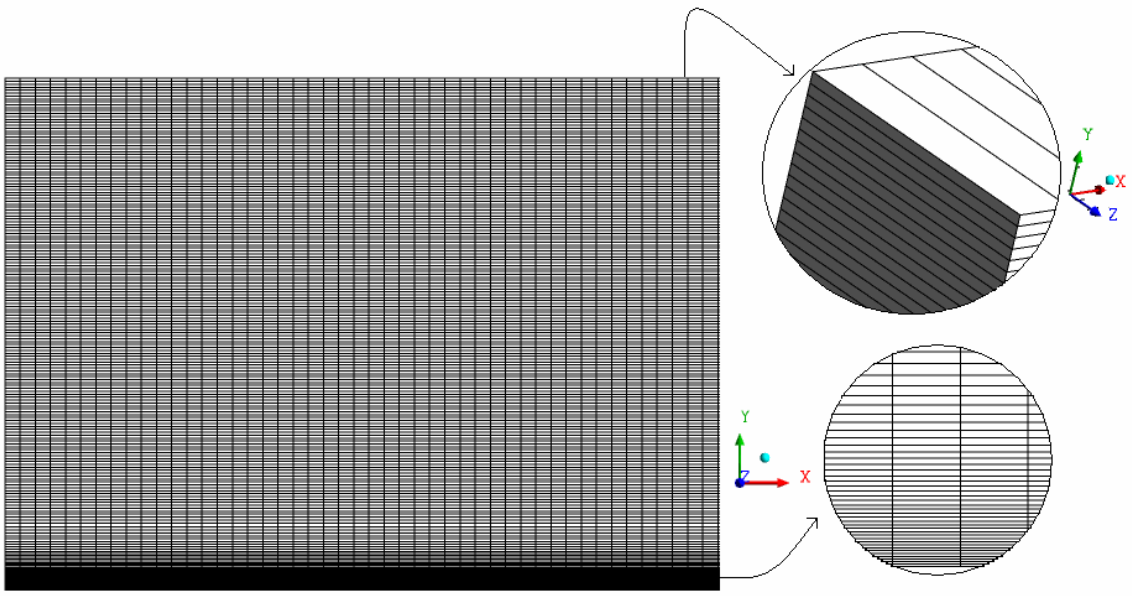


Figura 5.2 – Malha cedida pela empresa ESSS para a simulação.

Pode-se observar que a malha está bastante refinada na parede e significativamente menos refinada no centro do escoamento. Deve-se observa ainda que há apenas um elemento na direção z. Isto se justifica pela economia de nós associada ao fato de não haver gradientes da velocidade média nesta direção. Pelo mesmo motivo, não são necessários muitos elementos na direção x, direção do escoamento.

Para caracterizar a malha gerada da geometria estudada em simulações de CFD, é comum se utilizar o termo “estatística da malha”, onde são fornecidos principalmente o número de nós e de elementos da malha gerada. Quanto maior este número, mais refinada é a malha, o que implica em um maior esforço computacional, demandando maior tempo para convergência.

Sabe-se que a partir de um dado número de nós e elementos, não mais há melhoras na previsão da simulação, de modo que não se justifica refinar mais a malha. Seria a idéia da “malha ótima” (Medronho, 2005).

Há ainda um fator determinado pelo próprio programa gerador da malha, chamado fator de máxima expansão da malha, que se recomenda ser menor que 20.

A estatística da malha fornecida encontra-se na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Estatística da Malha

Número de Nós	99500
Número de Elementos	49302
Fator de Máxima Expansão da Malha	1,1

Baseando-se em experiências prévias, e nas próprias indicações do programa gerador da malha, pode-se dizer que esta malha apresenta uma estatística que satisfaz os objetivos desta simulação.

5.2 Comparação com Modelos de Turbulência Tradicionais

Simulou-se o cenário de escoamento equivalente ao arquivo de DNS com Re_τ = 180 e Re = 5692, com as geometria e malha descritas acima, e com os três modelos de turbulência tradicionais k-ε, SSG Reynolds Stress e SST.

A idéia é comparar a previsão dos componentes do tensor de Reynolds por estes modelos com os valores provenientes do arquivo de DNS.

Deve-se ressaltar que o CFX.11 não calcula os componentes do tensor de Reynolds quando os modelos k-ε e SST são especificados. Assim, após rodar a simulação com estes modelos, teve-se que calcular os componentes do tensor de Reynolds através das equações (2.4.10) e (2.4.11). Estas equações são válidas para ambos os modelos, pois ambos são modelos baseados na teoria de Boussinesq, variando apenas a forma de calcular a viscosidade turbulenta. Quando o modelo SSG é especificado, o próprio CFX calcula os componentes do tensor de Reynolds.

As condições de contorno deste processo são a entrada, a saída, a parede e as regiões de simetria que são três: as “laterais” do escoamento, de modo a não se especificar a largura das placas e o plano central paralelo à parede, uma vez que só se

está simulando a meia distância entre as placas. Na Figura 5.3 encontram-se esquematizadas as condições de contorno.

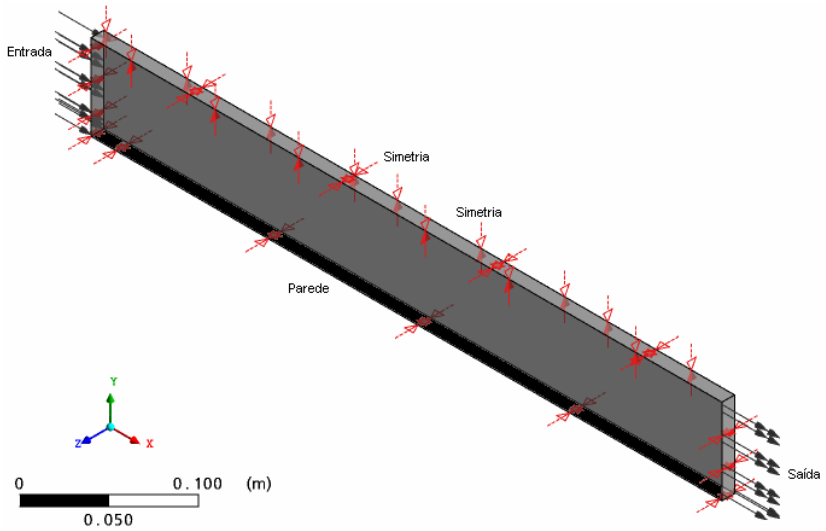


Figura 5.3 – Condições de contorno da simulação.

A entrada foi especificada no CFX como *inlet*, as saídas como *outlet*, as paredes como *wall* e as regiões de simetria como *Symmetry*. Estas definições, apesar de parecerem óbvias, são inerentes ao software e poderiam ser diferentes dependendo da simulação. Algumas das especificações das condições de contorno, bem como especificações de convergência encontram-se listados na Tabela 5.2.

Tabela 5.2 – Condições da Simulação.

Parâmetro	**Especificação**
Tipo de Simulação	Estacionária
Fluido	Petróleo (ρ = 915 kg/m³ ; μ = 0,109 Pa s)
Pressão de Referência	0 atm
Empuxo	*Non Buoyancy*
Modelo de Turbulência	κ–ε / *Reynolds Stress* SSG / SST
CC da Entrada	Velocidade Normal
CC da saída:	0 Pa (Pressão manométrica)
CC da Parede:	*No slip* / *Smooth*
Condições de Entrada	v_x = 5 m/s ; v_y = v_z = 0
Advection Scheme	*High Resolution*
Timescale Control	*Physical Timescale = 0,0005 s*
Critério de convergência	RMS (Raiz do Desvio Quadrático Médio)
Resíduo mínimo permitido	1 x10^{-5}

O resultado da previsão dos componentes do tensor de Reynolds por cada um dos três modelos de turbulência tradicionais testados comparados com o valor dos componentes do tensor de Reynolds pelo arquivo de DNS e pelo novo modelo a partir do Matlab, ou seja, dados vetores de posição e velocidade, podem ser conferidos nas figuras abaixo.

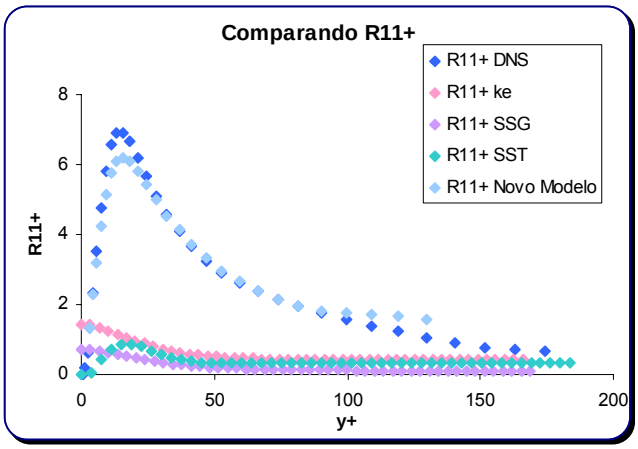


Figura 5.4 – Comparação da previsão do componente R_{11}^{+} pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

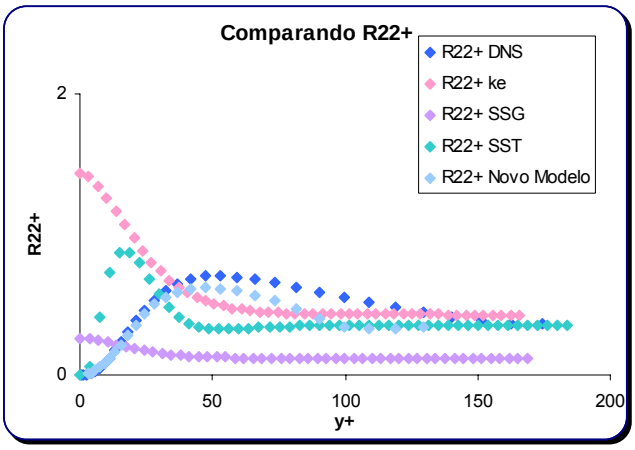


Figura 5.5 – Comparação da previsão do componente R_{22}^{+} pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

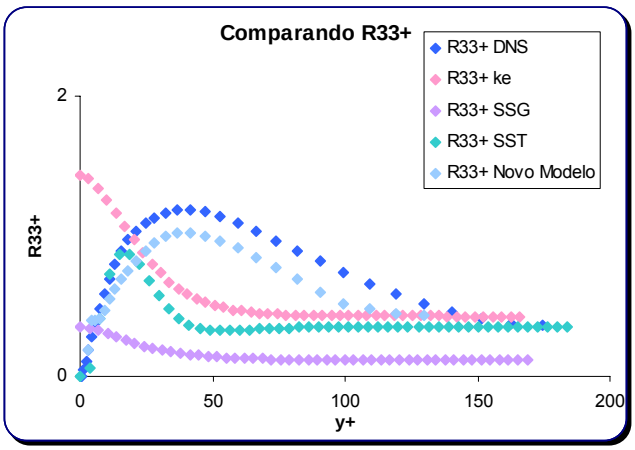


Figura 5.6 – Comparação da previsão do componente R_{33}^{+} pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

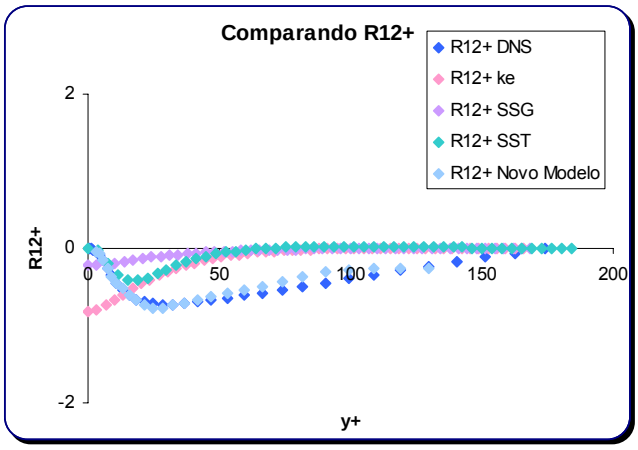


Figura 5.7 – Comparação da previsão do componente R_{12}^{+} pelos modelos k-e, SSG, SST e Novo Modelo (Matlab) com os valores provenientes do arquivo de DNS Ch180_b. Dados de DNS de escoamento com Re=5692 e Re_{τ}=180 provenientes do site http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/db/DNS.html, *em 18/02/06*

Conforme se pode notar, pelas Figura 5.4 a Figura 5.7, o desempenho esperado do novo modelo de turbulência é significativamente melhor, quando comparado aos dados de DNS que os demais modelos tradicionais testados, especialmente para o componente R_{11}^{+}, cuja ordem de grandeza está bastante contrastante. Deve-se apenas chamar a atenção para o fato de apenas o modelo SST prever valor nulo para os componentes do tensor de Reynolds na parede, conforme esperado, porém sua magnitude e perfil não são tão precisos quando comparados aos dados de DNS.

5.3 Implementação do Novo Modelo de Turbulência em um Código de CFD

A idéia de implementar o novo modelo de turbulência num código de CFD, no caso no CFX.11 da Ansys, é comprovar os resultados obtidos pelo Matlab e apresentados nas Figura 4.98, no Anexo 3 e nas Figura 5.4 a Figura 5.7.

A grande diferença entre simular no Matlab e simular no CFX.11 é que, para rodar no Matlab foram fornecidos os vetores posição e velocidade, enquanto que se espera que o CFX.11 calcule não só os componentes do tensor de Reynolds como também os vetores posição e velocidade, dadas as condições de contorno, conforme Tabela 5.2.

Espera-se que o resultado seja o mesmo uma vez que os vetores posição e velocidade fornecidos ao Matlab eram provenientes dos arquivos de DNS, que calcularam estes vetores a partir da solução da Equação de Navier-Stokes, mesma equação que o CFX utilizará para calcular estes vetores.

5.3.1 Especificações no CFX

Para a implementação do novo modelo no CFX.11 foi necessário especificar que não seria utilizado nenhum modelo de turbulência, de modo que o software interpretasse o escoamento como laminar e utilizasse apenas as equações de Navier-Stokes para calcular o campo de velocidade.

Uma vez feito isso, foram definidas as variáveis adicionais R11, R12, R22 e R33 que são os quatro componentes do tensor de Reynolds significativos para este escoamento. Para cada uma destas variáveis associou-se uma equação de transporte.

A equação de transporte no CFX tem um formato padrão expresso na equação (5.3.1), onde Φ é a quantidade conservada por unidade de volume, D_Φ é a difusividade cinemática do escalar e S_Φ é o termo fonte volumétrico, com unidade da quantidade conservada por unidade de volume por unidade de tempo.

$$\underbrace{\frac{\partial \Phi}{\partial t}}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{\nabla \bullet (v\Phi)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\nabla \bullet \left[\left(\rho D_\Phi + \frac{\mu^t}{Sc^t} \right) \nabla \bullet \left(\frac{\Phi}{\rho} \right) \right]}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{S_\Phi}_{\text{termo fonte}} \tag{5.3.1}$$

Deve-se chamar a atenção para o fato de, mesmo sendo um escoamento em regime permanente, o termo transiente da equação de transporte não é retirado, pois é utilizado para facilitar a convergência.

O usuário do CFX.11 só pode fornecer o lado direito da equação. Assim, as equações provenientes do Sistema (4.6.58), com os termos B1, B2, B3 e B4 dados, respectivamente, pelas equações (4.6.66), (4.6.67), (4.6.68) e (4.6.69), deverão ser reorganizadas de modo a satisfazer a forma da equação (5.3.1).

Deve-se observar que no sistema (4.6.58), não há o termo difusivo da equação (5.3.1). Assim, o campo difusividade cinemática não foi habilitado no CFX.11.

Resta então identificar a variável Φ e o termo fonte S_Φ.

Pela descrição acima da variável Φ, ela pode ser expressa pela equação (5.3.2).

$$\Phi = \rho R_{ij} \tag{5.3.2}$$

$$\nabla \bullet (v\Phi) = \rho \frac{\partial (vR_{ij})}{\partial x_2} \tag{5.3.3}$$

Assim, cada linha do sistema (4.6.58) deverá ser convertida numa equação cujo lado direito seja igual a equação (5.3.3) e o lado esquerdo se tornará o termo fonte S_Φ. O fato de a densidade não aparecer no Sistema (4.6.58) não é problema uma vez que esta é constante e pode ser multiplicada em ambos os lados da equação de transporte final.

Deve-se notar que no sistema (4.6.58) não aparece o lado direito da equação (5.3.3), mas aparece como escrito na equação (5.3.4). Assim, para fazer surgir o lado direito da equação (5.3.3), pode-se usar o recurso expresso na equação (5.3.5).

$$v\frac{\partial R_{ij}}{\partial x_2} \tag{5.3.4}$$

$$\rho\frac{\partial(vR_{ij})}{\partial x_2} = \rho v\frac{\partial R_{ij}}{\partial x_2} + \rho R_{ij}\frac{\partial v}{\partial x_2} \tag{5.3.5}$$

Pela própria forma da equação (5.3.1), pode-se notar que todos os termos no CFX.11 devem ser dimensionais. Assim, para inserir os parâmetros do modelo determinados no Capítulo 4, definiu-se a velocidade adimensional v^+, pela expressão da equação (2.5.2), calculou-se os parâmetros do modelo por suas equações adimensionais, caracterizadas nas Tabela 4.5, Tabela 4.6, Tabela 4.7 e Tabela 4.8 e dimensionalizou-se os parâmetros através das equações do item 4.9.

Dessa forma, os termos fontes de cada um dos componentes do tensor de Reynolds, expressos nas equações (5.3.7) a (5.3.10), foram escritos em função dos termos Aij do sistema (4.6.58), onde por uma questão de conveniência definiu-se uma variável auxiliar, aux, cuja expressão encontra-se na equação (5.3.6).

$$aux = a_2^1 R_{12} \tag{5.3.6}$$

$$\rho\frac{\partial(v_1R_{11})}{\partial x_2} = -\rho\frac{A14}{3aux}\frac{\partial R_{12}}{\partial x_2} + \rho\frac{B1}{3aux} + \rho R_{11}\frac{\partial v_1}{\partial x_2} = S_{v_1R_{11}} \tag{5.3.7}$$

$$\rho\frac{\partial(v_1R_{22})}{\partial x_2} = -\rho\frac{A24}{aux}\frac{\partial R_{12}}{\partial x_2} + \rho\frac{B2}{aux} + \rho R_{22}\frac{\partial v_1}{\partial x_2} = S_{v_1R_{22}} \tag{5.3.8}$$

$$\rho\frac{\partial(v_1R_{33})}{\partial x_2} = -\rho\frac{A34}{aux}\frac{\partial R_{12}}{\partial x_2} + \rho\frac{B3}{aux} + \rho R_{33}\frac{\partial v_1}{\partial x_2} = S_{v_1R_{33}} \tag{5.3.9}$$

$$\rho\frac{\partial(v_1R_{12})}{\partial x_2} = -\rho\frac{A41}{4aux}\frac{\partial R_{11}}{\partial x_2} - \rho\frac{A42}{4aux}\frac{\partial R_{22}}{\partial x_2} + \rho\frac{B4}{4aux} + \rho R_{12}\frac{\partial v_1}{\partial x_2} = S_{v_1R_{12}} \tag{5.3.10}$$

Uma vez definidas as equações dos termos fonte de cada variável adicional criada, no subdomínio (campo intrínseco ao software), estas foram indicadas para cada um dos componentes do tensor de Reynolds. Ainda no subdomínio, é necessário indicar as equações que serão integradas com a equação de Navier-Stokes, ou seja a expressão para a derivada de R_{ij}. Para a componente X, i=1, deve-se fornecer a equação da derivada do componente R_{12}, conforme se pode observar na equação (3.1.8); para a componente Y, i=2, deve-se fornecer a derivada de R_{22}; e para a componente Z, i=3, deve-se fornecer 0 (zero), uma vez que corresponde à derivada do componente R_{13} que neste escoamento é desprezível.

Para fornecer a derivada dos componentes R_{12} e R_{22}, escreveu-se o sistema (4.6.58) de forma simbólica no Matlab, em função dos termos Aij e Bi, obtendo então expressões analíticas para cada uma das derivadas destes componentes.

Como a equação de Navier-Stokes no CFX.11 não está dividida pela densidade conforme (3.1.8), as expressões das derivadas dos componentes do tensor de Reynolds R_{12} e R_{22}, foram multiplicadas pela densidade, resultando nas equações abaixo:

$$\rho\frac{\partial R_{22}}{\partial x_2} = -\rho\frac{(-A41*A24*B1+A11*A24*B4+A41*A14*B2-A11*A44*B2)}{(-A11*A24*A42+A11*A44*A22-A41*A14*A22)} \qquad (5.3.11)$$

$$\rho\frac{\partial R_{12}}{\partial x_2} = -\rho\frac{(-A22*A41*B1+A22*A11*B4-B2*A11*A42)}{(-A11*A24*A42+A11*A44*A22-A41*A14*A22)} \qquad (5.3.12)$$

Uma vez que as equações (5.3.7) a (5.3.10), (5.3.11) e (5.3.12) possuem um denominador, estes devem ser estudados e eventualmente tratados de modo a não se permitir que dêem zero, para não interromper as simulações.

Como todos os termos Aij e Bi do sistema (4.6.58) são dependentes de variáveis presentes nos arquivos de DNS, o estudo do comportamento dos denominadores e numeradores pode ser feito em planilhas do Excel.

Com este estudo, observou-se que o numerador e denominador das equações (5.3.7) a (5.3.10), (5.3.11) e (5.3.12) tendem a zero muito próximo à parede, onde todas as variáveis (v e Rij) são muito próximas de zero. Assim, para evitar uma indeterminação, definiu-se que se o módulo do valor dos denominadores estiver assumindo valor menor que 10^{-3}, então este assumirá valor 10^{-3}, caso contrário, assume seu próprio valor. Poder-se-ia, determinar o valor do denominador como sendo 1 quando este fosse a zero, idéia inicial, de modo que o numerador ficasse com sendo zero. Porém, testes realizados no Excel mostraram que substituir por 10^{-3} era uma melhor opção e por isso foi implementada.

Como se pretende simular um escoamento turbulento, especificando no CFX que este é laminar, espera-se que o tempo de convergência possa ser muito grande. Por esse motivo, decidiu-se fornecer na condição de contorno da simulação com o novo modelo de turbulência um perfil de velocidade desenvolvido.

Optou-se por exportar o perfil de velocidade turbulento na saída da simulação do mesmo escoamento quando simulado com o modelo SST, uma vez que o perfil de velocidade calculado por este modelo é mais fiel à realidade.

As demais condições de contorno apresentadas na Tabela 5.2 foram mantidas.

Assim, pode-se considerar que o novo modelo de turbulência foi implementado no CFX.11 e está pronto para ser rodado.

5.3.2 Simulação com o Novo Modelo

A simulação com o novo modelo não convergiu. Mais especificamente, não passou das primeiras iterações.

Como tentativas para fazer o programa convergir, pode-se citar as seguintes ações realizadas: dar como estimativa inicial o resultado das simulações com k-ε, SSG e SST; mexer com parâmetros de convergência internos do CFX.11, como relaxação; especificar a simulação como transiente, uma vez que com isso estaria-se efetivamente aumentando o número de iterações com passos menores; traçar um perfil para os componentes do tensor de Reynolds e fornecer como condição de entrada destas variáveis adicionais; rodar a simulação como laminar, calculando os componentes do tensor de Reynolds pelo perfil determinado para condição de entrada e fornecer seus resultados como estimativa inicial; e definir o cálculo dos componentes do tensor de Reynolds apenas para $y^+ > 3$ e $v^+ < 18$ – todas as demais ações citadas acima ainda foram repetidas para esta nova condição.

A idéia de colocar $y^+ > 3$, deve-se ao fato de o Matlab não ter sido capaz de recalcular os componentes do tensor de Reynolds para valores de $y^+ < 3$. Esperava-se que o CFX.11 fosse ser capaz de convergir mesmo nesta faixa, devido ao tratamento dado no denominador das equações (5.3.7) a (5.3.10), (5.3.11) e (5.3.12).

A idéia de se colocar $v^+ < 18$, vem de um estudo feito no Excel, que determinou que até $v^+ = 18$, as funções exponenciais utilizadas para modelar os parâmetros na faixa de $v^+ > 17$ não extrapolavam e a partir daí, sim, o que impedia o cálculo de algumas posições do vetor posição pelo Matlab.

Uma vez que todas as tentativas de convergência citadas não tiveram sucesso, decidiu-se tentar apenas reproduzir no CFX.11 o mesmo resultado obtido pelo Matlab, ou seja, calcular os componentes do tensor de Reynolds dado o campo de velocidade em função das coordenadas.

Assim, manteve-se o perfil de velocidade obtido com a simulação do modelo SST e desabilitou-se a solução da equação de Navier-Stokes. Mesmo assim, a simulação não convergiu, nem mesmo para as faixas de $y^+ > 3$ e $v^+ < 18$.

De modo a observar este resultado inesperado, abriu-se o arquivo resultante da última iteração e verificou-se que o perfil de velocidade que estava sendo utilizado era velocidade constante e igual a 5 m/s. Isto justifica a não convergência do CFX.11 apenas para cálculo dos componentes do tensor de Reynolds, porém não se explica o motivo desta ocorrência.

Devido ao curto tempo hábil para implementação do novo modelo de turbulência no CFX.11, os resultados acima descritos não devem ser interpretados como conclusivos. Apenas com testes mais profundos e em conjunto com o suporte do CFX.11 poder-se-ia tirar conclusões.

Desse modo, apesar de não se ter conseguido comprovar os resultados obtidos pelo Matlab com o CFX.11, isto não os desqualifica.

CAPÍTULO 6 – ESTUDO DO BALANÇO DO MOMENTO DE CALOR

Para a determinação dos parâmetros do balanço de energia, escolheu-se o cenário de escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas com fluxo de calor constante proveniente da temperatura igual de cada uma das placas. Este cenário foi escolhido por três motivos: primeiro que é o cenário mais simples possível e onde o novo modelo de turbulência seria simplificado ao máximo; segundo, que não se dispõe de muitos arquivos de DNS que englobem balanços de energia e este é um cenário sobre o qual se encontram arquivos de DNS; e, terceiro, que como já se estudou o escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas, já se conhece o perfil deste escoamento e se dispõe de dados de DNS que possam complementar os arquivos de DNS para balanço de energia, caso necessário.

6.1 Determinação do Nível de Fechamento

Conforme ocorre para o balanço de momento, o balanço de energia também pode apresentar inúmeros níveis de fechamento, sendo sempre limitado este número devido à complexidade que os sistemas vão atingindo conforme se utiliza níveis mais elevados de fechamento. Dessa forma, cogita-se apenas o primeiro ou segundo nível de fechamento.

Para a determinação do nível de fechamento que será abordado nesta dissertação, as equações de fechamento do novo balanço de turbulência serão aplicadas no cenário de escoamento escolhido e com base nos sistemas resultantes, determinar-se-á a opção mais propícia.

6.1.1 Primeiro Nível do Fechamento

Para o primeiro nível do fechamento deve-se aplicar a equação (3.2.21) no cenário escolhido. O resultado segue abaixo.

i = 1 $$\frac{d}{dx_2}\left[R_{12}T + q_2 v_1 + 2q_{12}\right] = s_1 \tag{6.1.1}$$

i = 2 $$\frac{d}{dx_2}\left[R_{22}T + 2q_{22}\right] = s_2 \tag{6.1.2}$$

Deve-se observar que para i=3, todos os termos da equação (3.2.21) zeram, sobrando apenas o termo fonte s_3, que então, seria zero também. Dessa forma, a "posição" $i = 3$ não será considerada para o fechamento de energia. Este resultado é confirmado pelos arquivos de DNS que não disponibilizam os valores de q_3, confirmando sua nulidade no cenário escolhido.

Deve-se observar que, para o fechamento de primeiro nível, são necessárias correlações para os termos q_{ij} e s_i. O artigo de Alfradique e Telles (2006) propõe que estas correlações sejam lineares. Assim, as equações (3.5.6) e (3.5.5) resultam nas expressões abaixo:

$$s_i = f_0^v v_i + f_0^T T \tag{6.1.3}$$

$$q_{ij} = e_0^0 \delta_{ij} + e_0^1 R_{ij} \tag{6.1.4}$$

Deve-se observar que, pelas equações (6.1.3) e (6.1.4), há quatro parâmetros a serem determinados e dispõe-se de apenas duas equações de balanço, equações (6.1.1) e (6.1.2). Este "problema" pode ser facilmente resolvido, eliminando um dos parâmetros de cada uma das equações (6.1.3) e (6.1.4), restando apenas dois parâmetros a serem determinados.

Porém, antes, decidiu-se avaliar o fechamento de segundo nível de fechamento.

6.1.2 Segundo Nível do Fechamento

Para o segundo nível do fechamento, deve-se aplicar as equações (3.2.21) e (3.2.22) no cenário escolhido. Quando se aplica a equação (3.2.21), obtém-se as mesmas equações (6.1.1) e (6.1.2), que então não serão repetidas. O resultado da aplicação da equação (3.2.22) no cenário escolhido segue abaixo.

(1,1) $$\frac{d}{dx_2}\left[R_{112}T + 2q_{12}v_1 - 2R_{12}q_1 - R_{11}q_2 + 3q_{112}\right] = s_{11} \tag{6.1.5}$$

(2,2) $$\frac{d}{dx_2}\left[R_{122}T + q_{22}v_1 - R_{22}q_1 - 2R_{12}q_2 + 3q_{122}\right] = s_{12} \tag{6.1.6}$$

(1,2) $$\frac{d}{dx_2}\left[R_{222}T - 3R_{22}q_2 + 3q_{222}\right] = s_{22} \tag{6.1.7}$$

Deve-se ressaltar que as demais “posições” “ij” implicam em expressões cujos termos conhecidos são zero e desta forma, não importantes.

Deve-se observar que para o segundo nível do fechamento, há a presença dos momentos triplos os quais desde o início deste trabalho tenta-se evitar. Neste caso, diferentemente do segundo nível de fechamento do balanço de momento, não há como substituir o momento triplo e eliminá-lo.

Dessa forma, opta-se por não utilizar o fechamento de segundo nível e, então, realizar a determinação dos parâmetros através do fechamento de primeiro nível.

6.2 Determinação dos Parâmetros

Uma vez escolhido utilizar para a determinação dos parâmetros do balanço de energia o fechamento de primeiro nível, deve-se mexer nas equações (6.1.3) e (6.1.4) de

modo a só haver dois parâmetros a serem determinados e manter a correlação linear proposta por Alfradique e Telles (2006).

Para a determinação dos parâmetros, optou-se por utilizar cinco arquivos em DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/*, "Kawamura Lab DNS Database of Wall Turbulence and Heat Transfer".

Neste site estão disponíveis os resultados de DNS de escoamentos com fluxo uniforme de calor para quatro números de Re_τ distintos (Re_τ = 180, 395, 640 e 1020). Para Re_τ = 180, há escoamentos com diferentes números de Pr, porém para os demais valores de Re_τ, só há dois números de Pr: 0,71 e 0,025. Como este último valor é muito baixo, não caracteriza escoamentos de interesse para aplicação na área de óleo e gás, principal proposta de aplicação deste novo modelo de turbulência, estes arquivos não serão considerados.

Assim, para a determinação dos parâmetros, utilizaram-se dois arquivos de DNS com número de Re_τ = 180 e diferentes números de Pr e três arquivos de DNS com Pr = 0,71 e diferentes números de Re_τ. Dessa forma, espera-se poder observar a influência dos números de Re_τ e Pr.

Para cada arquivo de DNS que simula escoamento plenamente desenvolvido entre placas planas paralelas com fluxo uniforme de calor, há uma simulação de DNS que simula apenas o escoamento, sem fluxo de calor. Isto se torna extremamente importante, pois os componentes do tensor de Reynolds que são essenciais para o balanço do momento de calor turbulento só são fornecidos nas simulações dos escoamentos simples e não nas simulações com fluxo de calor. Dispondo de ambos os dados, pode-se montar um quadro com todas as variáveis relevantes para que se possa empregar o novo modelo de turbulência.

6.2.1 Análise Dimensional

Do mesmo modo que foi feito com o balanço de momento, será demonstrado nesta seção que as equações que serão utilizadas, provenientes do balanço de calor do artigo de Alfradique e Telles (2006), que estão escritas na forma dimensional, podem ser escritas da mesma forma para as variáveis adimensionais, uma vez que são idênticas a menos de uma constante.

Como se optou pelo primeiro nível do fechamento, será utilizada a equação (3.2.21) para esta demonstração. Considerando que o escoamento escolhido como cenário é permanente, a derivada temporal será automaticamente eliminada de modo a simplificar esta demonstração. Substituindo-se na equação (3.2.21) as expressões adimensionais dos termos q_i, R_{ip}, T, e v_i, expressas no item 2.5 do Capítulo 2, tem-se:

$$\frac{\rho v_\tau}{\mu}\frac{\partial}{\partial y^+}[R_{ip}^+T^+ + v_i^+q_p^+ + 2v_p^+q_i^+]v_\tau^2T_\tau + 2\frac{\rho v_\tau}{\mu}\frac{\partial q_{ip}}{\partial y^+} = s_i \tag{6.2.1}$$

Os termos turbulentos q_{ip} e s_i não foram "substituídos", propositalmente, uma vez que estes são os termos que serão substituídos por correlações onde então se encontram os parâmetros. A idéia é justamente mostrar a relação destes termos adimensionais e dimensionais.

Multiplicando então a equação (6.2.1) por $\frac{\mu}{\rho v_\tau^3 T_\tau}$, obtém-se a equação (6.2.2) de onde se extrai a relação entre os termos dimensionais e adimensionais, expressos nas equações (6.2.3) e (6.2.4).

$$\frac{\partial}{\partial y^+}[R_{ip}^+T^+ + v_i^+q_p^+ + 2v_p^+q_i^+] + 2\frac{\partial}{\partial y^+}\left[\overbrace{\frac{q_{ip}}{v_\tau^2T_\tau}}^{q_{ip}^+}\right] = \overbrace{\frac{\mu}{\rho v_\tau^3T_\tau}s_i}^{s_i^+} \tag{6.2.2}$$

onde

$$q_{ip} = v_\tau^2 T_\tau q_{ip}^+ \tag{6.2.3}$$

$$s_i = \frac{\rho v_\tau^3 T_\tau}{\mu} s_i^+ \tag{6.2.4}$$

Assim, pode-se mostrar que a equação escrita de forma adimensional, expressa ma equação (6.2.5), é idêntica à equação (3.2.21) (sem a derivada temporal, uma vez que esta foi excluída), porém com as variáveis adimensionais.

$$\frac{\partial}{\partial y^+}[R_{ip}^+ T^+ + v_i^+ q_p^+ + 2v_p^+ q_i^+] + 2\frac{\partial q_{ip}^+}{\partial y^+} = s_i^+ \tag{6.2.5}$$

Dessa forma, pode-se fazer todo o desenvolvimento na forma dimensional, mais conveniente, e posteriormente substituir pelas adimensionais, forma na qual as variáveis estão disponíveis nos arquivos de DNS.

6.2.2 Correlações Lineares

A primeira proposta para a correlação dos termos q_{ij} e s_i mantendo a questão linear proposta nas equações (6.1.3) e (6.1.4) é retirar um dos parâmetros de cada equação. Assim, propõe-se inicialmente as seguintes correlações:

$$s_i = f_0^v v_i \tag{6.2.6}$$

$$q_{ij} = e_0^1 R_{ij} \tag{6.2.7}$$

Aplicando estas correlações nas equações (6.1.1) e (6.1.2), obtém-se o seguinte conjunto de equações:

$$i = 1 \quad \frac{d}{dx_2}\left[R_{12}T + q_2 v_1 + 2e_0^1 R_{12}\right] = f_0^v v_1 \tag{6.2.8}$$

$$i = 2 \quad \frac{d}{dx_2}\left[R_{22}T + 2e_0^1 R_{22}\right] = 0 \tag{6.2.9}$$

Pode-se observar que integrando a equação (6.2.9) de $x_2 = 0$ a qualquer x_2, pode-se obter uma expressão direta para o parâmetro e_0^1:

$$e_0^1 = \frac{T}{2} \tag{6.2.10}$$

Este resultado é bastante conveniente pois dispensa uma modelagem em função de uma variável constitutiva, pois a expressão obtida já é uma expressão em função da variável constitutiva temperatura média, T.

Substituindo a equação (6.2.10) na equação (6.2.8), e dispondo dos arquivos em DNS, pode-se obter uma expressão para determinar o perfil do parâmetro f_0^v:

$$f_0^v = \frac{1}{v_1}\frac{d}{dx_2}\left[2R_{12}T + q_2 v_1\right] \tag{6.2.11}$$

Como se deseja obter uma expressão em função de uma variável constitutiva para os parâmetros do modelo, dois gráficos foram traçados: um expondo o parâmetro f_0^{v+} em função da temperatura média adimensional, T^+, e outro, fazendo f_0^{v+} em função da velocidade adimensional v^+. Os perfis seguem abaixo:

A legenda nas Figura 6.1 e Figura 6.2 refere-se ao número do Re_τ do escoamento simulado seguido do número de Pr em cada arquivo de DNS.

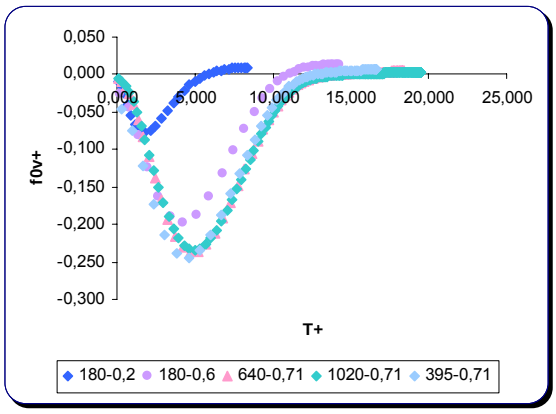


Figura 6.1 – Perfil de f_0^v em função de T^+ para a Primeira Proposta.

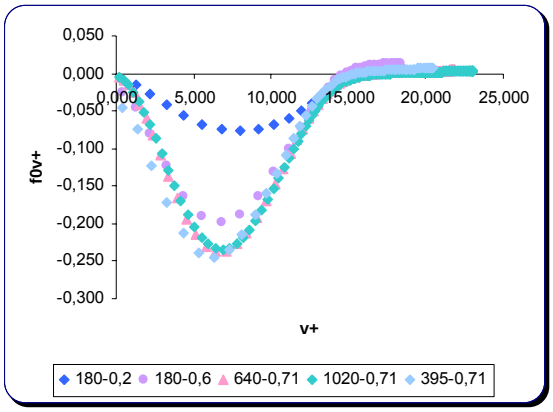


Figura 6.2 Perfil de f_0^v em função de v^+ para a Primeira Proposta.

Conforme se pode notar, o perfil do parâmetro f_0^{v+} varia de acordo com o número de Prandtl. Aparentemente, o valor do Re_τ do escoamento não interfere no perfil do parâmetro f_0^{v+}. Dessa forma, seria necessário fazer um modelagem para o parâmetro f_0^{v+} em função de uma das variáveis constitutivas (ou das duas eventualmente) e do número de Prandtl. Deve-se comentar que o perfil do parâmetro f_0^v é muito bom para modelagem, uma vez que possui um perfil assintótico no centro do escoamento.

Porém, antes mesmo que se partisse para a fase de modelagem dos parâmetros, decidiu-se testar a identidade do sistema para identificar, a priori, qualquer eventual problema de inversão.

Deve-se observar que neste caso, a inversão do sistema referido acima é apenas a inversão da equação (6.2.11), uma vez que a variável de interesse, o momento flutuante de calor – q_i – só aparece nesta equação. O sistema original era composto pelas equações (6.2.8) e (6.2.9). Porém, a equação (6.2.9) foi utilizada apenas para determinar uma expressão para o parâmetro e_0^1, conforme explicitado na equação (6.2.10). Assim, a equação (6.2.8) transformou-se na equação (6.2.11) que passou a ser a equação do balanço de energia para o termo turbulento.

O resultado do recálculo do momento de calor flutuante q_2 utilizando os valores originais dos parâmetros para cada arquivo de DNS segue abaixo.

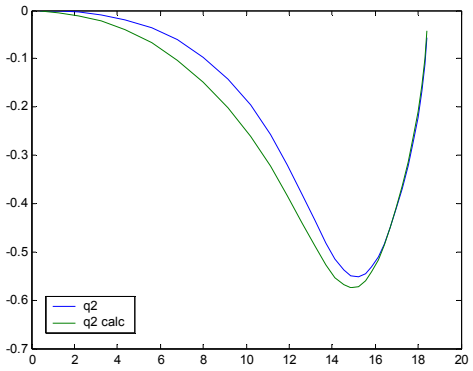


Figura 6.3 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 180 e Pr = 0,2. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

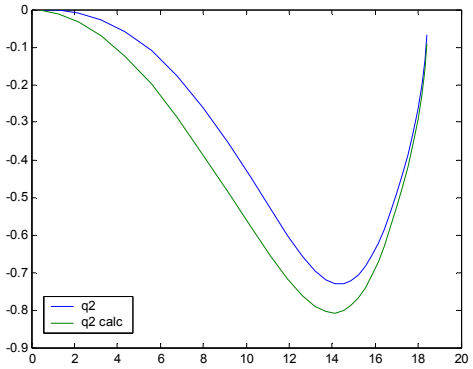


Figura 6.4 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 180 e Pr = 0,6. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

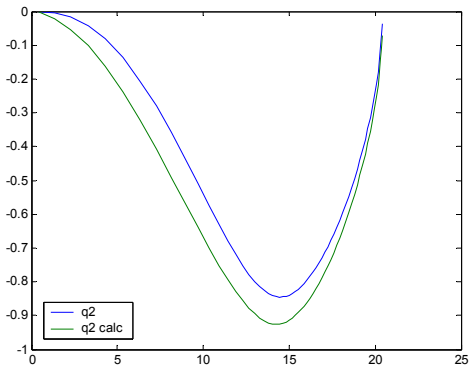


Figura 6.5 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 395 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

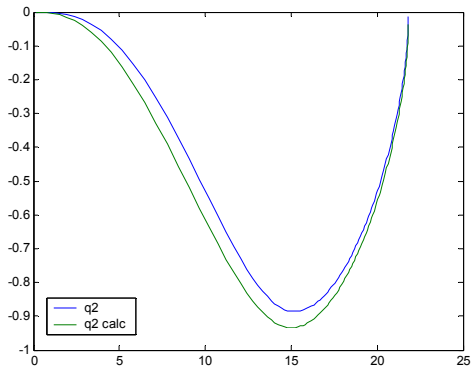


Figura 6.6 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ = 640 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

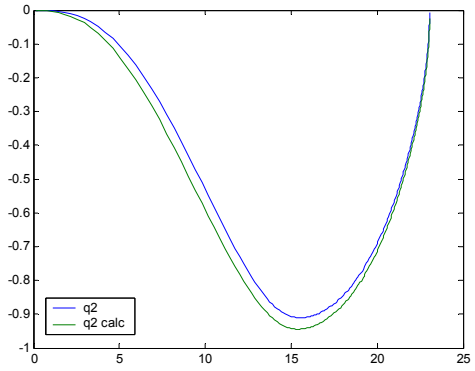


Figura 6.7 – Recálculo do momento de calor q_2 utilizando os parâmetros originais do arquivo de DNS que simulou um escoamento com Re_τ =1020 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

O resultado acima ainda não é conclusivo, pois apenas com a modelagem dos parâmetros é possível realmente afirmar que não há problemas na inversão do sistema. Pode-se notar que, mesmo testando a identidade do sistema, próximo à parede, há uma pequena diferença entre os valores originais e calculados de q_2.

A única crítica a esta proposta é que ela resultou num sistema onde só se calcula o momento de calor turbulento q_2, enquanto que, para o escoamento em questão, o momento de calor turbulento é não nulo e tão importante quanto o momento q_2.

Este fator chama a atenção para o fato de que as correlações para os termos s_i e q_{ij} do momento de calor turbulento devem possuir o termo q_i de modo que se possa

calcular ambos os momentos de calor q_1 e q_2, respectivamente para as posições i=1 e i=2.

Imediatamente, pode-se pensar na seguinte alternativa proposta pelas equações (6.2.12) e (6.2.13), onde ainda se respeita a proposta linear de Alfradique e Telles (2006).

$$s_i = f_0^q q_i \tag{6.2.12}$$

$$q_{ij} = e_0^1 R_{ij} \tag{6.2.13}$$

Substituindo estas expressões nas equações (6.1.1) e (6.1.2), obtém-se o seguinte conjunto de equações:

$$\frac{d}{dx_2}[R_{12}(T + 2e_0^1) + q_2 v_1] = f_0^q q_1 \tag{6.2.14}$$

$$\frac{d}{dx_2}[R_{22}(T + 2e_0^1)] = f_0^q q_2 \tag{6.2.15}$$

Pode-se observar por estas equações que para a determinação dos parâmetros, será necessário resolver o sistema concomitantemente. Porém, para recalcular os momentos de calor turbulento, pode-se inicialmente, resolver a equação (6.2.15) para q_2 e depois substituir seu valor na equação (6.2.14) para calcular q_1. Deve-se notar que o parâmetro f_0^{q+} ficará no denominador.

Na etapa de determinação dos parâmetros, notou-se que o perfil do parâmetro f_0^{q+} muda de sinal mais ou menos na metade do vetor posição. Como já se havia avaliado sua presença no denominador para recálculo dos momentos de calor turbulento, já se pode prever problemas na modelagem deste parâmetro que implicarão em perfis hiperbólicos no recálculo dos momentos de calor turbulentos.

Ainda querendo manter a correlação linear, só resta mais uma alternativa: manter a correlação para s_i igual na equação (6.2.12) e a correlação par q_{ij} igual a:

$$q_{ij} = e_0^0 \delta_{ij} \tag{6.2.16}$$

O sistema resultante desta proposta cai no mesmo caso anterior: f_0^{q+} no denominador para recálculo dos momentos de calor turbulento e perfil mudando de sinal aproximadamente na metade do vetor posição.

As possibilidades para se manter a correlação linear e ao mesmo tempo apresentar equações para ambos os momentos de calor turbulento se esgotaram. Resta então verificar as correlações não lineares.

6.2.3 Correlações Não Lineares

As opções de correlações não lineares não são infinitas, mas são muitas, uma vez que se pode combinar v_i, q_i e R_{ij}, em diversas ordens (expoente), e ainda pode-se utilizar um índice como somatório, viabilizando mais índices do que os que os termos turbulentos s_i e q_{ij} exigem. Porém, a experiência com o balanço de momento, descrita no Capítulo 4 desta dissertação, mostrou que quanto mais complexo o termo, pior ia ficando o perfil dos parâmetros no centro do escoamento. Assim, serão testadas as correlações mais simples.

Inicialmente, propuseram-se as equações (6.2.12) e (6.2.17) de modo a manter a linearidade na correlação de s_i.

$$q_{ij} = e_0^1 v_i q_j \tag{6.2.17}$$

Porém, esta proposta chegou ao mesmo resultado fatídico encontrado para as correlações lineares: o parâmetro f_0^{q+} tem seu perfil mudando de sinal e ainda presente no denominador das equações para recálculo dos momentos de calor turbulento.

Ainda mantendo a equação (6.2.12) para o termo turbulento s_i, resolveu-se testar para q_{ij} a seguinte correlação:

$$q_{ij} = \gamma q_i q_j \tag{6.2.18}$$

Substituindo as equações (6.2.12) e (6.2.18) nas equações (6.1.1) e (6.1.2) chega-se num conjunto de equações que o Matlab não foi capaz nem mesmo de rodar para determinar os parâmetros. Nem mesmo, eliminando-se as primeiras e últimas posições do vetor posição. Assim, esta é mais uma alternativa que não vai para frente.

As opções para a acompanhar a equação (6.2.12), para a correlação do termo s_i que garante a presença de ambos os momentos de calor turbulentos, de modo que não se apresentasse correlações complexas com termos de ordens maiores que um, terminaram.

Porém, observando-se a equação (6.2.18), pode-se notar que ela já garante a presença de ambos os momentos de calor turbulentos no sistema. Assim, pode-se propor como nova abordagem a equação (6.2.6) para a correlação do termo turbulento s_i e a equação (6.2.18) para a correlação do termo turbulento q_{ij}.

Substituindo as equações (6.2.6) e (6.2.18) nas equações (6.1.1) e (6.1.2), obtém-se o seguinte conjunto de equações:

$$\frac{d}{dx_2}[R_{12}T + q_2 v_1 + 2\gamma q_1 q_2] = f_0^v v_1 \tag{6.2.19}$$

$$\frac{d}{dx_2}[R_{22}T + 2\gamma q_2^2] = 0 \tag{6.2.20}$$

Este conjunto de equações pode ser reorganizado como no sistema (6.2.21) para a determinação do perfil dos parâmetros e como no sistema (6.2.24) para o recálculo dos momentos de calor turbulentos.

$$\begin{bmatrix} v_1 & -2q_1q_2 \\ 0 & -2q_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_0^v \\ \dfrac{d\gamma}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix} \tag{6.2.21}$$

$$I_1 = T\frac{dR_{12}}{dx_2} + R_{12}\frac{dT}{dx_2} + q_2\frac{dv_1}{dx_2} + v_1\frac{dq_2}{dx_2} + 2\gamma\left[q_1\frac{dq_2}{dx_2} + q_2\frac{dq_1}{dx_2}\right] \tag{6.2.22}$$

$$I_2 = T\frac{dR_{22}}{dx_2} + R_{22}\frac{dT}{dx_2} + 4\gamma q_2\frac{dq_2}{dx_2} \tag{6.2.23}$$

Onde:

$$\begin{bmatrix} 2\gamma q_2 & v_1 + 2\gamma q_1 \\ 0 & 4\gamma q_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dq_1}{dx_2} \\ \frac{dq_2}{dx_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \end{bmatrix} \tag{6.2.24}$$

Onde:

$$B_1 = f_0^v v_1 - T\frac{dR_{12}}{dx_2} - R_{12}\frac{dT}{dx_2} - q_2\frac{dv_1}{dx_2} - 2q_1q_2\frac{d\gamma}{dx_2} \tag{6.2.25}$$

$$B_2 = -T\frac{dR_{22}}{dx_2} - R_{22}\frac{dT}{dx_2} - 2q_2^2\frac{d\gamma}{dx_2} \tag{6.2.26}$$

Deve-se observar que para a etapa determinação dos parâmetros, é necessário fornecer um valor inicial (em $x_2 = 0$) para o parâmetro γ^+, uma vez que para calculá-lo é necessário resolver uma equação diferencial. Uma vez que este parâmetro encontra-se multiplicado por variáveis que são nulas na parede, ele pode assumir qualquer valor. Assim, ao resolver este problema no Matlab, estudou-se o valor que tornava o perfil do parâmetro mais contínuo possível.

Abaixo, seguem os perfis encontrados para os parâmetros em função de v^+ e T^+ e o teste de identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20).

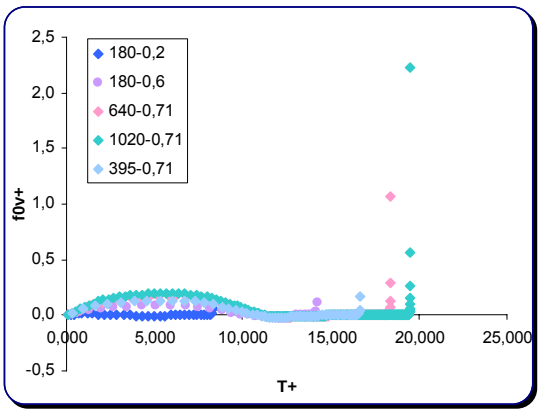


Figura 6.8 – Perfil do parâmetro f_0^{v+} em função de T^+ para a Proposta Não Linear.

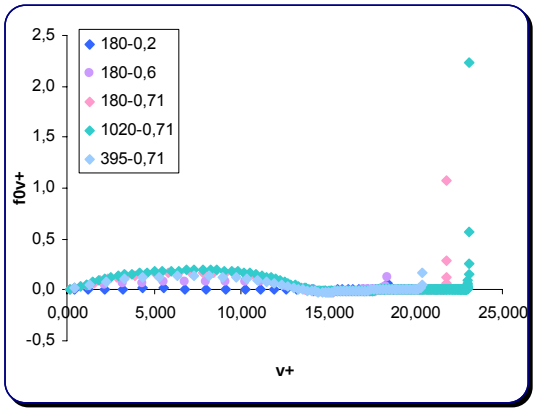


Figura 6.9 – Perfil do parâmetro f_0^{v+} em função de v^+ para a Proposta Não Linear.

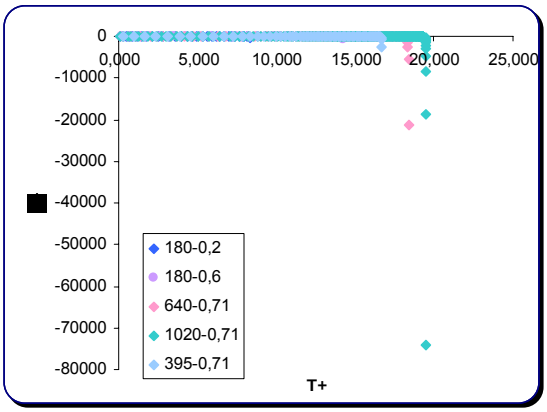


Figura 6.10 – Perfil do parâmetro γ^+ em função de T^+ para a Proposta Não Linear.

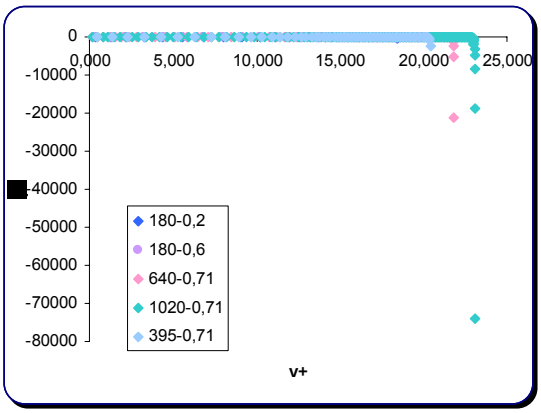


Figura 6.11 – Perfil do parâmetro γ^+ em função de v^+ para a Proposta Não Linear.

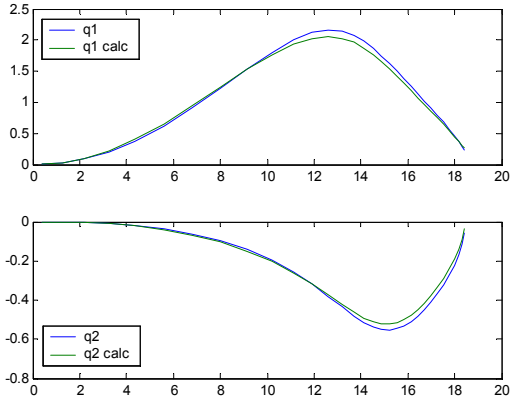


Figura 6.12 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 180 e Pr = 0,2. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

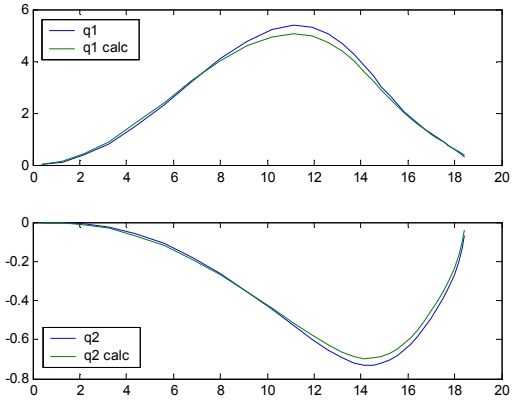


Figura 6.13 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 180 e Pr = 0,6. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

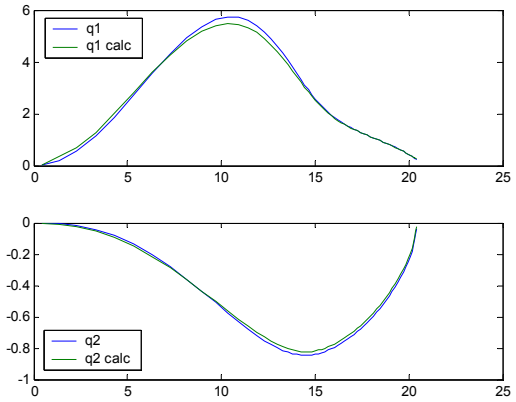


Figura 6.14 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 395 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

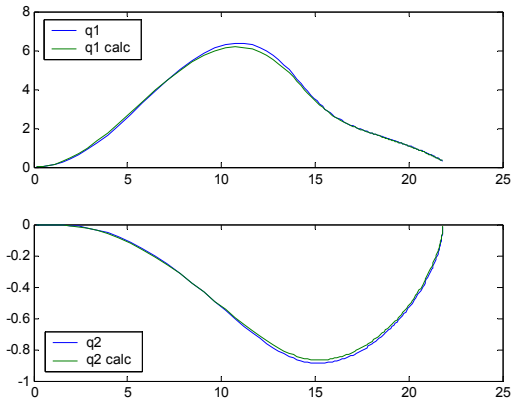


Figura 6.15 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 640 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

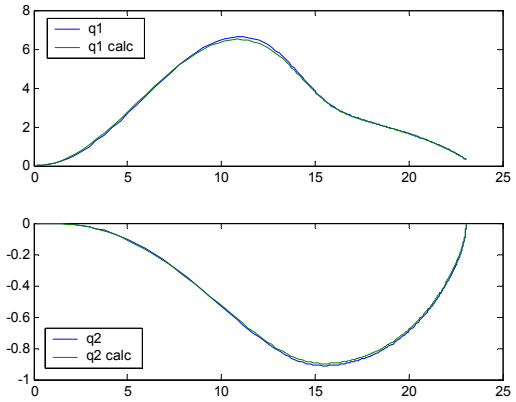


Figura 6.16 – Teste da identidade do sistema formado pelas equações (6.2.19) e (6.2.20) para o Arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

Apesar de o teste de identidade ter sido realizado com extremo sucesso em todos os arquivos de DNS utilizados para a determinação dos parâmetros do novo modelo de turbulência, resultado este que pode ser conferido nas Figura 6.12 a Figura 6.16, o perfil dos parâmetros do modelo, ilustrados nas Figura 6.8 a Figura 6.11, apresentou um comportamento de difícil modelagem, seja em função de v^+ ou T^+.

Assim, antes de realmente partir para tentar fazer a modelagem do sistema, decidiu-se por testar a sensibilidade do sistema à modelagem. Decidiu-se fazer o ajuste dos parâmetros apenas para o arquivo de DNS que apresentava Re_τ = 1020 e Pr = 0,71 até v^+ = 15 e testar o recálculo dos momentos de calor turbulento deste arquivo com os parâmetros modelados. Optou-se por fazer inicialmente a modelagem até v^+=15, pois observando as Figura 6.8 e Figura 6.9, pode-se perceber que o perfil do parâmetro muda drasticamente a partir deste valor.

A modelagem dos parâmetros f_0^{v+} e γ^+ encontra-se respectivamente nas Figura 6.17 e Figura 6.18. Deve-se notar, pelos coeficientes de ajuste dos polinômios presentes na Tabela 6.1, onde se encontram os coeficientes dos polinômios de ajuste dos parâmetros do modelo na forma da equação (4.1.7), que a modelagem está razoavelmente fiel aos dados originais.

Optou-se por modelar também a derivada do parâmetro γ^+, pois a derivada teórica da expressão do polinômio do parâmetro γ^+ não ficou tão boa quanto um ajuste independente de um polinômio, conforme se pode conferir na Figura 6.19.

Tabela 6.1 – Coeficientes dos polinômios de ajuste dos parâmetro f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71.

	$0 \le v^+ \le 15$							
	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	$a6$	R^2
f_0^{v+}	1,257037E-06	-5,002939E-05	7,198420E-04	-4,471997E-03	6,884021E-03	5,129905E-02	-5,578946E-03	0,9998
γ^+	-	1,221871E-03	-6,075591E-02	1,154799E+00	-1,049730E+01	4,557223E+01	-7,908666E+01	0,8814
$d\gamma^+$	7,865355E-04	-4,158906E-02	8,699152E-01	-9,127568E+00	5,016881E+01	-1,360923E+02	1,438173E+02	0,9907

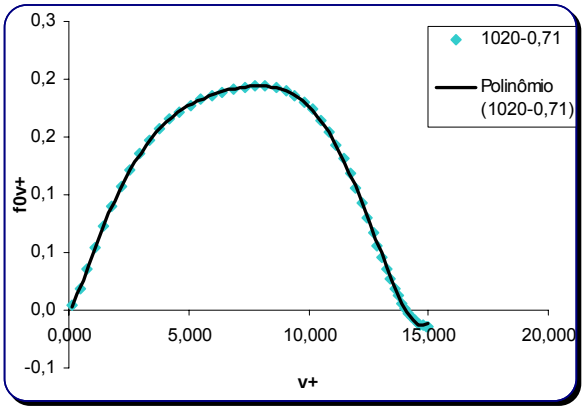


Figura 6.17 – Ajuste pelo polinômio da Tabela 6.1 para $v^+ \leq 15$ para o parâmetro f_0^{v+} para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71.

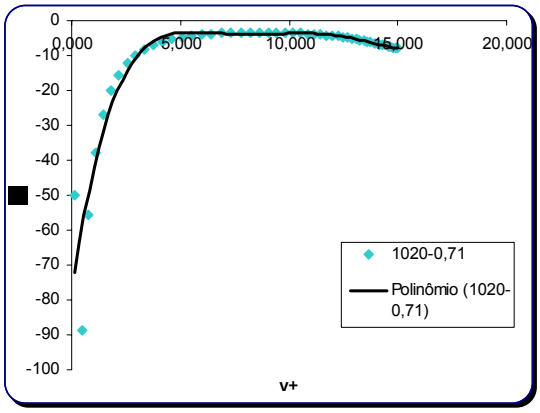


Figura 6.18 – Ajuste pelo polinômio da Tabela 6.1 para $v^+ \leq 15$ para o parâmetro γ^+ para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71.

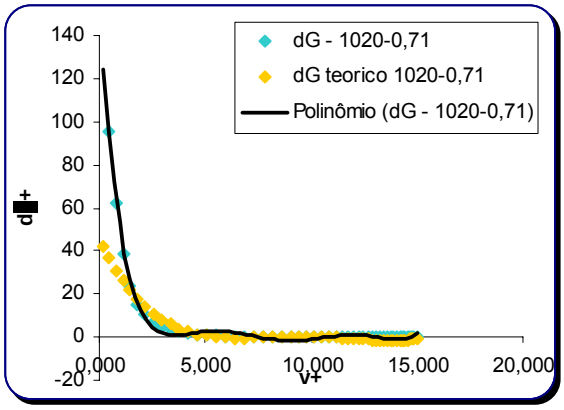


Figura 6.19 – Comparação do Ajuste pelo polinômio da Tabela 6.1 e pela derivada da expressão analítica do polinômio de ajuste do parâmetro γ^+ para $v^+ \leq 15$ para o parâmetro $d\gamma^+$ para o arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71.

Uma vez modelados os parâmetros para o arquivo de DNS com Re = 1020 e Pr = 0,71, pode-se tentar recalcular os momentos de calor turbulentos com os parâmetros modelados. O resultado do recálculo dos momentos de calor turbulento segue abaixo.

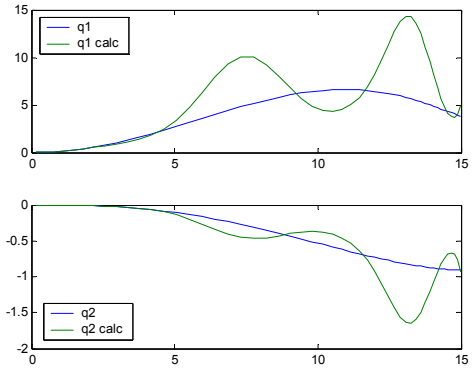


Figura 6.20 – Recálculo dos momentos de calor turbulento do arquivo de DNS com Re_τ = 1020 e Pr = 0,71 com os parâmetros modelados pelos polinômios, conforme Figura 6.17 a Figura 6.19. Dados de DNS provenientes do site *http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/, em 24/06/07*

Conforme se pode notar, o recálculo dos momentos de calor turbulento não foi realizado com sucesso. Ao se investigar o porquê deste comportamento tão oscilante para os momentos de calor turbulentos quando calculados com os parâmetros modelados, observou-se que os termos auxiliares B_1 e B_2, definidos nas equações (6.2.25) e (6.2.26) são extremamente sensíveis aos parâmetros, uma vez que estes estão muito bem modelados pelos polinômios e mesmo assim, causaram uma divergência enorme, conforme se pode notar nas Figura 6.21 e Figura 6.22. Os demais termos do sistema (6.2.24) também foram avaliados com os valores originais dos parâmetros f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ e com os valores provenientes dos polinômios ajustados e não apresentaram diferenças tão significativas.

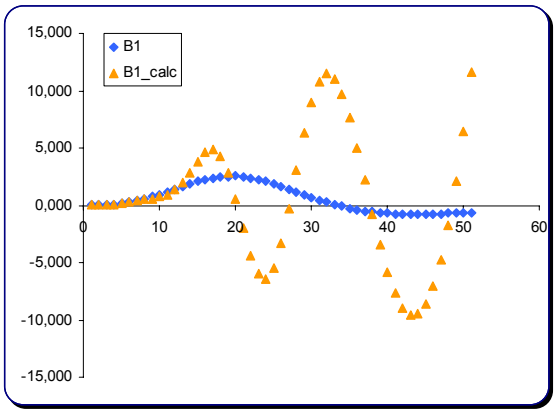


Figura 6.21 – B_1, expresso pela equação (6.2.25), calculado com os valores originais dos parâmetros f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ e calculado com a modelagem destes parâmetros pelos polinômios da Tabela 6.1.

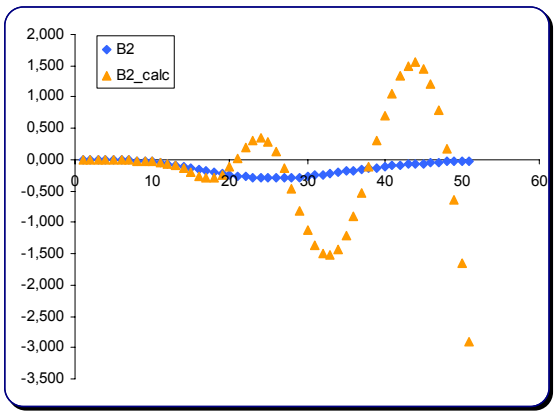


Figura 6.22 – B_2, expresso pela equação (6.2.26), calculado com os valores originais dos parâmetros f_0^{v+}, γ^+ e $d\gamma^+$ e calculado com a modelagem destes parâmetros pelos polinômios da Tabela 6.1.

Dessa forma, o estudo inicial dos parâmetros do balanço de energia encerra-se aqui deixando a mensagem de que para se obter parâmetros que viabilizem a proposta de Alfradique e Telles (2006) para as equações de balanço dos momentos de calor turbulentos, dever-se-á modificar as equações propostas no artigo de Alfradique e Telles (2006), assim como feito neste trabalho para o balanço de momento.

CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES

Após todas as diferentes abordagens para se resolver o problema na determinação dos parâmetros do balanço de momento para o novo modelo de turbulência, pode-se dizer que se alcançou um resultado bastante satisfatório. O mesmo, porém, não pode ser dito para os parâmetros do balanço de energia.

O perfil dos parâmetros do balanço de momento determinados neste trabalho permitiu uma reprodução bastante fiel de todos os arquivos de DNS testados, para todas as faixas do Número de Reynolds, no intervalo definido por $y^+ > 3$ e $v^+ < 17$. Este resultado é bastante importante, pois modela justamente a faixa onde os componentes do tensor de Reynolds apresentam valores mais significativos, isto é, onde a intensidade de turbulência é máxima.

O insucesso da implementação do novo modelo de turbulência em um pacote de CFD não afeta a conclusão acima, pois o problema pode ter sido gerado por diferentes motivos. Por exemplo, o problema pode ser devido a alguma deficiência intrínseca do CFX 11 para a implementação de novos modelos de turbulência, uma vez que este não é um procedimento freqüente por parte dos usuários e, por isso, pode ainda não ter sido suficientemente testado pelo suporte do programa para garantir a qualidade dos resultados obtidos. Outra possibilidade é que se pode ter entrado com algum *input* não apropriado, uma vez que se obteve um resultado não esperado na simulação onde o campo de velocidades era fornecido e não precisava ser recalculado.

Os parâmetros do balanço de momento determinados neste trabalho podem ainda ser implementados em conjunto com outros modelos de turbulência, ficando por sua responsabilidade a faixa do escoamento onde teve uma performance que se destacou dos demais modelos de turbulência tradicionais – k-ε, SSG e SST – $y^+ > 3$ e $v^+ < 17$.

Este teste infelizmente não era possível de ser implementado no CFX.11 sem que fosse aberto o código fonte e, por isso, não foi testado.

Deve-se ressaltar que o novo modelo de turbulência só será efetivamente validado quando for aplicado em escoamentos com outras geometrias e prever os componentes do tensor de Reynolds com melhor precisão que os modelos de turbulência já consagrados.

Quanto ao balanço de energia, pode-se dizer que as abordagens aqui apresentadas não obtiveram sucesso, porém, nada impede que outras configurações, inclusive propondo modificações no modelo de turbulência originalmente proposto por Alfradique e Telles (2006), não possam vir a trazer resultados satisfatórios.

Os parâmetros do balanço de massa não chegaram a ser determinados. Isto se deve, principalmente, a dois fatores: primeiro, o fato de não haver dados de DNS disponíveis com transferência de massa na literatura e isto inviabilizaria a metodologia adotada para os demais balanços; segundo que, observando-se as equações do fechamento do balanço de massa e comparando-as com as equações do fechamento do balanço de energia, nota-se que são idênticas se as propriedades escalares temperatura e concentração fossem substituídas for uma propriedade escalar genérica. Com esta observação e com o resultado obtido para os parâmetros do balanço de energia, o estudo do fechamento do balanço de massa não se justificaria. Pode-se perceber, inclusive, que uma vez resolvendo o problema da determinação dos parâmetros do balanço de energia, estar-se-ia praticamente resolvendo o balanço de fechamento de massa também, sendo necessário, provavelmente ajustar os coeficientes dos parâmetros.

Assim, com este trabalho pode-se concluir que foram dados passos importantes no caminho da implementação do novo modelo de turbulência proposto por Alfradique e Telles (2006).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alfradique, M.F., Telles, A. S. (2006), Closure of turbulence fluxes for the transport of momentum, energy and mass. AIChE Journal, vol. 52, n. 7, pp. 2684-2696.

Alho, A. T. P. e Ilha, A. (2006), Simulação Numérica de Escoamentos Complexos. Em Freire, A. P; S. et al (Eds), Turbulência, vol.5, tomo 1, ABMC

Bird, R. Byron, Stewart, Warren E., Lightfoot, Edwin N. (2002), Transport Phenomena; 2nd. edition; John Wiley & Sons, Inc.

Boussinesq, J. (1877), Theorie de l'ecoulement tourbillant, Mem. Pré. Par Div. Sav., Acad. Sci. Inst. Fr., vol. 23, pp. 31-64.

CFX (2005), Manual do CFX-10, ANSYS Technology.

Dehkissia S., Larachi F., Rodrigue, D., Chornet, E. (2004), Characterization of Doba–Chad heavy crude oil in relation with the feasibility of pipeline transportation. Fuel, vol. 83, pp. 2157-2168.

Fox, R. W. e McDonald, A. T. (2001), Introdução à Mecânica dos Fluidos; 5ª Edição; LTC

Friedrich, R., Hüttl, T.J., Manhart, M., Wagner, C. (2000), Direct numerical simulation of incompressible turbulent flows. Computer & Fluids, vol. 30, pp. 555-579.

Hinze, J. O. (1975), Turbulence; 2nd. Edition; McGraw-Hill

Incropera, F. P e DeWitt, D. P., (2002), Transferência de Calor e de Massa; 5ª Edição; LTC

Launder BE, Reece G, Rodi W. (1975), Progress in the development of a Reynolds stress turbulence closure. J of Fluid Mech, vol. 68, pp. 537-566.

Lomax, H., Pulliam, T.H., Zingg, D.W. (2001), Fundamentals of Computacional Fluid Dynamics, Springer, New York.

Lui, I.S., Muller, I. (1983), Extended thermodynamics of classical and degenerate gases. Archive for Rational Mechanics and Analysis, vol. 46, pp. 285-332.

Klein, T. S. (2006), Determinação dos Parâmetros de um Novo Modelo de Turbulência com Aplicação em Fluidos de Petróleo, Monografia de Conclusão de Graduação. Escola de Química – UFRJ

MAXIMA (2006), Manual do Pacote de Estimação de Parâmetros MAXIMA, PEQ/COPPE - UFRJ

Medronho, R.A. (2005), Informação Pessoal

Moin, P., Mahesh, K. (1998), Direct numerical simulation: a tool in turbulence research. Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 30, pp. 539-578.

Pinto, J. C. C. S. (2006), Informação Pessoal

Pope, S.B. (1975), A more general effective viscosity hypothesis. Journal of Fluid Mechanics, vol. 72, pp. 331-340.

Prandtl, L. (1925), Bericht uber untersuchungen fur ausgebildete turbulenz. Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Physik, vol. 5, pp. 136-139.

Speziale,C.G. (1995), A Review of Reynolds Stress Models for Turbulent Shear Flows, Research supported by the National Aeronautics and Space Administration under NASA Contract. NASA Langley Research Center, Hampton.

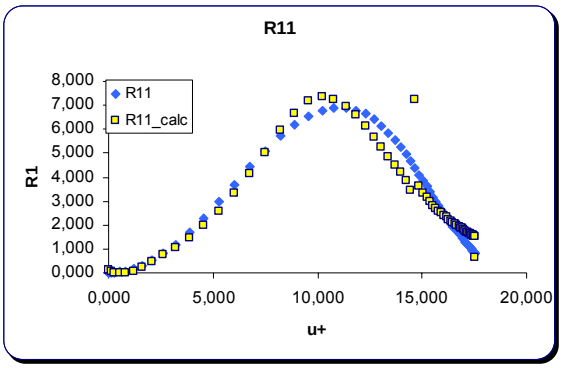
Telles, A.C. S.S. (2005), Informação Pessoal

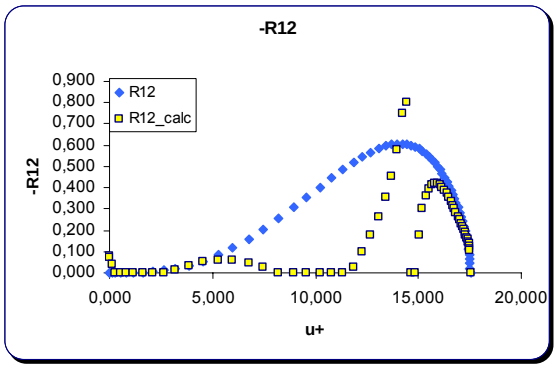
Versteeg, H.K., Malalasekera, W. (1995), An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method, Longman, London.

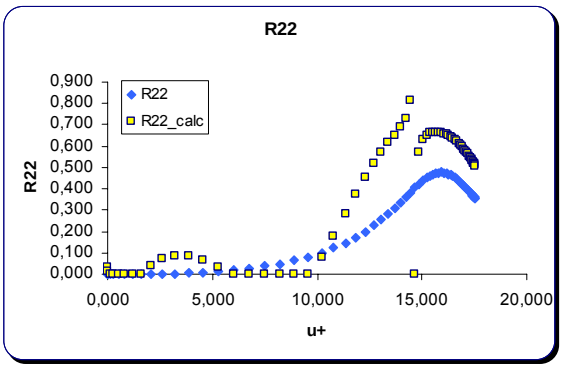
Wolfshtein, M. (1969), The velocity and temperature distribution in one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient. Int. J. Heat Fluid Fl., vol. 12, pp. 301-318.

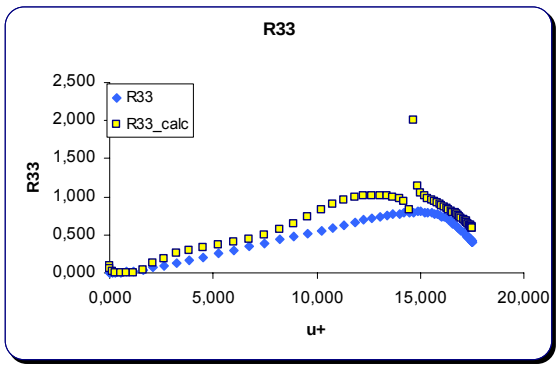
Anexo 1– Resultado da Validação dos Parâmetros Determinados Pela Correção das Equações Utilizadas em Klein (2006) nos Demais Arquivos de DNS

a) CH12_PG.WL6

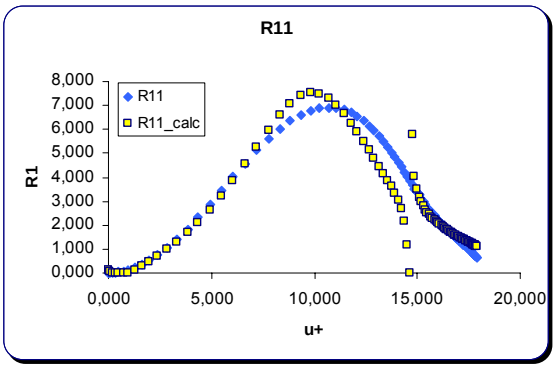


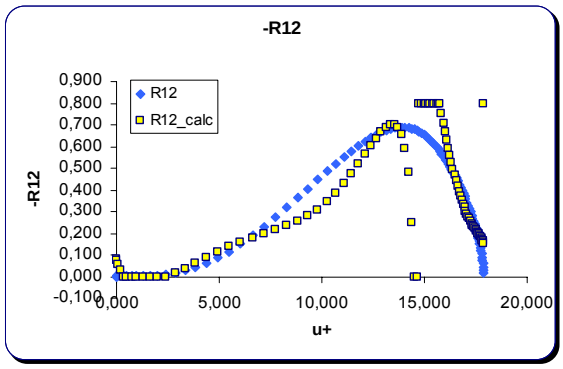


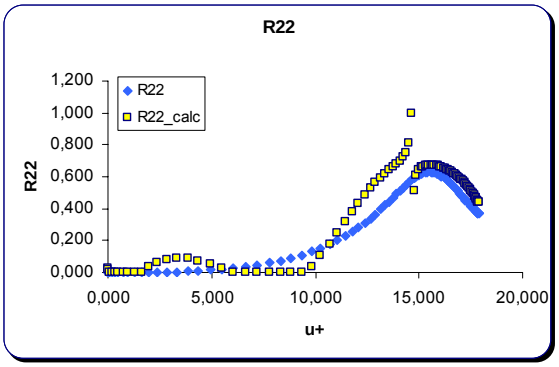


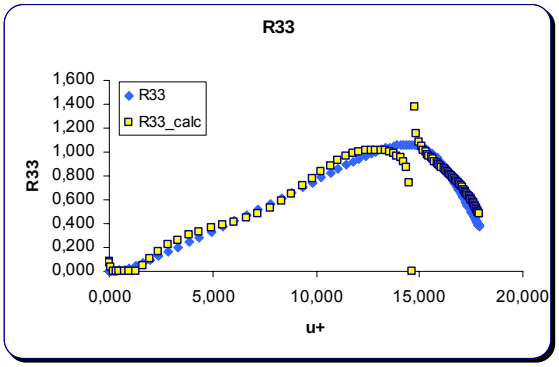


b) CH12_PG.WL7

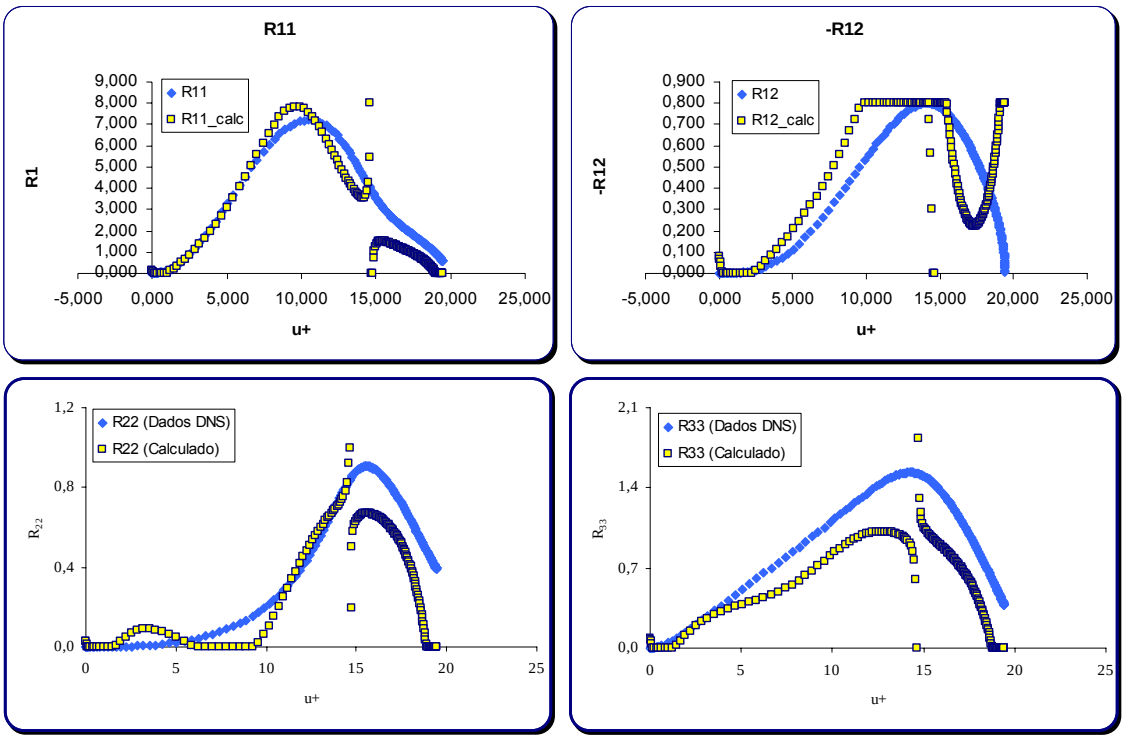




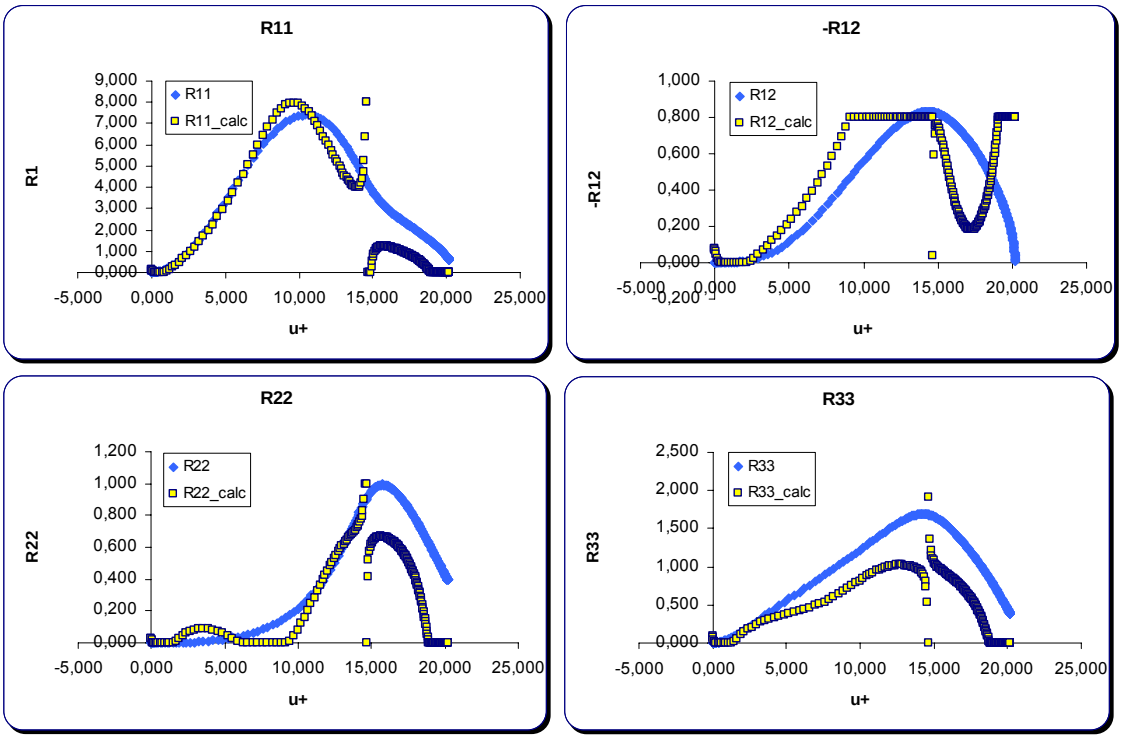




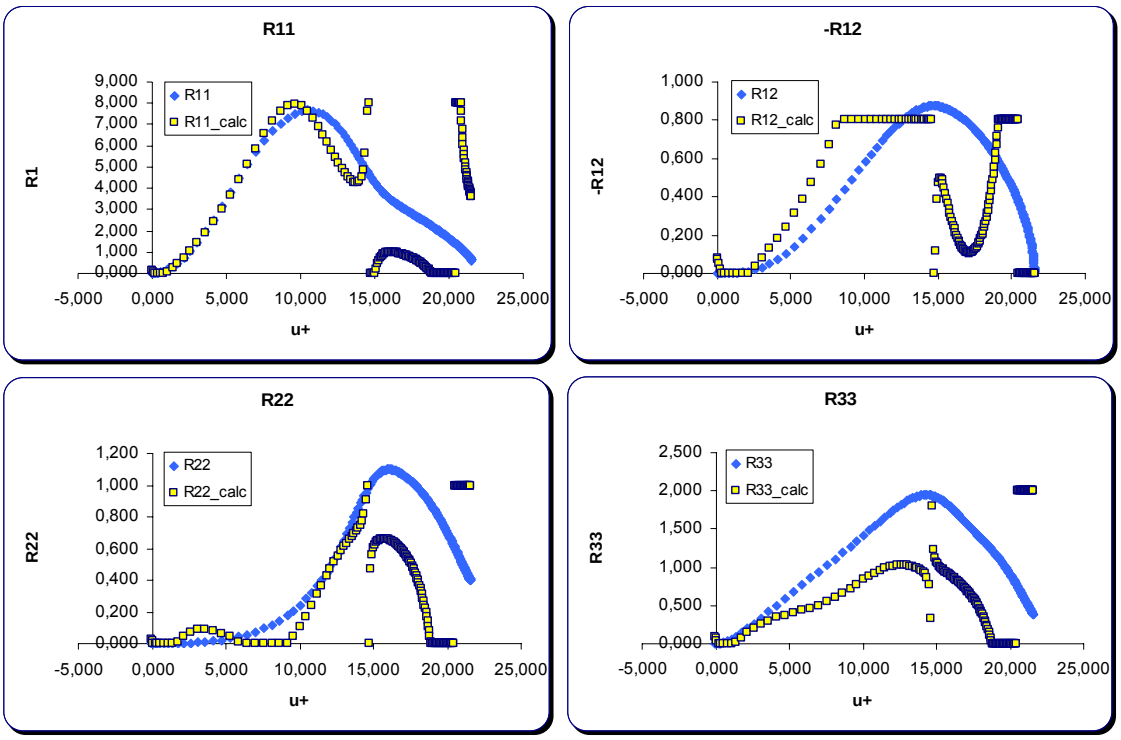
c) CH12_PG.WL8



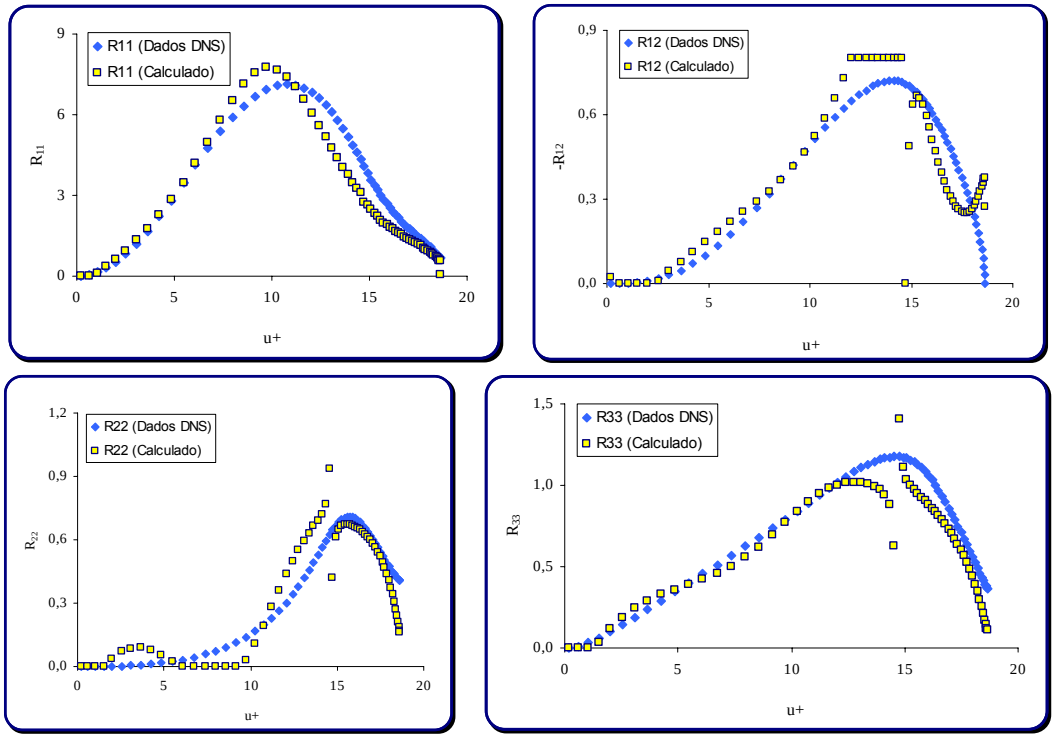
d) CH12_PG.WL9



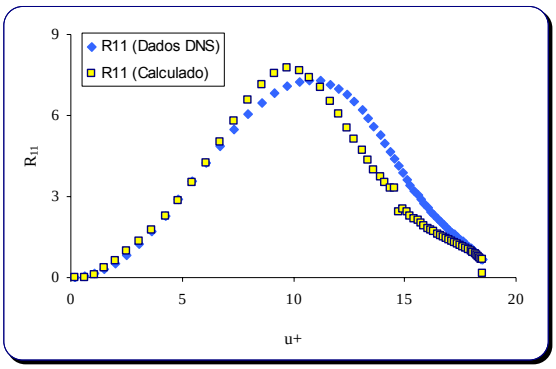
e) CH12_PG.WL10

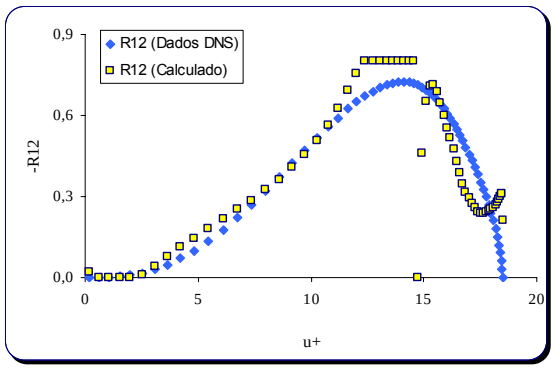


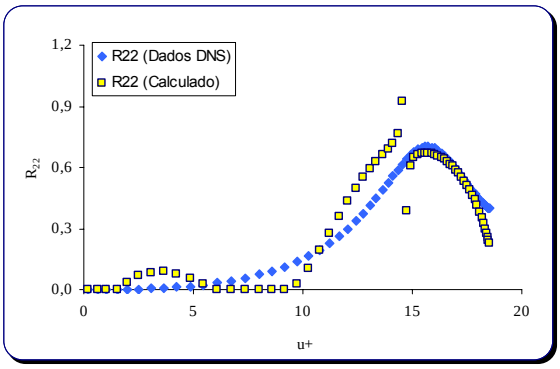
f) Ch180_4th

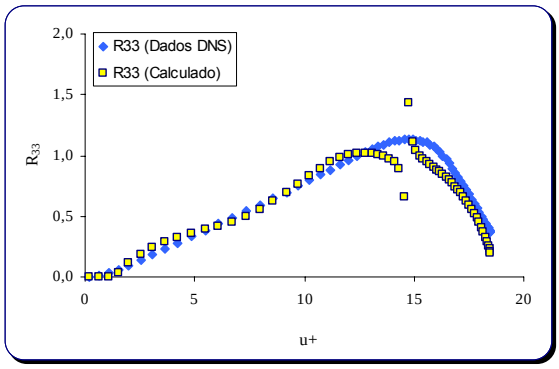


g) Ch180

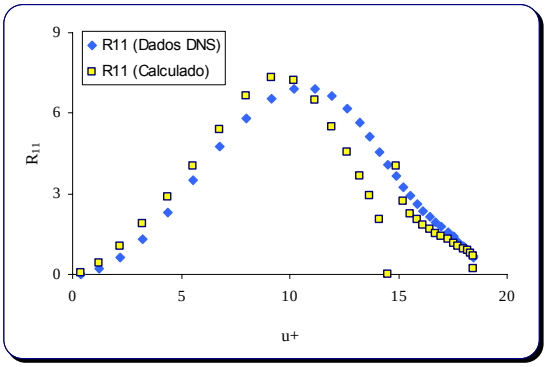


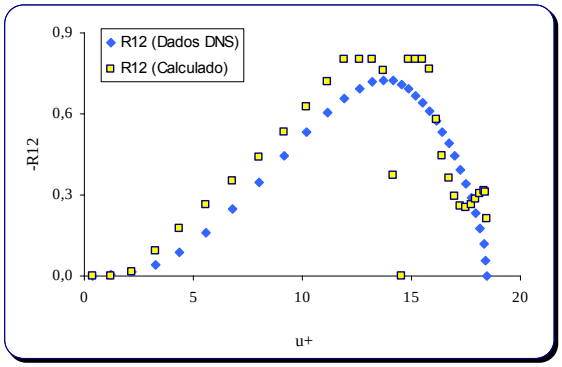


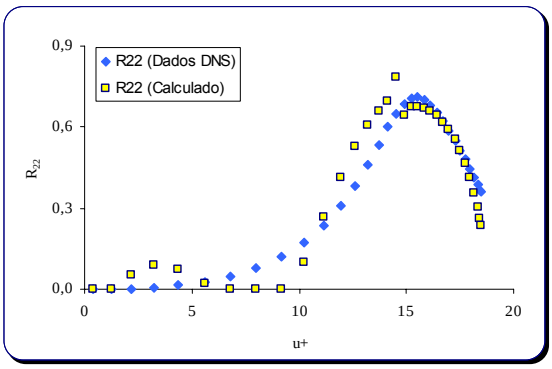


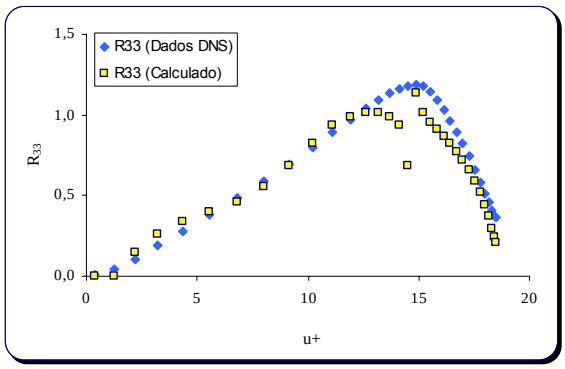


h) Ch180_b

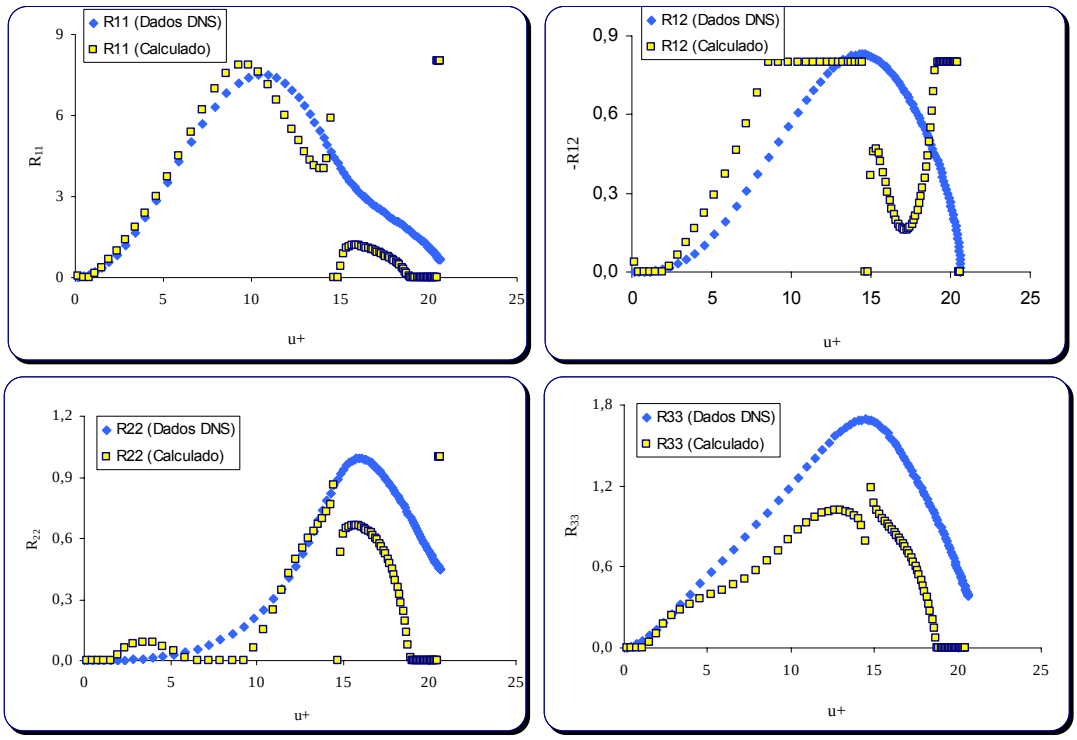




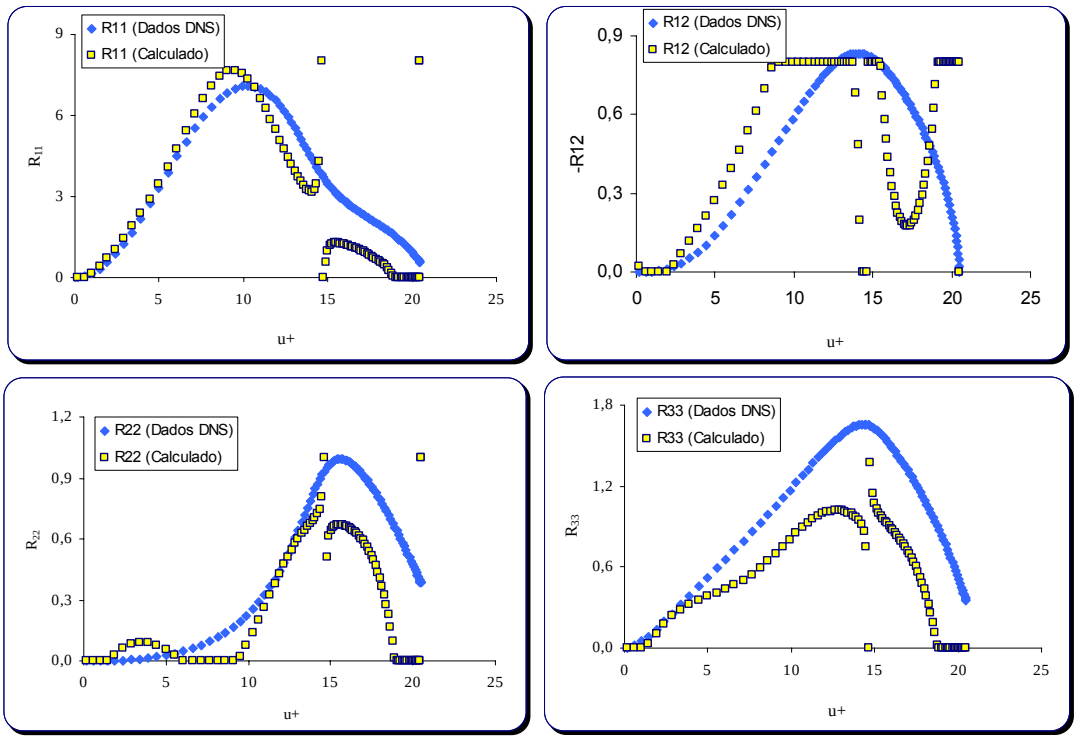




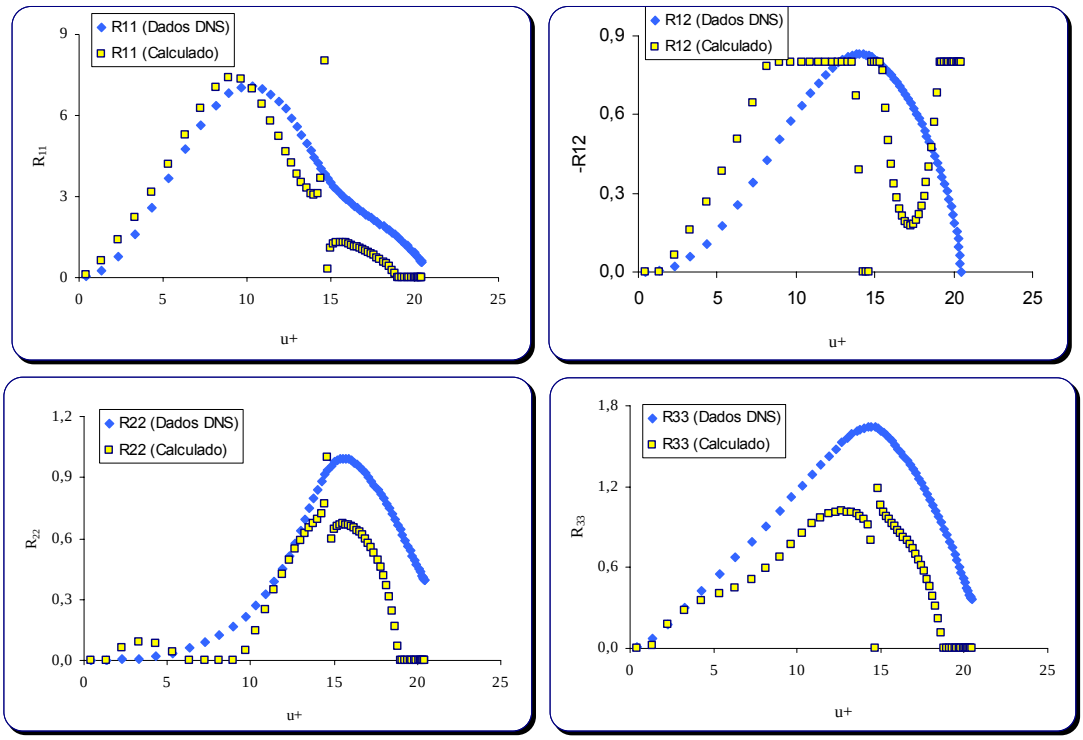
i) Ch395_4th



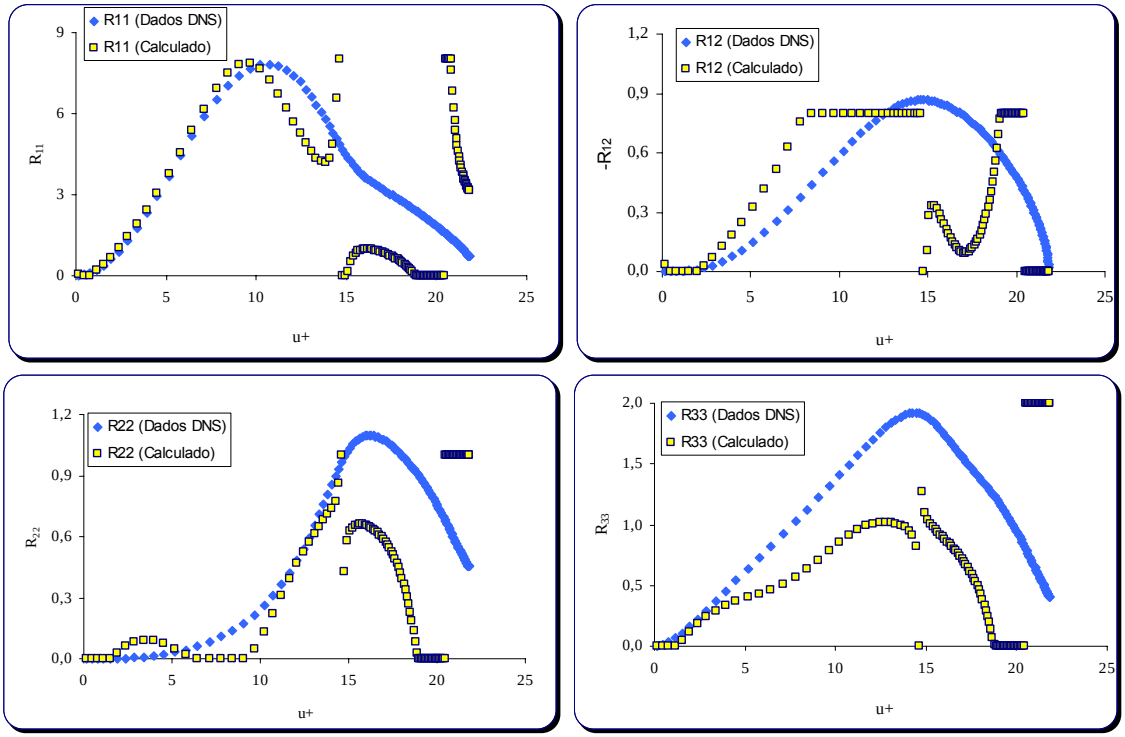
j) Ch395



l) Ch395_b

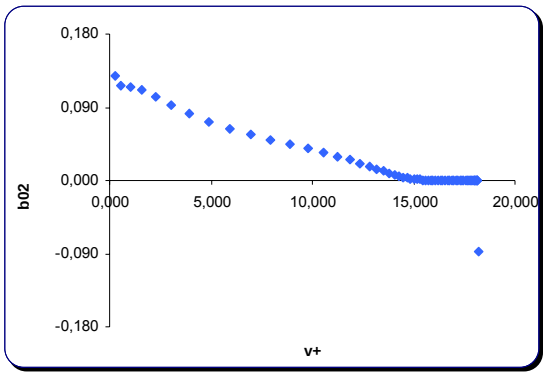


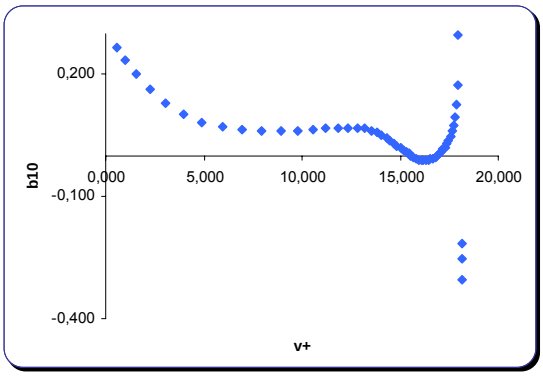
m) Ch640

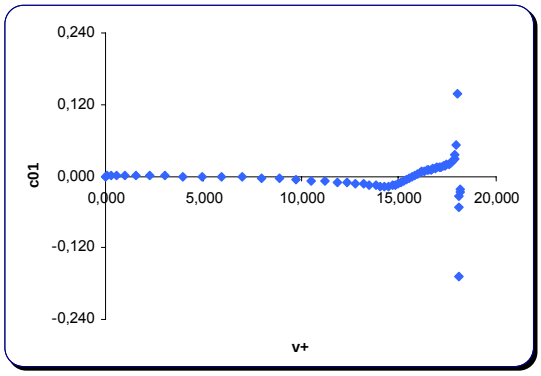


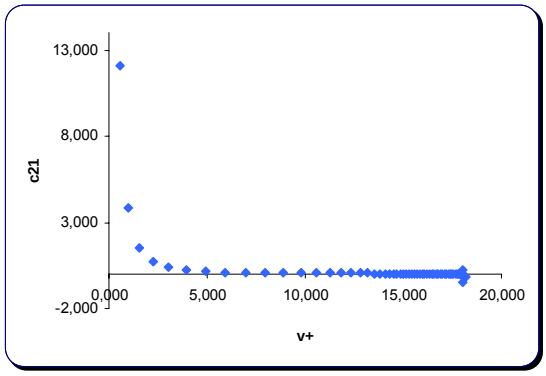
Anexo 2 – Perfil dos Parâmetros Obtidos Para Cada Um dos Sistemas Gerados Pela Proposta das Correlações Não Lineares

Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.41)

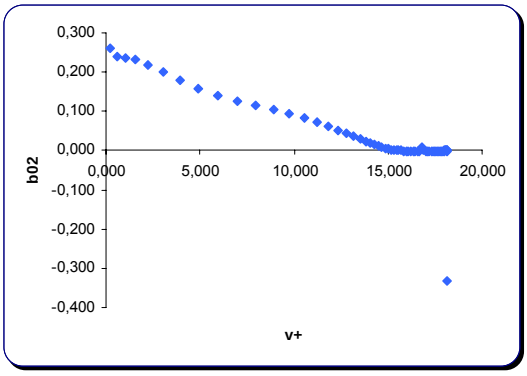


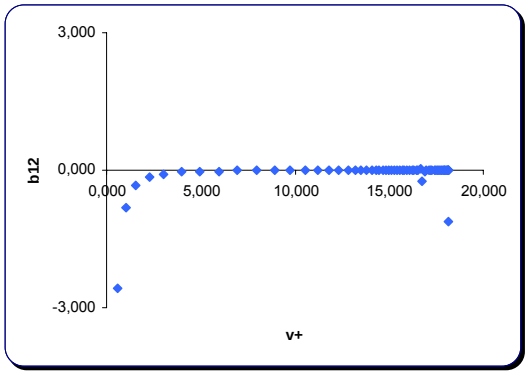


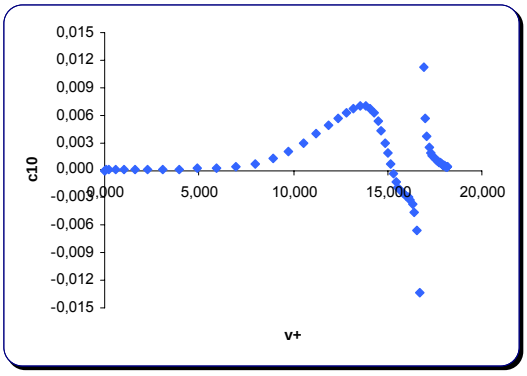


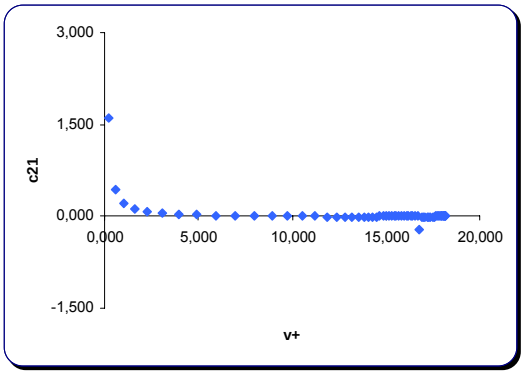


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.42)

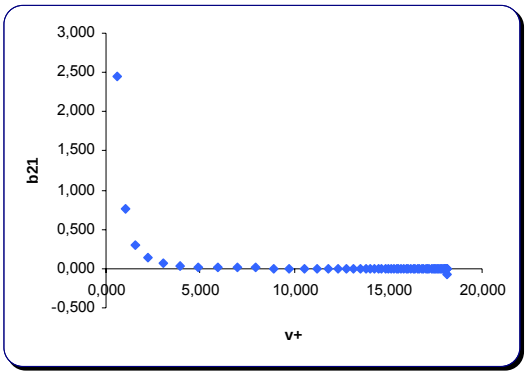


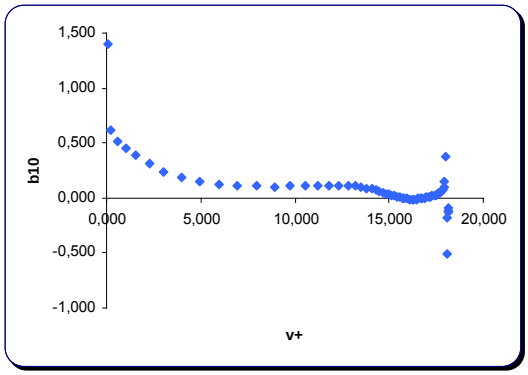


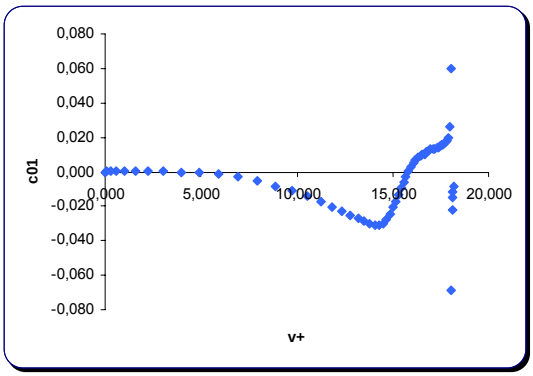


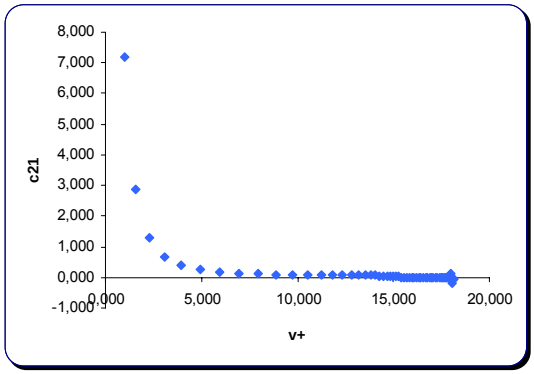


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.43)

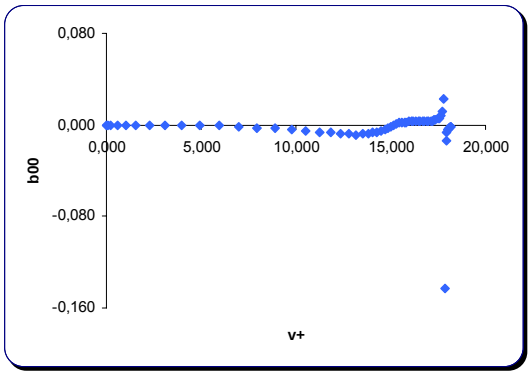


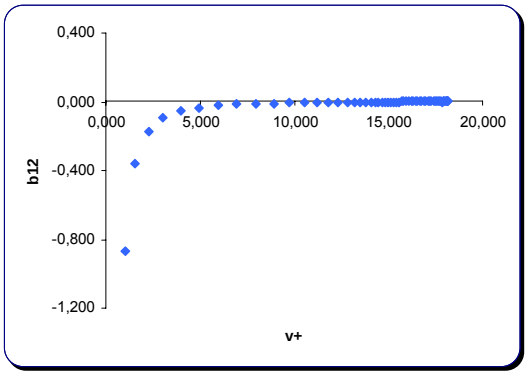


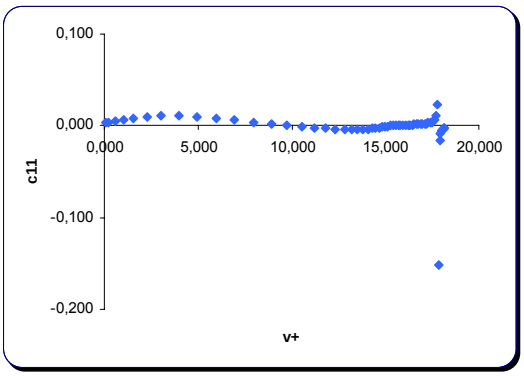


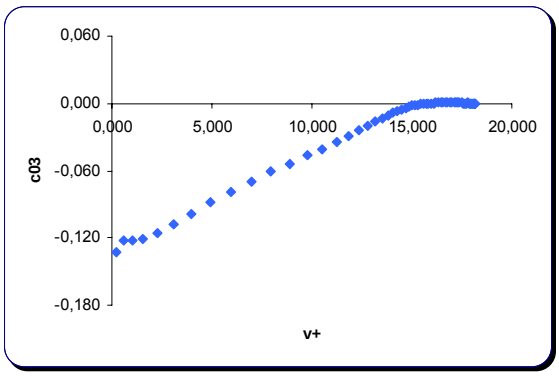


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.44)

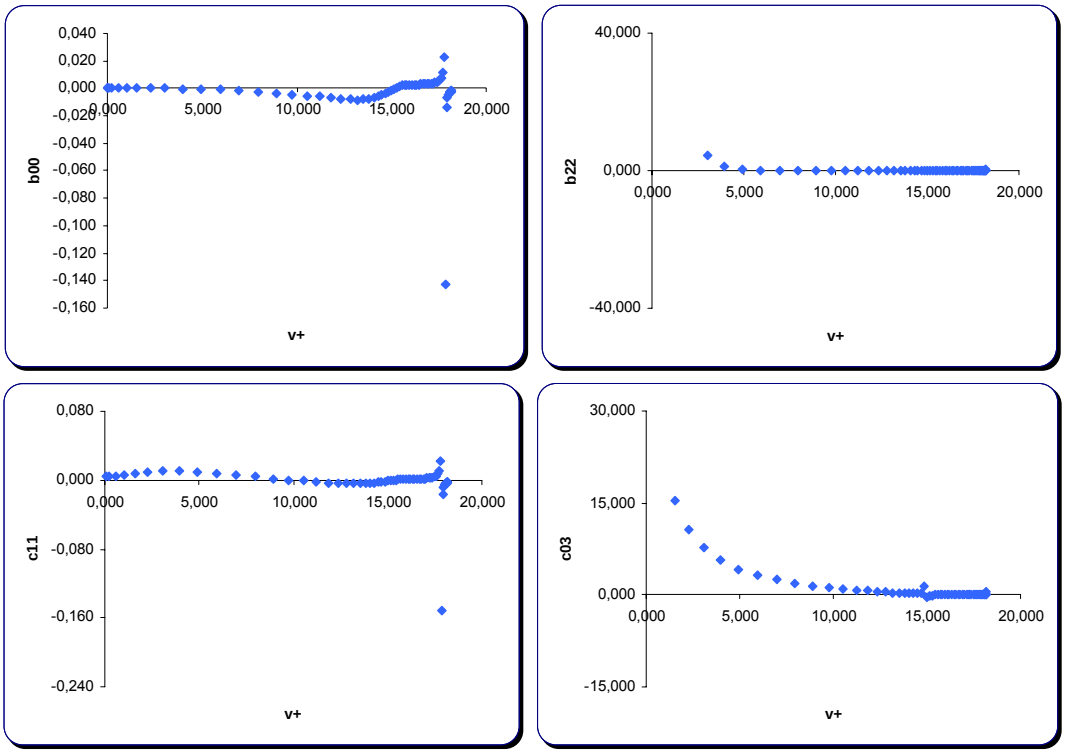




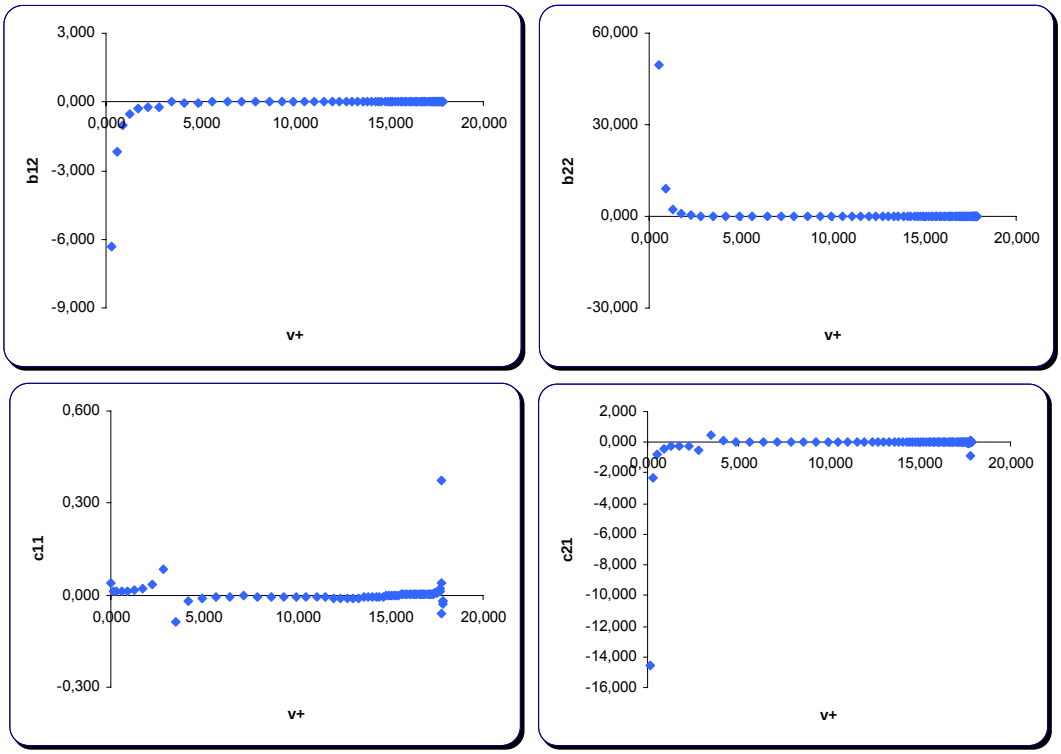




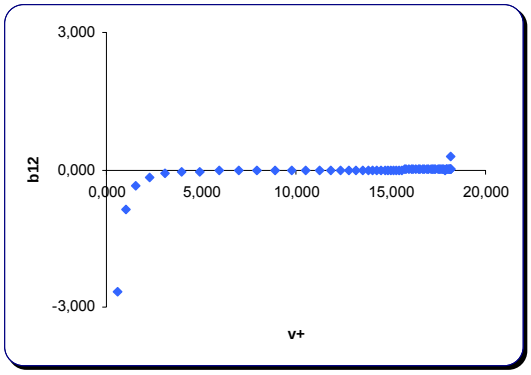
Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.45)

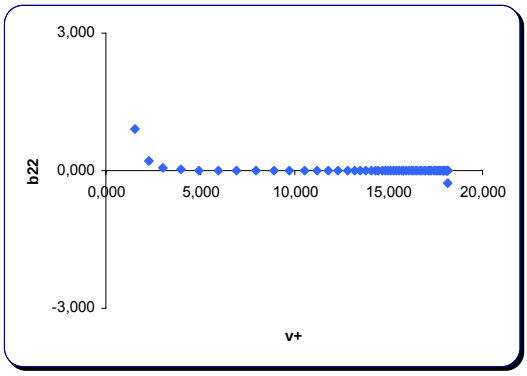


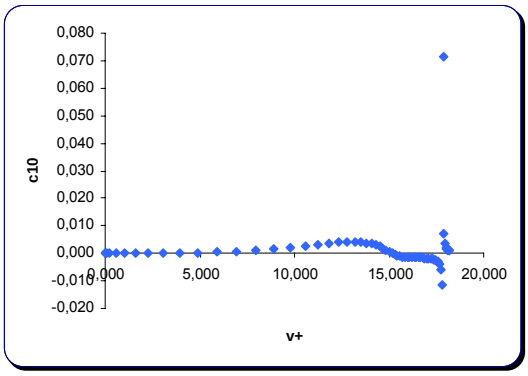
Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.46)

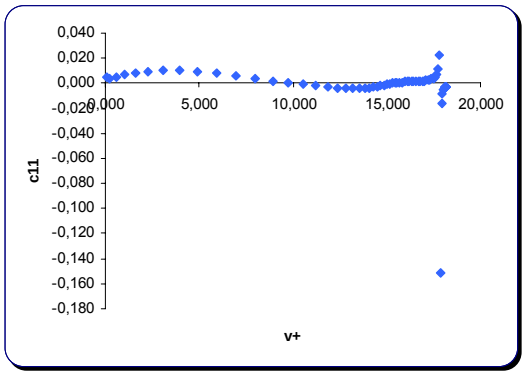


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.47)

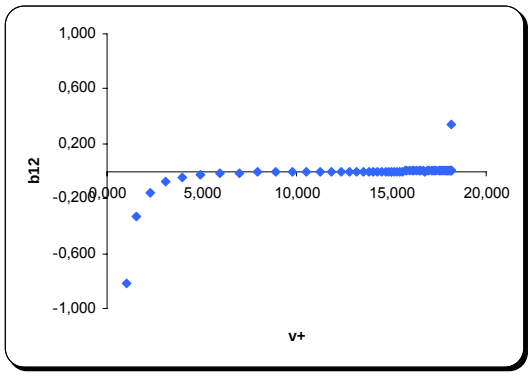


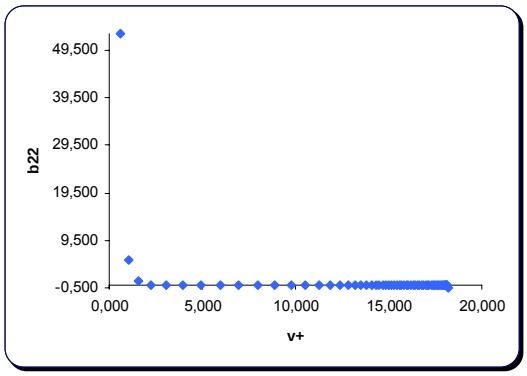


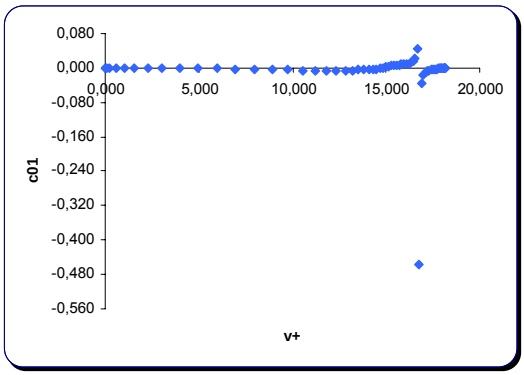


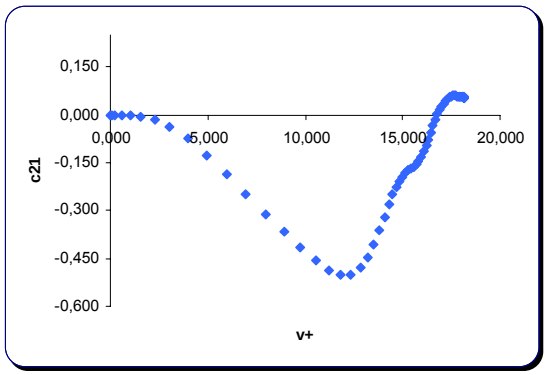


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.48)

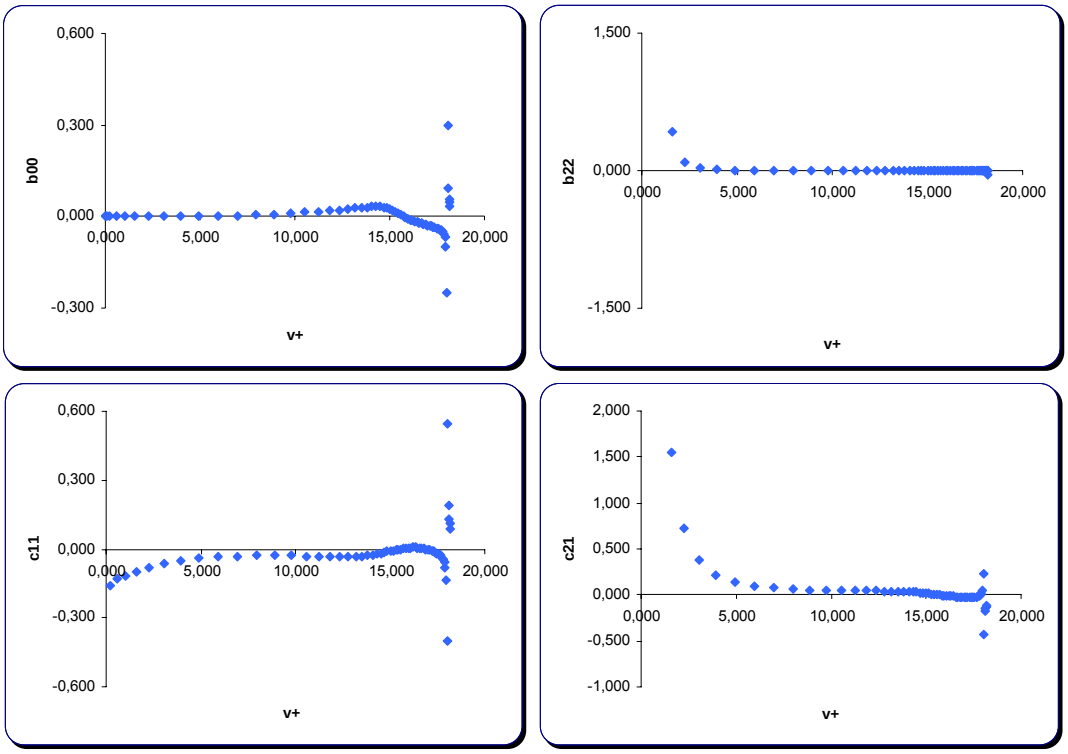




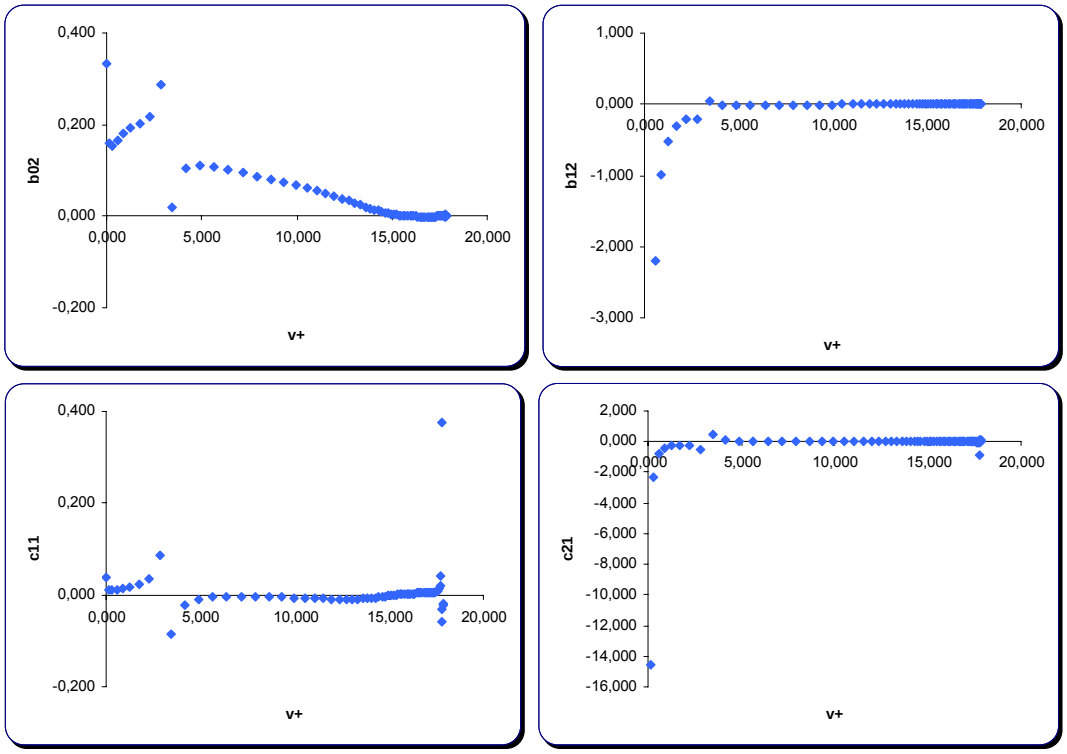




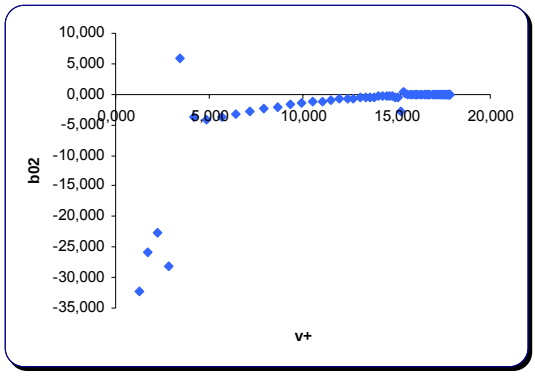
Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.49)

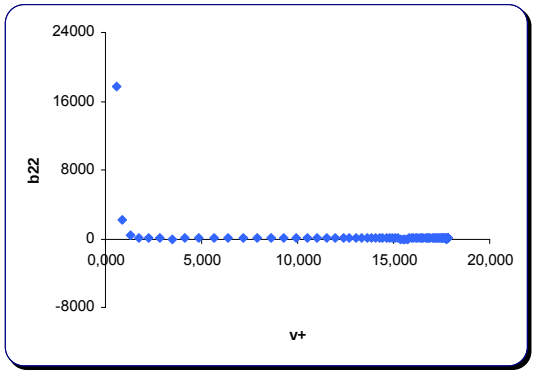


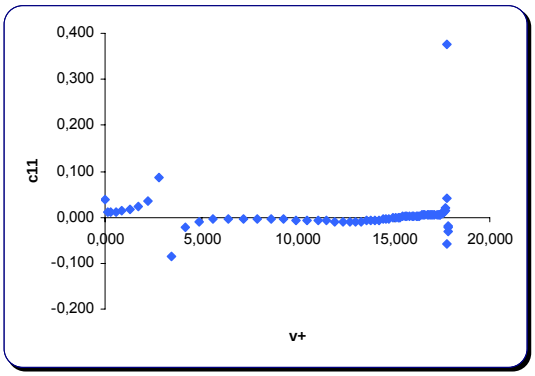
Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.50)

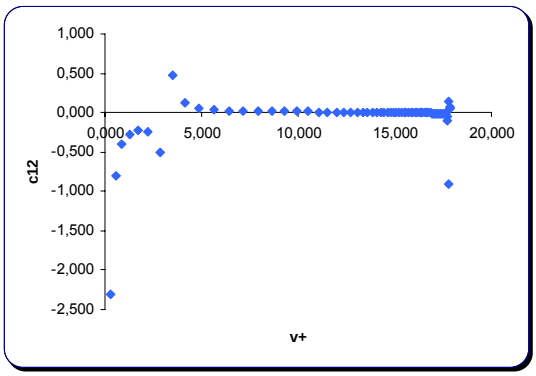


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.51)

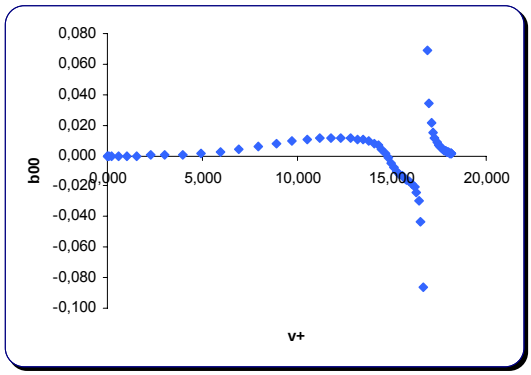


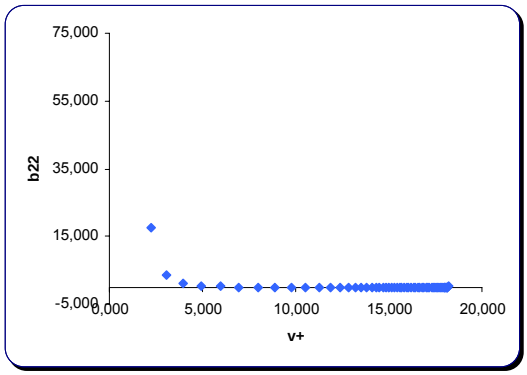


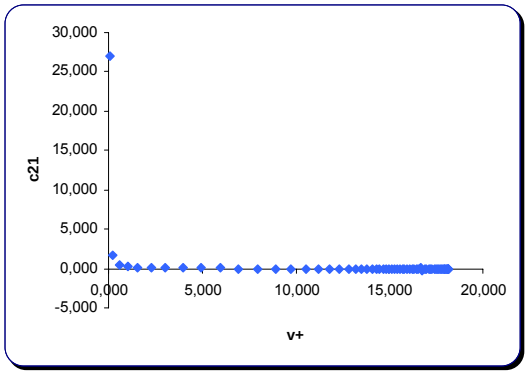


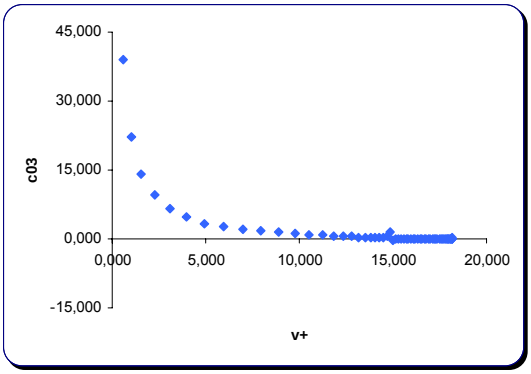


Parâmetros obtidos pelo Sistema (4.5.52)



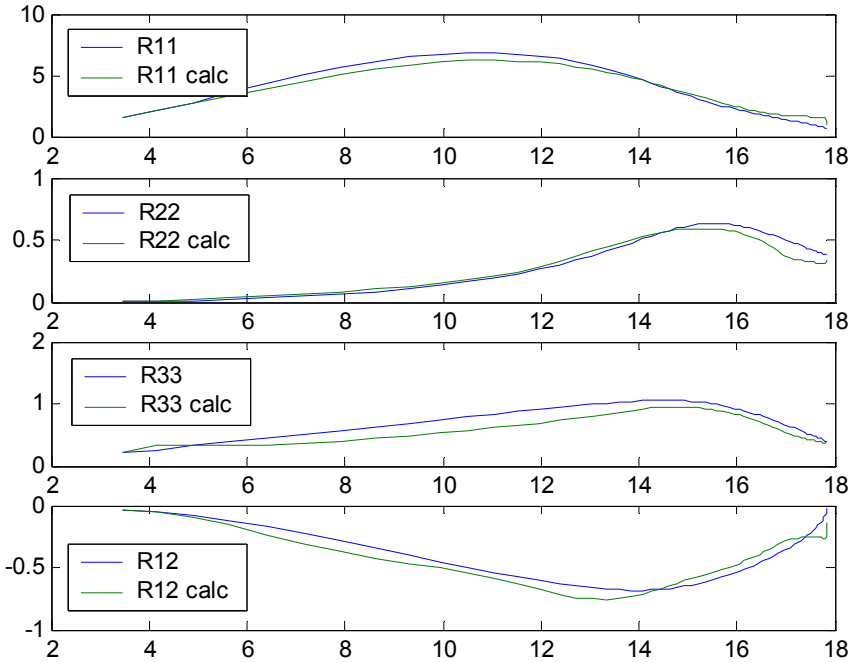




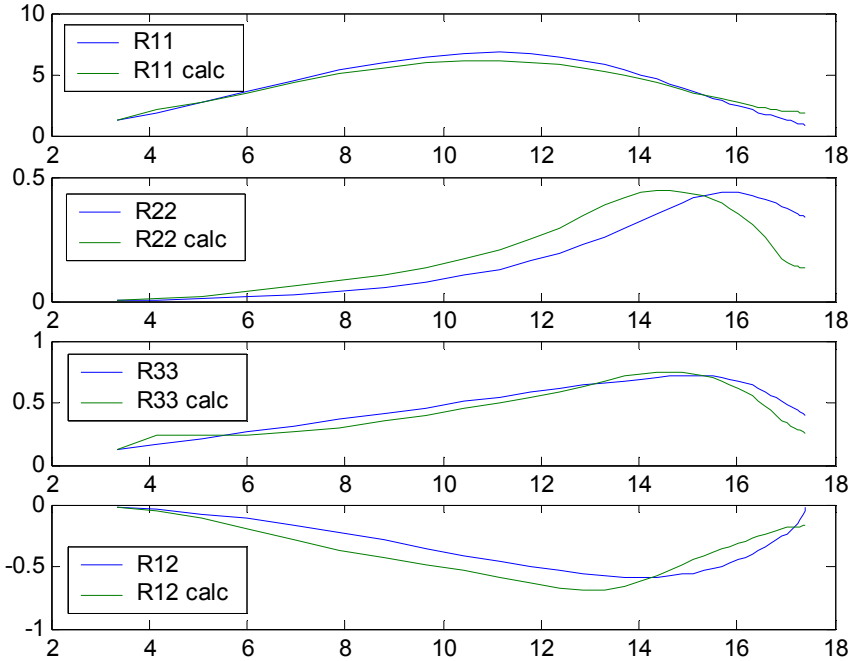


Anexo 3 – Reprodução dos Componentes do tensor de Reynolds com os Parâmetros Modelados para o Novo Modelo de Turbulência

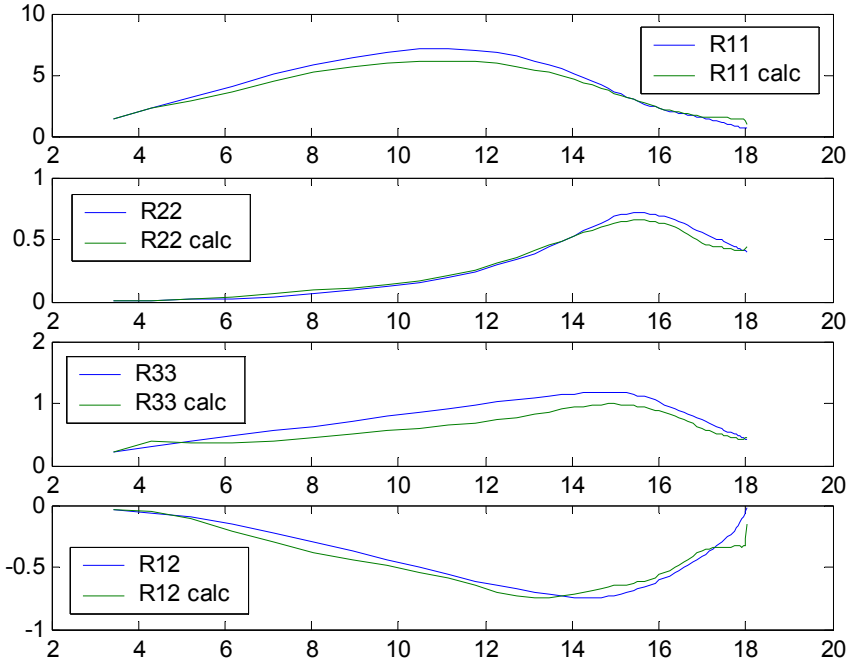
a) Arquivo WL1 – Re_τ = 150 e Re = 4560 – Todas posições integradas



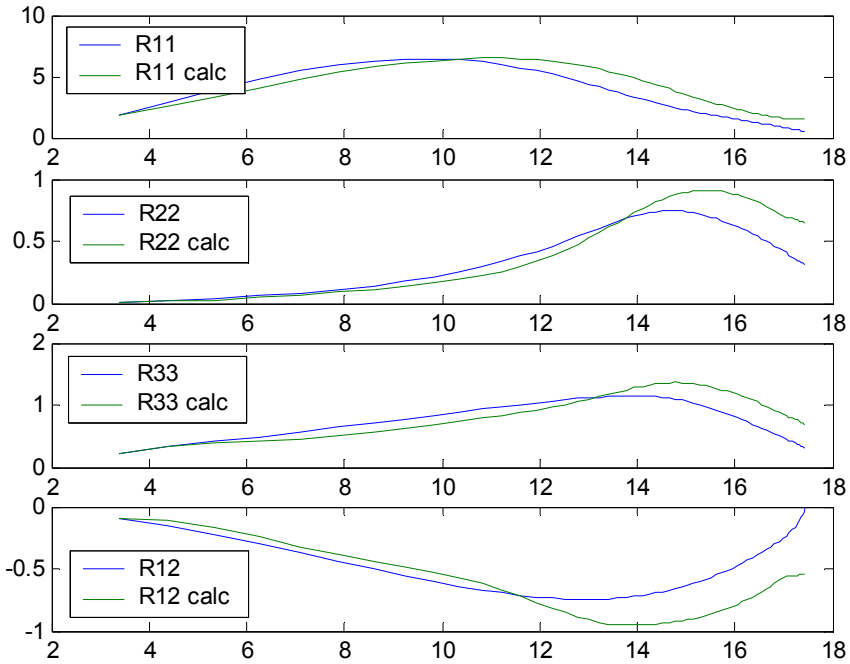
b) Arquivo WL2 – Re_τ = 100 e Re = 2890 – Todas posições integradas



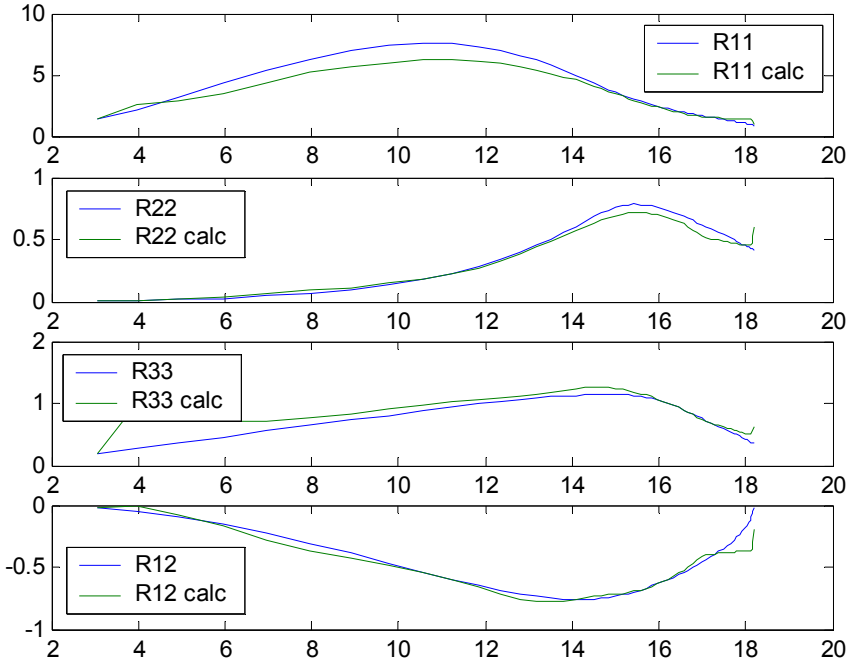
c) Arquivo WL3 – Re_τ = 180 e Re = 3245 – Todas posições integradas



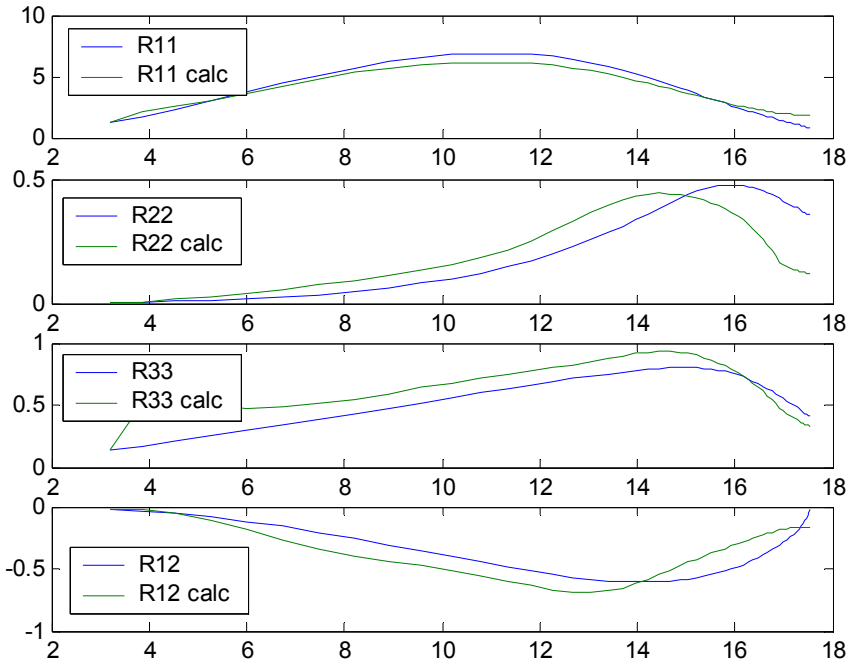
d) Arquivo WL4 – Re_τ = 194 e Re = 5800 – Todas posições integradas



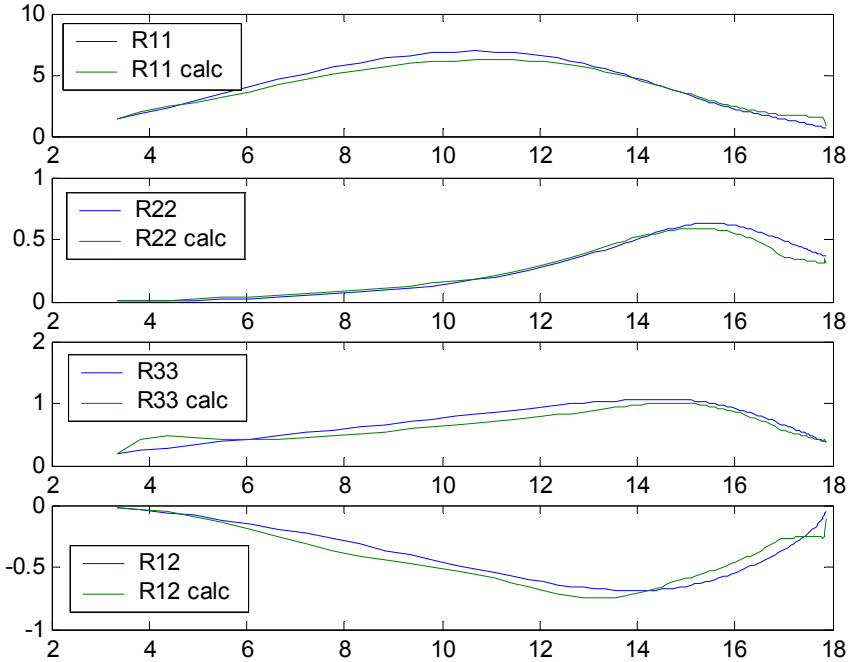
e) Arquivo WL5 – Re_τ = 211 e Re = 6666 – Todas posições integradas



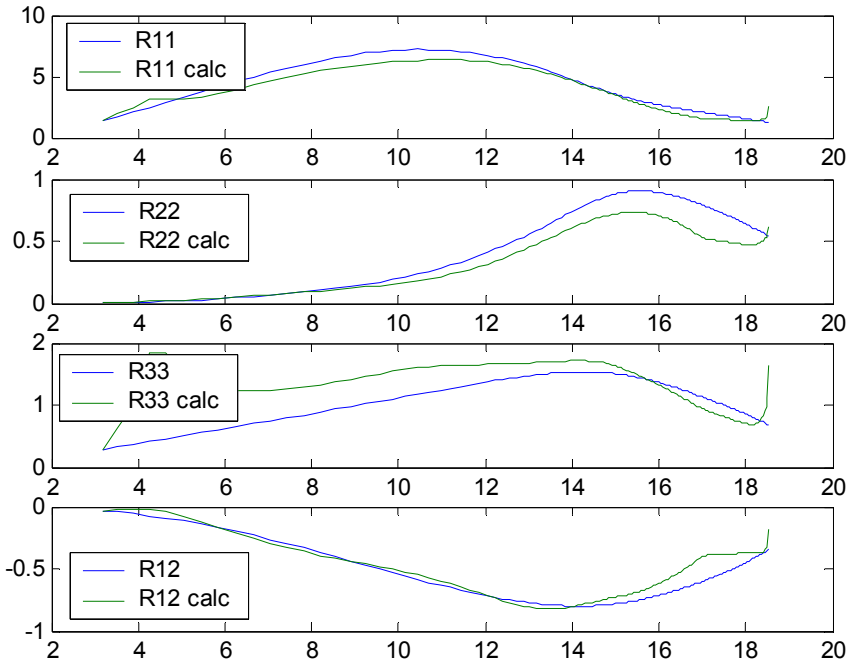
f) Arquivo WL6 – Re_τ = 109 e Re = 3220 – Todas posições integradas



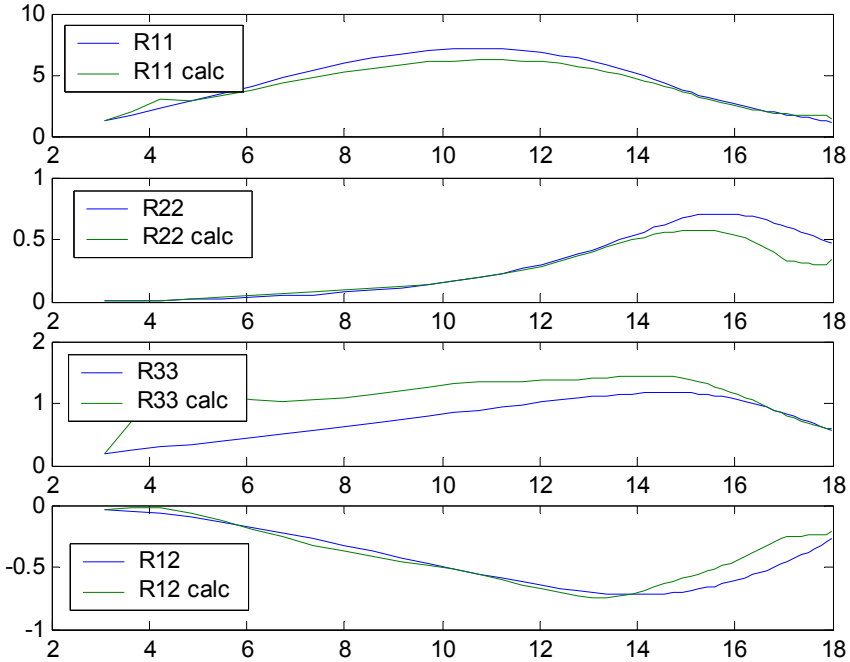
g) Arquivo WL7 – Re_τ = 150 e Re = 4586 – Das 83 posições, 81 foram integradas



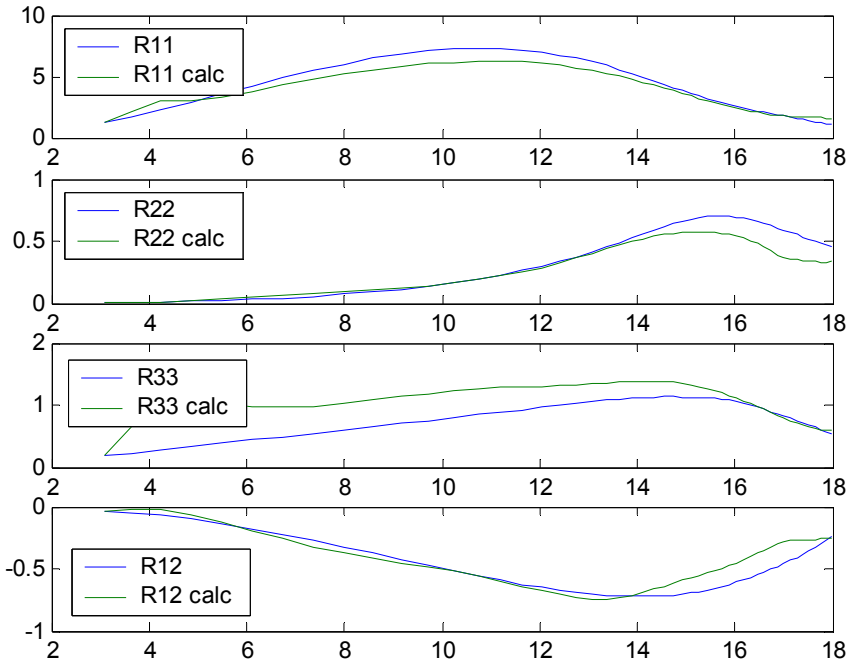
h) Arquivo WL8 – Re_τ = 298 e Re = 10039 – Das 174 posições, 130 foram integradas



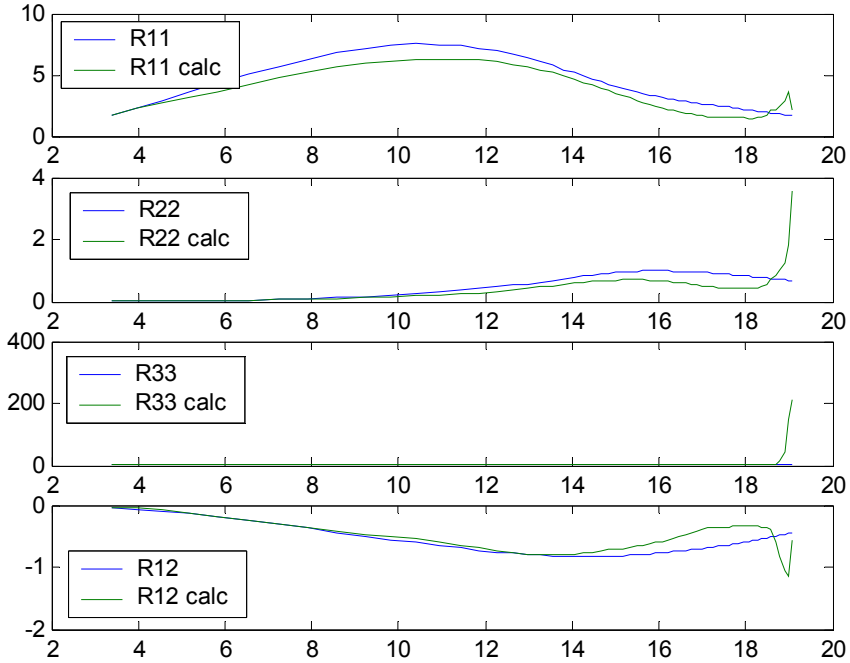
i) Arquivo Ch180_4th – Re_τ = 180 e Re = 5731 – Das 57 posições, 49 foram integradas



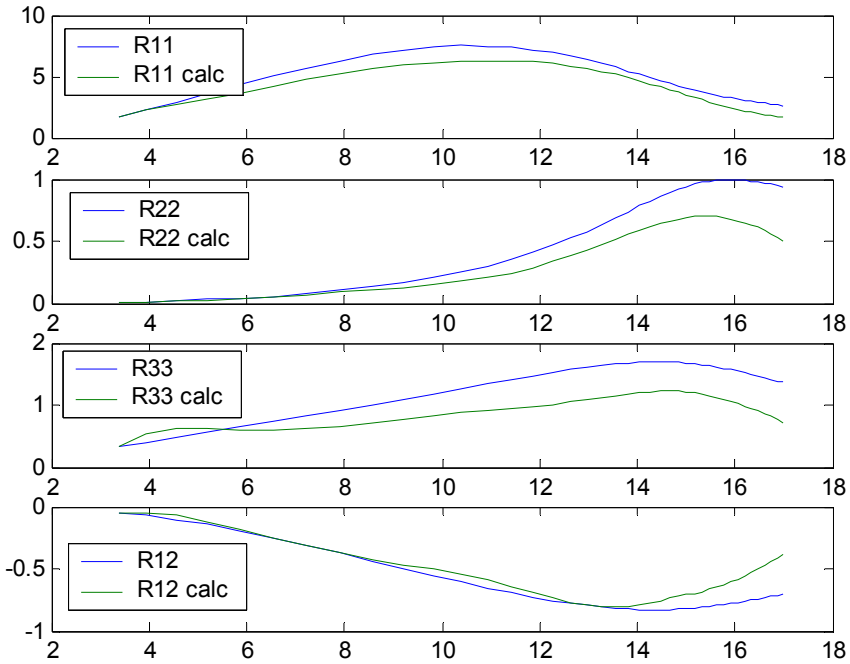
j) Arquivo Ch180 – Re_τ = 180 e Re = 5705 – Das 57 posições, 50 foram integradas



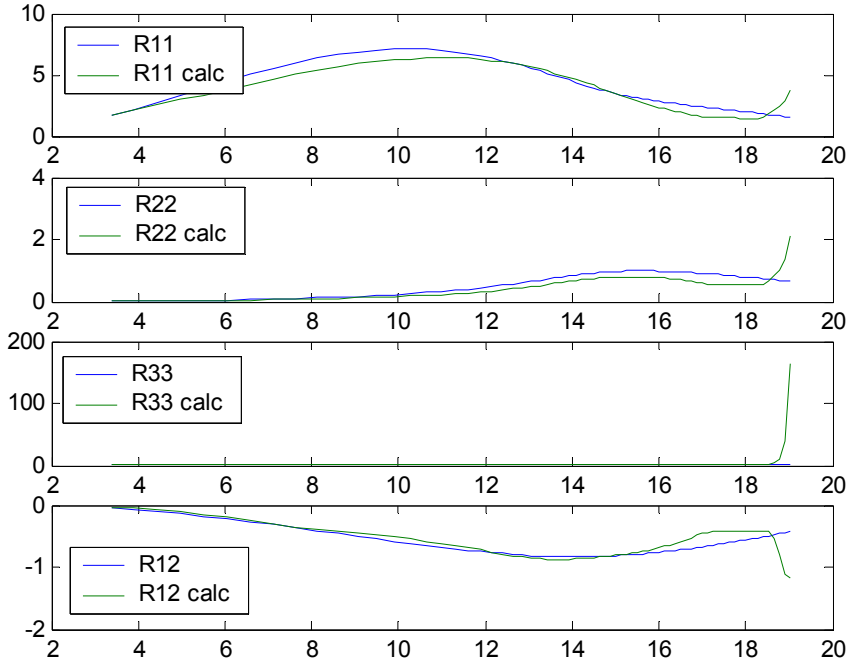
l) Arquivo Ch395_4th – Re_τ=395 e Re=14147 – Das 87 posições, 60 foram integradas



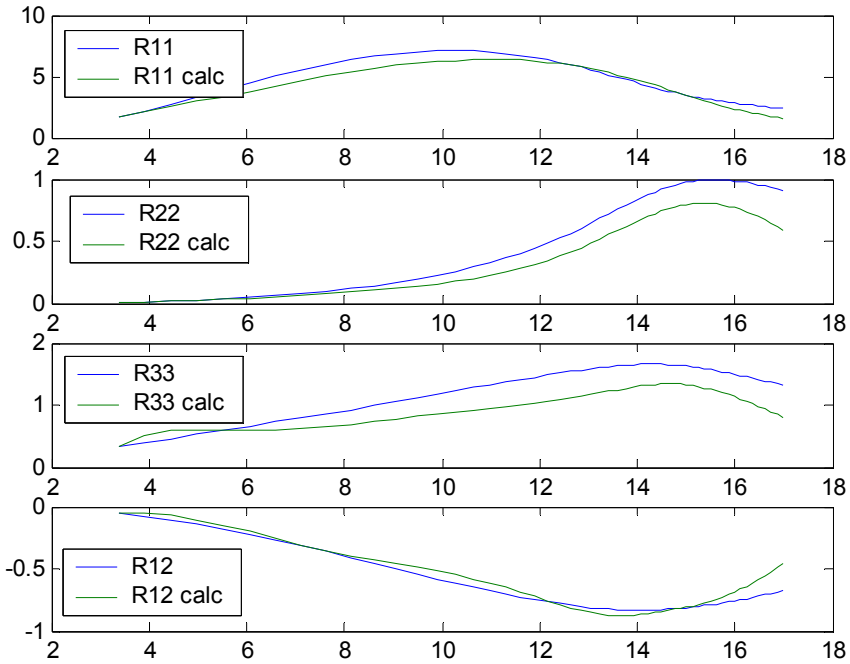
l.1) Arquivo Ch395_4th – Re_τ=395 e Re=14147 – Integração até v ≤ 17



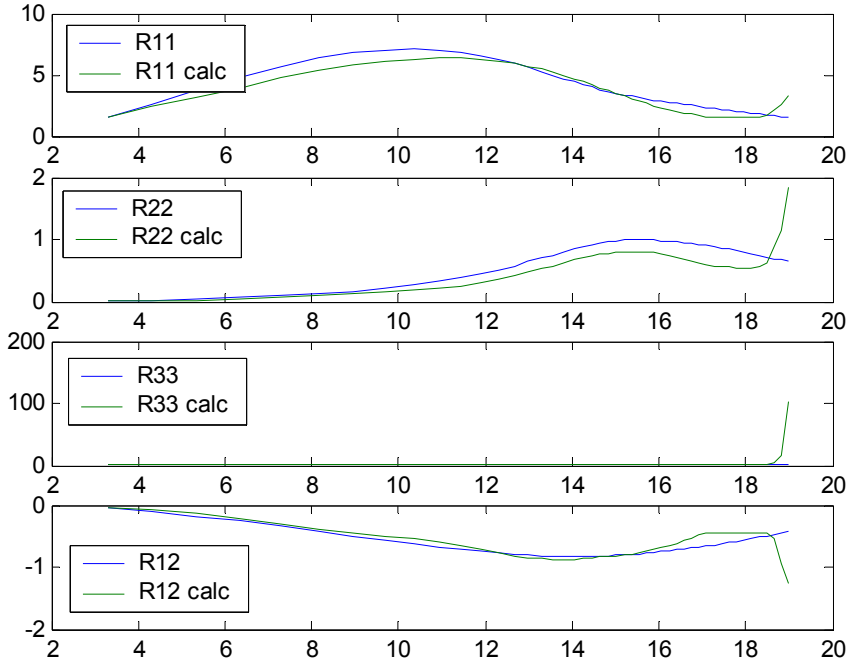
m) Arquivo Ch395 – Re_τ=395 e Re= 13981 – Das 88 posições, 70 foram integradas



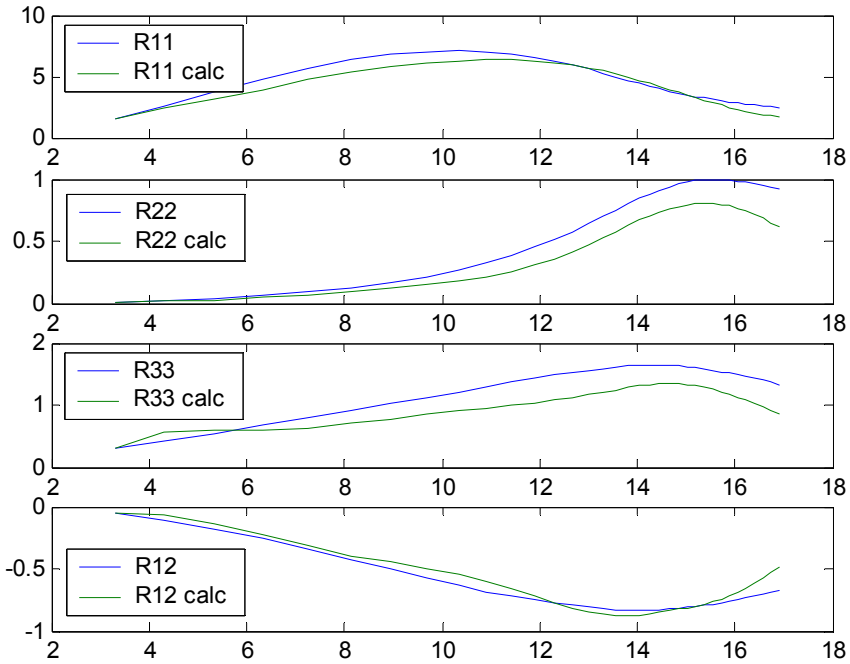
m.1) Arquivo Ch395 – Re_τ=395 e Re= 13981 – Integração até v ≤ 17



n) Arquivo Ch395_b – Re_τ=395 e Re= 13967 – Das 60 posições, 47 foram integradas

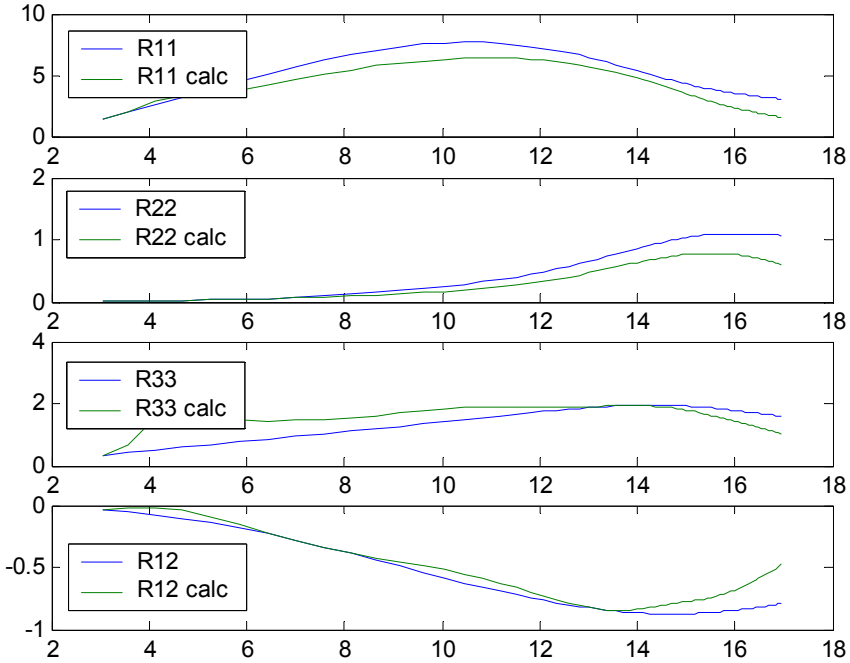


n.1) Arquivo Ch395_b – Re_τ=395 e Re= 13967 – Integração até v ≤ 17

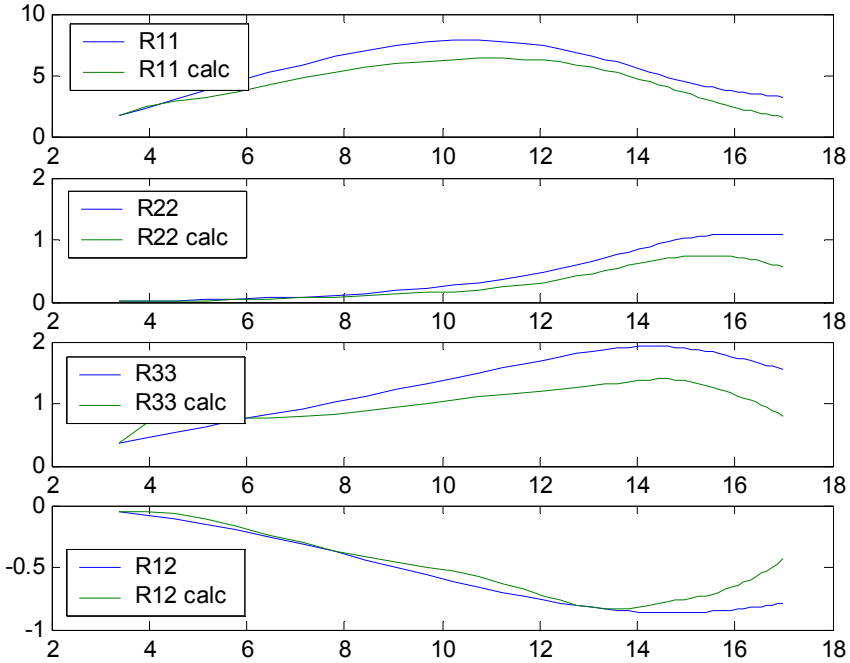
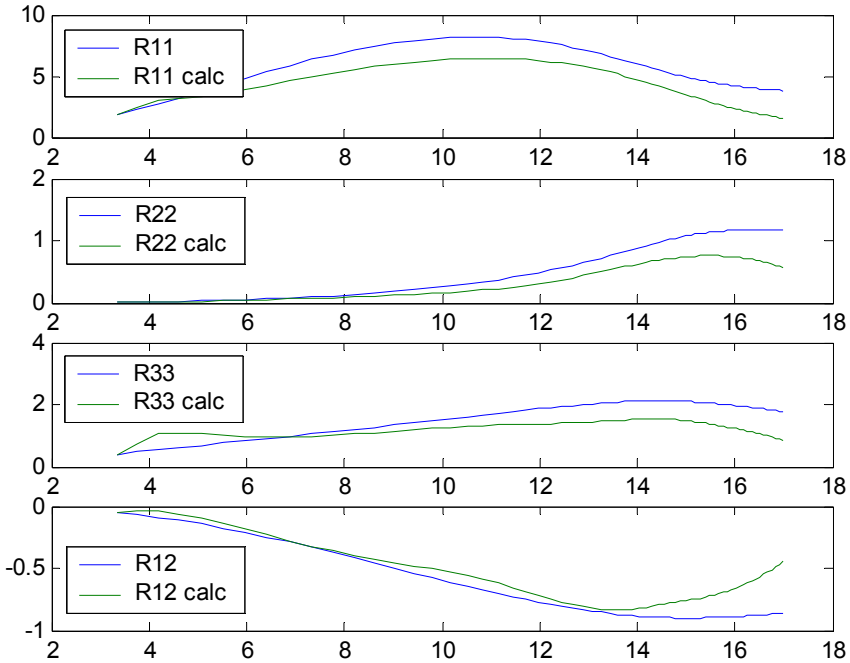


Os arquivos com $Re_\tau > 600$ não rodaram quando se propôs integrar todo o vetor posição. Porém, quando se limitou a integrar o vetor posição até $v^+ \leq 17$, obteve-se sucesso que segue abaixo.

o) Arquivo WL10 – Re_τ=643 e Re= 24272 – Integração até $v \leq 17$



p) Arquivo Ch640_4th – Re_τ = 640 e Re = 24428 – Integração até $v \leq 17$



q) Arquivo Ch1020_4th – Re_τ = 1020 e Re = 41441 – Integração até v ≤ 17