



Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul
FACULDADE DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DE CORRENTES DE GRAVIDADE POLI-DISPERSAS

EZEQUIEL PELISOLI FRANCISCO
GRADUADO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ORIENTADOR: PROF. DR. JORGE HUGO SILVESTRINI

Dissertação de Mestrado realizada no Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais (PGETEMA) da Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia e Tecnologia de Materiais.

Porto Alegre
Abril de 2014



MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DIRETA DE CORRENTES DE GRAVIDADE POLI-DISPERSAS

CANDIDATO: EZEQUIEL PELISOLI FRANCISCO

Esta Dissertação de Mestrado foi julgada para obtenção do título de MESTRE EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais da Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul.



DR. JORGE HUGO SILVESTRINI - ORIENTADOR

BANCA EXAMINADORA



DR. RAFAEL MANICA - INSTITUTO DE PESQUISAS HIDRÁULICAS - UFRGS



DR. RUBEM MÁRIO FIGUEIRÓ VARGAS - DO PGETEMA/FENG - PUCRS

PUCRS

Campus Central
Av. Ipiranga, 6681 - Prédio 30 - Sala 103 - CEP: 90619-900
Telefone: (51) 3353.4059 - Fax: (51) 3320.3625
E-mail: engenharia.pg.materiais@pucrs.br
www.pucrs.br/feng

*“... Quem é este que até aos ventos e às
águas dá ordens, e eles lhe obedecem?”
(Lucas 8:25)*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente minha gratidão é ao Deus Eterno, àquele que Era, que É e que sempre Será, ao que me abriu esta porta e que me sustentou com seu infinito Amor durante todo o desenvolver desta pesquisa.

À minha esposa amada, minha amiga e companheira, desde o primeiro momento me apoiando, me incentivando e intercedendo em suas orações pelo meu sucesso. Muito obrigado, esta conquista é sua.

Ao meu pai, minha mãe, minhas irmãs, sogros, cunhados e todos os demais familiares por compreenderem minha ausência em muitos eventos em que vocês estiveram reunidos. Este apoio foi fundamental. Muito obrigado, esta conquista é de vocês.

Muito obrigado aos muitos amigos, mais chegados do que irmãos, que se alegraram com minha alegria mas que também choraram na minha angústia. Sem suas orações eu não teria chegado até aqui. Divido com vocês esta conquista.

Agradeço ao professor Jorge Silvestrini por todo o aprendizado que recebi e por oferecer a oportunidade de ingressar no Mestrado. Também agradeço pela disposição, mesmo aos finais de semana, em contribuir para o término deste trabalho.

Aos pesquisadores e estagiários do laboratório que, de uma forma ou de outra, me ajudaram a dar continuidade ao trabalho. Ao laboratório de Alto Desempenho da PUCRS e à Petrobrás pelo incentivo.

SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO	1
1.1 Relevância	3
2 – OBJETIVOS	5
2.1 Objetivos Específicos	6
3 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
3.1 O início de uma Corrente de Gravidade	7
3.1.1 Remobilização instantânea de material (surge-like flow)	7
3.1.2 Remobilização não-instantânea de material (quasy-steady flow)	9
3.2 Aspectos dinâmicos e morfológicos de uma corrente de gravidade	10
3.2.1 Morfologia e dinâmica da corrente	10
3.2.2 Estrutura vertical da corrente	13
3.3 Modelo teórico inicial	14
3.3.1 Análise dimensional	14
4 – FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E METODOLOGIA NUMÉRICA	16
4.1 Equações Governantes	16
4.1.1 Lei de Stokes para a partícula	16
4.1.2 Conservação da massa, Navier-Stokes e transporte de quantidades escalares	17
4.2 Domínio de cálculo, condições de contorno e iniciais	20
4.3 Estratégia de cálculo	22
4.4 Simulação numérica direta (DNS)	25
4.5 Balanço total de energias	26
4.6 Metodologia numérica	29
4.6.1 Discretização espacial	29
4.6.1.1 Aproximação para a derivada primeira	30
4.6.1.2 Aproximação para a derivada segunda	31
4.6.2 Avanço no tempo	32
4.7 Estruturas coerentes	34
5 – RESULTADOS	36
5.1 Grandezas globais	36
5.1.1 Influência nos campos de concentração	37
5.1.2 Evolução temporal da posição da frente da corrente	39

5.1.3	Evolução temporal da taxa de sedimentação e massa suspensa	42
5.1.4	Tensões geradas pela corrente	48
5.2	Balço de energias bidimensional	49
5.3	Resultados para a configuração tridimensional	53
5.3.1	Comparação 3D X 2D	57
6	– CONCLUSÃO	64
6.1	Quanto aos campos de concentração	64
6.2	Quanto à evolução da corrente	65
6.3	Quanto ao processo de sedimentação	66
6.4	Quanto ao balanço de energias	66
7	– PROPOSTA PARA TRABALHOS FUTUROS	68
	Referências	69
	Apêndices	72
	APÊNDICE A – Adimensionalização da equação de quantidade de movimento	73
	APÊNDICE B – Comparação entre simulações com e sem estratégia de alongamento	75
	APÊNDICE C – Recursos computacionais	78

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Tempestade de areia em região central da China. Fonte: Google. . .	3
Figura 2 – Formas de início de uma corrente de gravidade. Remobilização instantânea. Fonte: Manica (2009).	8
Figura 3 – Configuração <i>lock-exchange</i> . Após a retirada da placa separadora, o fluido pesado move-se para a direita e o fluido leve para a esquerda, conforme as setas e o perfil tracejado.	8
Figura 4 – Formas de início de uma corrente de gravidade. Remobilização não-instantânea de material. Fonte: Manica (2009).	9
Figura 5 – Classificação de um fluxo contínuo quanto à sua densidade em relação à densidade do fluido ambiente. Fonte: Adaptado de Mulder e Alexander (2001).	10
Figura 6 – Regiões de uma corrente de gravidade. u_f é a velocidade da frente da corrente ou cabeça e u_c é a velocidade do corpo da corrente. h refere-se a altura da cabeça em relação ao fundo do domínio. Fonte: Adaptado de Del Rey (2006).	11
Figura 7 – Estruturas internas da região frontal de uma corrente de gravidade. Fonte: Simpson (1999).	12
Figura 8 – Estruturas presentes na região frontal de uma corrente de gravidade. (a) Vórtices de K-H; (b) estruturas de lobos e fendas (<i>lobe-and-cleft</i>). Fonte: Simpson (1999).	13
Figura 9 – Perfil esquemático da cabeça e do corpo mostrando as características referentes ao perfil de velocidade e de densidade. Fonte: Adaptado de Kneller e Buckee (2000).	13
Figura 10 – Esquema das forças atuantes sobre uma partícula esférica descrita pela lei de Stokes.	17
Figura 11 – Configuração inicial para o caso <i>lock-exchange</i> tridimensional. Para cálculos 2D a componente do eixo x_3 não é considerada.	21
Figura 12 – Formato da função tangente hiperbólica que gera os campos iniciais de concentração.	22
Figura 13 – Esquema demonstrativo da estratégia de alongamento da malha no sentido do eixo x_1	24
Figura 14 – Exemplo de uma malha cartesiana bidimensional. Os círculos pretos representam os nós das fronteiras.	30
Figura 15 – Exemplo de campos instantâneos de um escoamento ao redor de um cilindro: (a) vorticidade; (b) critério- Q . Fonte: Pinto (2012).	35

Figura 16 – Campos de concentração instantâneos para $t = 15$. Ao lado esquerdo estão as partículas com velocidade de queda $u_1^s = 0,03$ e à direita $u_2^s = 0,004$. Fig. 16(a) condição de contorno I; Fig. 16(b) condição de contorno II. Todas as imagens foram tomadas para $0 < c_l < 1$	38
Figura 17 – Perfil vertical de concentração do caso #3 para cada velocidade de queda em $t = 8$. Linhas tracejadas representam a condição de contorno I e linhas cheias mostram o caso da condição de contorno II.	39
Figura 18 – Perfil vertical de concentração do caso #3 para cada velocidade de queda em $t = 12$. Linhas tracejadas representam a condição de contorno I e linhas cheias mostram o caso da condição de contorno II.	39
Figura 19 – Posição da frente da corrente em função da fração inicial da partícula mais grossa para cinco diferentes tempos. (a) condição de contorno I; (b) condição de contorno II.	40
Figura 20 – Evolução temporal da frente da corrente. Preto representa a C.C. I, vermelho C.C. II e azul os resultados experimentais de Gladstone et al. (1998).	43
Figura 21 – Detalhe da posição da frente onde acontece a divergência entre as curvas para as duas condições de contorno impostas no fundo.	44
Figura 22 – Comparação do efeito das condições de contorno na massa suspensa. Valores normalizados com suas respectivas massas suspensas iniciais m_{p0} . Azul são as partículas com $u_1^s = 0,03$; vermelho $u_2^s = 0,004$ e em preto a massa suspensa total.	45
Figura 23 – Taxa de sedimentação em escala logarítmica para a partícula mais grossa e para a mais fina, avaliadas nas duas condições de contorno. Linhas tracejadas referem-se à C.C. I e linhas cheias à C.C. II.	46
Figura 24 – Perfil de depósito em $t = 135$. Comparação entre as condições de contorno e dados experimentais.	47
Figura 25 – Evolução espaço-temporal da velocidade de atrito gerada pela corrente junto ao fundo do domínio. Todas as figuras foram re-escaladas para um valor médio entre elas.	50
Figura 26 – Balanço de energias para os casos #1, #2 e #3 comparando as duas condições de contorno. Em (b) as linhas em verde correspondem ao teste com $n_2 = 385$	54
Figura 27 – Continuação da Figura 26. Balanço de energias para os casos #4, #5 e #6 comparando as duas condições de contorno.	55
Figura 28 – Iso-superfícies de concentração para $c_l = 0,25$. Ao lado esquerdo temos $u_1^s = 0,047$ e ao lado direito $u_2^s = 0,006$. De cima para baixo: $t = 0; 2; 8; 12$	57

Figura 29 – Critério- Q em iso-superfícies tomadas para $Q = 1$. Detalhes mostram os vórtices longitudinais que se formam no fundo e a aglomeração de vórtices. De cima para baixo: $t = 0, 2; 4; 8; 16$	58
Figura 30 – Velocidade de atrito junto ao fundo do domínio ($x_2 = 0$).	59
Figura 31 – Campos instantâneos de concentração para os casos 2D e 3D em $t = 14$ tomadas em um plano médio ($x_3 = 0$) e $0 < c_l < 1$	59
Figura 32 – Evolução temporal das partículas em suspensão. Linhas cheias referem-se à simulação 3D e linhas tracejadas à simulação 2D.	60
Figura 33 – Variação da posição da frente da corrente com o tempo.	61
Figura 34 – Perfil da camada de sedimentos ao final das simulações 2D e 3D.	62
Figura 35 – Balanço de energias. (a) caso 2D; (b) caso 3D. As linhas azuis se referem às partículas com $u_1^s = 0,047$ e as vermelhas às partículas com $u_2^s = 0,006$	63
Figura 36 – Balanço de energias comparando uma simulação com alongamento (<i>stretching</i>) e sem alongamento (<i>no stretching</i>). (a) energia potencial; (b) energia cinética; (c) macro dissipação; (d) micro dissipação.	76
Figura 37 – (a) evolução da frente da corrente; (b) massa suspensa; perfil do depósito; (d) taxa de sedimentação.	77

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Condições de contorno para o campo de velocidades e concentrações.	22
Tabela 2 – Parâmetros de simulação. C.C. refere-se à Condição de Contorno. .	36
Tabela 3 – Dissipações totais em $t = 135$. Somas da macro (E_d) e das micro (E_{sl}) dissipações finais para cada caso.	53
Tabela 4 – Parametros de simulação para a comparação $2D/3D$	53
Tabela 5 – Parâmetros para simulação com alongamento (<i>stretching</i>) e sem alongamento (<i>no stretching</i>).	75

LISTA DE SÍMBOLOS

\tilde{U}_f	Velocidade de deslocamento da frente de uma corrente de gravidade [cm/s]
\tilde{g}'	Aceleração da gravidade reduzida [cm/s^2]
\tilde{g}	Aceleração da gravidade [cm/s^2]
\tilde{h}	Altura da cabeça da corrente [cm]
$\tilde{\rho}_a$	Massa específica do fluido ambiente [g/cm^3]
$\tilde{\rho}_c$	Massa específica da mistura partícula/fluido ambiente [g/cm^3]
$\tilde{\rho}_p$	Massa específica da partícula [g/cm^3]
\tilde{F}_p	Força peso [N]
\tilde{F}_b	Força de empuxo [N]
\tilde{F}_d	Força de arrasto [N]
\tilde{d}_p	Diâmetro da partícula [μm]
\tilde{u}_b	Velocidade de flutuação [cm/s]
$\tilde{\nu}$	Viscosidade cinemática [cm^2/s]
x_i	Eixo de coordenadas
L_1	Dimensão do domínio de cálculo na direção do eixo x_1
L_2	Dimensão do domínio de cálculo na direção do eixo x_2
L_3	Dimensão do domínio de cálculo na direção do eixo x_3
u_i^s	Velocidade de queda da partícula
u_i	Vetor campo de velocidade
t	Tempo adimensional
Re	Número de Reynolds
Fr	Número de Froude
Sc_t	Número de Schmidt da partícula

c_l	Concentração da partícula
c_t	Concentração total de partículas
C_r	Fração volumétrica inicial total de partículas em suspensão
e^g	Vetor unitário apontando no sentido da gravidade
L_{is}	Dimensão do subvolume inicial na direção do eixo x_i
n_i	Número de pontos da malha na direção x_i
S_{ij}	Tensor taxa de deformação
Ω_{ij}	Tensor taxa de rotação
Ep_l	Energia potencial da partícula
Ep_t	Energia potencial total
k	Energia cinética
Ep_d	Dissipação macroscópica
Es_l	Dissipação microscópica da partícula
Es_t	Dissipação microscópica total
E_{t0}	Energia total inicial
x_f	Posição da parte frontal da corrente de gravidade
m_{pl}	Massa de partículas em suspensão
\dot{m}_s	Taxa de sedimentação
D_t	Espessura da camada de sedimentos no fundo do domínio de cálculo
Q	Critério Q
u_τ	Velocidade de atrito
τ_w	Tensão de cisalhamento junto à parede do domínio

RESUMO

FRANCISCO, Ezequiel Pelisoli. **Modelagem Matemática e Simulação Numérica Direta de Correntes de Gravidade Poli-dispersas**. Porto Alegre. 2014. Dissertação. Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais, PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO RIO GRANDE DO SUL.

Correntes de gravidade tem início quando corpos fluidos de diferentes densidade se encontram, dando início à um movimento relativo entre ambos. Estas correntes são ditas poli-dispersas quando o excesso na densidade acontece pela presença de mais de uma fração granulométrica, caracterizadas pelo diâmetro da partícula, diluídas na fase dispersante. A intenção desta pesquisa é investigar, através da Simulação Numérica Direta (DNS), como a combinação de diferentes proporções iniciais de duas frações granulométricas, uma dita mais fina e a outra dita mais grossa, afeta a dinâmica da corrente. Outro ponto investigado é o comportamento da corrente quando impõe-se, na parede inferior do domínio de cálculo, duas condições de contorno diferentes: a) fluxo de partículas através do fundo; b) fluxo nulo de partículas através do fundo. Busca-se também, através de simulação 3D, determinar como as principais estruturas tridimensionais influenciam nesta dinâmica. Utilizam-se os resultados de um trabalho experimental para validar e comparar os resultados obtidos para o perfil de depósito e evolução da frente da corrente. A quantidade de massa suspensa e o balanço completo de energias são apresentados. Através de simulações 2D foi possível mostrar que a adição de pequenas quantidades de partículas finas, em uma corrente predominantemente composta por partículas grossas, afeta mais as características do escoamento do que o contrário. Comparações mostram a incapacidade da simulação bidimensional reproduzir, de forma precisa, a intensa turbulência gerada em uma simulação tridimensional, o que resulta em erros na estimativa da perda dissipativa devida ao movimento convectivo.

Palavras-chave: Simulação numérica direta, corrente de gravidade, poli-dispersa, balanço de energia.

ABSTRACT

FRANCISCO, Ezequiel Pelisoli. **Mathematical Modeling and Direct Numerical Simulation of Poly-disperse Gravity Currents**. Porto Alegre. 2014. Master Thesis. Graduation Program in Materials Engineering and Technology, PONTIFICAL CATHOLIC UNIVERSITY OF RIO GRANDE DO SUL.

Gravity currents begin when two fluid bodies, with different densities, collide one against the other, starting a relative movement in both. These currents are called polydisperse when the excess in density is due to the presence of more than one type of particles, which are characterized by their diameter, diluted in the dispersant phase. The purpose of this research is to investigate, using Direct Numerical Simulation (DNS), how different combinations of fine and coarse particles affect the dynamics of the current when two different boundary conditions are imposed on the bottom wall of the domain. There is also interest, using 3D simulation, in investigating how the main tri-dimensional structures influence its dynamics. Data from an experimental work are used to validate and compare the results for the final deposit profile and front evolution of the current. The suspended mass and complete energy budget are also presented. Two-dimensional simulations showed that the addition of a small amount of fine particles, into a current predominantly composed by coarse particles, affects more significantly the features of the flow than the opposite. Comparisons show us the inability of the two-dimensional simulation to reproduce accurately the intense turbulence generated in 3D, resulting in an error in the dissipation term due to convective motion.

Keywords: Direct numerical simulation, gravity current, polydisperse, energy budget.

1 INTRODUÇÃO

A modelagem matemática insere-se dentro do contexto da pesquisa científica como uma ferramenta que busca prever, da forma mais fidedigna possível, o comportamento real de acontecimentos dentro das mais diversas áreas, tais como a física, engenharia, biologia ou química. Se retrocedermos no tempo até a antiguidade, Arquimedes, nascido no ano de 287 a.C., usa a linguagem matemática para descrever o empuxo, conhecido hoje como o Princípio de Arquimedes. Também Newton, em 1687, descreve a Lei da Gravitação Universal e suas três Leis, bases fundamentais para a mecânica clássica.

Tais leis e princípios físicos, por serem fenômenos relativamente simples e dependerem de poucas variáveis, possuem soluções facilmente encontradas utilizando apenas uma calculadora comum, basta recordarmos das aulas de Física do Ensino Médio. Conforme a ciência avança, novos passos exigem o entendimento de fenômenos cada vez mais complexos que demandam modelos diferenciais com soluções não tão triviais, impossibilitando sua resolução de maneira analítica, somente através de métodos numéricos.

A implementação da análise numérica torna possível a aproximação de soluções utilizando operações matemáticas básicas, simplificando os cálculos. O fator complicador está associado ao grande volume de operações necessárias para se alcançar uma solução com um grau de acurácia que consiga representar o fenômeno de maneira satisfatória. Quanto mais detalhado e mais perto do resultado real se deseja chegar, mais cálculos precisam ser resolvidos, tornando indispensável a tradução dos modelos matemáticos para a linguagem dos computadores.

Existem fenômenos físicos naturais que, devido à sua imprevisibilidade e localização, impossibilitam a coleta de dados para pesquisas. Alguns destes processos físicos podem ser reproduzidos em escala laboratorial, outros nem tanto, como o caso

da previsão do tempo. Somente a simulação numérica, baseada em modelos matemáticos e amparada pela capacidade de processamento dos computadores, conseguiria realizar centenas de bilhões de cálculos na intenção de antever como estará o clima futuro.

O estudo de fluidos é amplamente favorecido pela simulação numérica, visto que todo o aparato experimental necessário para a sua investigação pode ser reproduzido por um código computacional e um *hardware* capaz de executá-lo. A capacidade de processamento e armazenamento de dados do *hardware* são os principais limitadores da simulação numérica quando a investigação tem interesse em reproduzir as menores escalas do processo físico, possibilitando uma observação pontual. Mas graças à rápida evolução dos processadores, o tempo para a realização de cada cálculo diminui. A tecnologia multi-núcleos também está favorecendo o processamento em paralelo, onde as instruções de um programa podem ser realizadas conjuntamente ou seja, vários cálculos podem estar sendo realizados ao mesmo tempo.

É dentro deste contexto que se insere este trabalho: a partir de um modelo matemático utilizar Simulação Numérica Direta (*DNS - Direct Numerical Simulation*) para compreender a dinâmica de um sistema estratificado onde o escoamento ocorre pela diferença de densidades entre dois fluidos. O método DNS permite-nos calcular todas as escalas de turbulência de um escoamento pela completa resolução das equações de Navier-Stokes. Outros métodos, como por exemplo o LES (*Large-Eddy Simulation*), há um filtro a partir do qual todas as escalas de turbulência são representadas por um modelo.

Considerando a hipótese de que esta diferença de densidade seja causada por partículas diluídas no fluido, o movimento ocorre pela força gravitacional agindo sobre os sedimentos em suspensão (MIDDLETON, 1993). Tal processo físico é mais comumente conhecido como Corrente de Gravidade.

1.1 Relevância

As correntes de gravidade, também algumas vezes chamadas de correntes de densidade, ocorrem tanto em ambientes naturais como em industriais. Seu início acontece quando dois corpos fluidos de diferentes densidades se encontram, fazendo com que o fluido de maior densidade desenvolva seu movimento sob o fluido de menor densidade (UNGARISH, 2006; UNGARISH, 2009). Podemos citar a diferença de temperatura, a concentração salina ou a presença de partículas sólidas em suspensão como sendo as causas mais comuns para que haja excesso de densidade de um fluido em relação ao outro.

Na natureza as correntes de gravidade podem ser observadas na formação de tempestades, onde acontece o deslocamento de grandes massas de ar quente em relação às massa de ar frio. Outros exemplos são as tempestades de areia, características de regiões arenosas e com baixa umidade, que transportam grandes quantidades de partículas de areia (Figura 1), e as correntes oceânicas que se movem pela presença de gradientes na concentração salina e na temperatura da água.

Se restringirmos o olhar para a ocorrência de correntes de gravidade em escalas menores, podemos observá-la na indústria de fabricação de vidros finos quando o vidro fundido escoar sobre o molde (HUPPERT, 2006).



Figura 1 – Tempestade de areia em região central da China. Fonte: Google.

A melhor compreensão deste tipo de escoamento possui grande relevância dentro do contexto da engenharia e da geologia pela sua natureza deposicional, erosiva e destrutiva. Projetos de equipamentos e estruturas que atuarão submersos em rios, lagos ou mares levam em conta a interação com as correntes de gravidade. Dengler et al. (1984) relata o poder destrutivo de uma corrente de gravidade iniciada na costa do Havaí onde muitos cabos telefônicos foram rompidos e sensores quebrados. É interessante ressaltar também que as correntes transportam matéria orgânica através dos rios até os oceanos, ajudando na fertilização do solo marinho (HU et al., 2004).

Pelo fato de as correntes de gravidade possuírem a capacidade de transportar sedimentos, elas acabam sendo agentes transformadores da crosta terrestre. Esta é uma característica que faz a geologia buscar entender a dinâmica deste processo. Segundo Kneller e Buckee (2000), as correntes de gravidade são um mecanismo muito eficiente para transportar todo o tipo de sedimento até às regiões mais profundas de lagos e oceanos.

Erosão e deposição de sedimentos, causados por estas correntes, são responsáveis por muitas das formações geológicas encontradas no fundo do mar, sendo que algumas delas podem se tornar reservatórios de hidrocarbonetos (MEIBURG; KNELLER, 2010). A formação das estruturas que originam os reservatórios de hidrocarbonetos acontece por sucessivos episódios de deposição de fragmentos de rochas, lama e matéria orgânica. Economicamente, estas formações geológicas despertam grande interesse das empresas petrolíferas, pois é em seu interior que óleo e gás ficam armazenados. Estima-se que tais estruturas geológicas são responsáveis pelo armazenamento de 35% a 40% das reservas mundiais de hidrocarbonetos.

Visto a importância do fenômeno físico das correntes de gravidade dentro das mais variadas áreas, muito se tem feito através de experimentos em escala laboratorial (GLADSTONE et al., 1998; ROOIJ; DALZIEL, 2001) e simulação numérica (NECKER et al., 2002; ESPATH et al., 2013) com o intuito de compreender mais apuradamente toda sua dinâmica.

2 OBJETIVOS

Como foi mencionado anteriormente, avanços importantes foram conseguidos na compreensão das correntes de gravidade, tanto em estudos experimentais como em simulação numérica.

A maior parte dos estudos numéricos com transporte de partículas tem modelado as correntes de gravidade considerando que os sedimentos em suspensão possuam as mesmas características, tais como massa específica e diâmetro. Diferenciando-se um pouco desta abordagem, o objetivo geral desta pesquisa é utilizar a Simulação Numérica Direta (DNS) para correntes que possuam uma composição poli-dispersa e, deste modo, buscar responder aos questionamentos inspiradores deste trabalho:

“Como a dinâmica de uma corrente de gravidade é afetada quando varia-se a composição inicial das diferentes frações granulométricas das partículas em suspensão?”

e

“A imposição de diferentes condições de contorno na parede inferior do domínio de cálculo alteram significativamente a solução final?”

O termo poli-disperso (tradução direta da língua inglesa para *“poly-disperse”*) refere-se a uma mistura em que a fase dispersa, composta por duas ou mais frações de partículas diferentes, encontra-se diluída na fase dispersante. Isto quer dizer que, no que diz respeito à composição da mistura, as simulações considerarão partículas com a mesma massa específica, porém diferenciadas entre si pelo seu diâmetro.

A escolha pela utilização de DNS deve-se ao fato de ele ser um método no qual as equações de Navier-Stokes são numericamente resolvidas de forma explícita, sem a imposição de nenhum modelo de turbulência (COLEMAN; SANDBERG, 2010), trazendo uma melhor representação das estruturas turbulentas de um caso real.

2.1 Objetivos Específicos

Os pontos a seguir servirão de lastro para se alcançar o objetivo principal deste trabalho:

- Utilizando a configuração *lock-exchange* (detalhada no próximo capítulo, seção 3.1), fazer uma série de simulações bidimensionais para uma corrente composta por dois tipos diferentes de partículas (também chamadas de bi-dispersas) – uma mais fina e outra mais grossa com diferentes proporções iniciais;
- Para cada composição inicial de partículas, será realizada uma simulação impondo-se uma condição de contorno na parede inferior do domínio de cálculo onde há fluxo de partículas, e outra simulação onde não há fluxo de partículas.
- Analisar a evolução temporal da frente de deslocamento da corrente para os diferentes casos;
- Entender o processo de sedimentação das partículas observando as mudanças na quantidade de massa suspensa em cada unidade de tempo, bem como os perfis de depósito junto à parte inferior do domínio de cálculo;
- Estabelecer o balanço completo das energias envolvidas e avaliar sua conservação;
- Comparar os resultados bidimensionais com resultados tridimensionais para averiguar a influência das estruturas turbulentas sobre o resultado final.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, primeiramente, abordaremos os fatores e mecanismos de iniciação de uma corrente de gravidade. Após, apresentaremos alguns aspectos característicos das estruturas e da dinâmica geradas pelo avanço do fluido mais denso dentro do fluido menos denso que o envolve. Alguns comentários serão tecidos sobre os modelos teóricos mais utilizados.

3.1 O início de uma Corrente de Gravidade

O início de uma corrente de gravidade é mais facilmente compreendido ao ser relacionado com algum acontecimento natural de maneira que, para sua melhor visualização, usaremos o ambiente marinho como exemplo. Neste contexto, os eventos mais apontados como os desencadeadores das correntes de gravidade são: deslizamentos de terra, descarga de rios após as cheias, tempestades e erupções vulcânicas (MELBURG; KNELLER, 2010; MUTTI et al., 1999). Podemos perceber que todos estes acontecimentos causam excesso de densidade, de um fluido em relação ao outro, pela presença de partículas sólidas em suspensão.

Em sua Tese de Doutorado, Manica (2009), considerando os eventos mencionados anteriormente, separa os mecanismo de início de uma corrente em dois grandes grupos: Remobilização instantânea de material e Remobilização não-instantânea de material.

3.1.1 Remobilização instantânea de material (surge-like flow)

Esta forma de início é associada a um pulso, onde percebe-se o deslocamento de uma quantidade limitada de material (Figura 2). Causada por evento isolado como deslizamento, escorregamento ou rompimento na talude continental ¹. Inicialmente

¹Região marinha de inclinação mais acentuada. Situada entre a plataforma continental e a planície abissal.

esta corrente transporta grande quantidade de material, o que a faz atingir grande velocidade rapidamente, porém, assim que o processo de sedimentação começa, se percebe uma gradativa desaceleração do escoamento pela perda do material em suspensão, tornando-o um evento de curta duração.

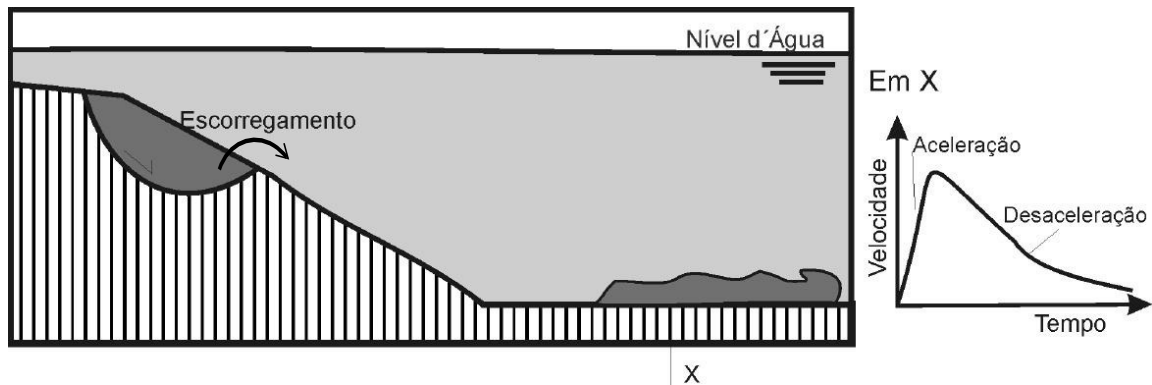


Figura 2 – Formas de início de uma corrente de gravidade. Remobilização instantânea. Fonte: Manica (2009).

Este grupo, dentro da simulação numérica e dos experimentos físicos, é representado através da conhecida configuração *lock-exchange* (Figura 3). Nela, o fluido mais pesado, de massa específica (ρ_c), está inicialmente separado do fluido mais leve (ρ_a) por uma interface que representa a presença de uma placa. Imediatamente após o instante zero, esta placa é retirada e o escoamento tem início.

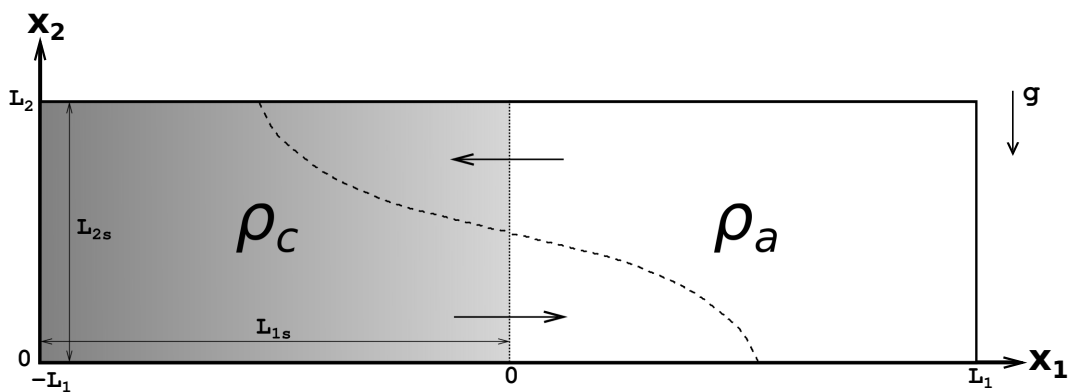


Figura 3 – Configuração *lock-exchange*. Após a retirada da placa separadora, o fluido pesado move-se para a direita e o fluido leve para a esquerda, conforme as setas e o perfil tracejado.

3.1.2 Remobilização não-instantânea de material (quasy-steady flow)

Este outro grupo contempla os escoamentos que são alimentados de forma contínua durante um determinado período de tempo (Figura 4). Estão associados às cheias dos rios, que transportam para o ambiente marinho grande quantidade de material durante o transcorrer de tal evento. Sua duração pode durar horas ou até mesmo anos, permitindo que a corrente alcance velocidades constantes mesmo após o início do processo de sedimentação, visto sua alimentação contínua.

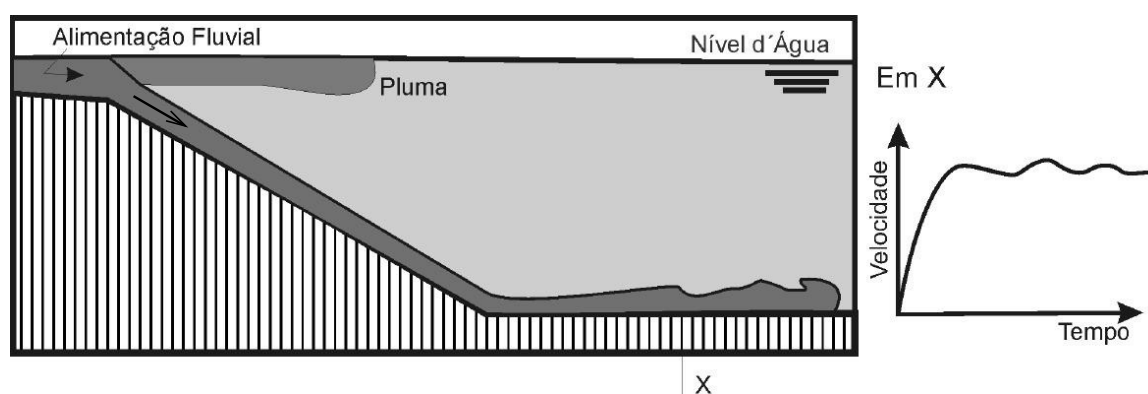


Figura 4 – Formas de início de uma corrente de gravidade. Remobilização não-instantânea de material. Fonte: Manica (2009).

Os escoamentos que se enquadram dentro deste mecanismo também são chamados de plumas. São classificados como hipo, hiper, homo ou mesopicnais (MULDER; ALEXANDER, 2001) de acordo com a relação entre as massas específicas da corrente (ρ_c) e do fluido ambiente (ρ_a). A Figura 5 ilustra esta categorização.

As plumas possuem amplo campo de estudo mas não serão objeto da investigação neste trabalho, o qual estará focado no mecanismo de início por pulso.

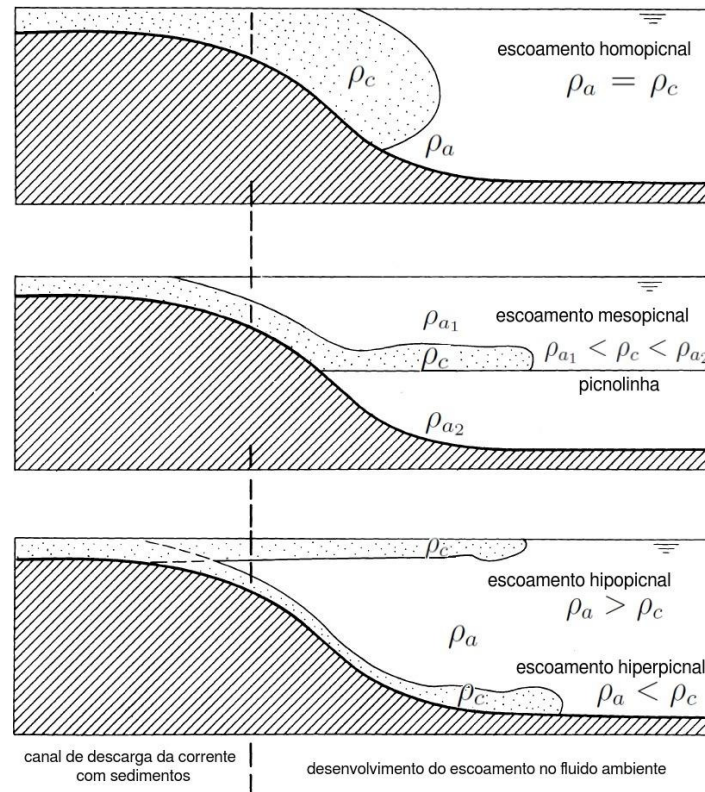


Figura 5 – Classificação de um fluxo contínuo quanto à sua densidade em relação à densidade do fluido ambiente. Fonte: Adaptado de Mulder e Alexander (2001).

3.2 Aspectos dinâmicos e morfológicos de uma corrente de gravidade

Toda corrente de gravidade possui uma anatomia característica, onde é possível observar algumas regiões bem delimitadas e outras nem tanto. Sua dinâmica é intensamente interferida pelos limites que a circundam, conforme veremos a seguir.

3.2.1 Morfologia e dinâmica da corrente

Através da observação das correntes de gravidade, constatou-se a formação de regiões distintas com características próprias que influenciam sua dinâmica (Figura 6). A literatura destaca claramente duas delas por sempre estarem presentes, independente do mecanismo de início a saber: a cabeça e o corpo. A cauda somente está presente nas correntes do tipo pulso (*surge-like flows*), de modo que sua relevância é pouco

significativa no avanço da corrente.

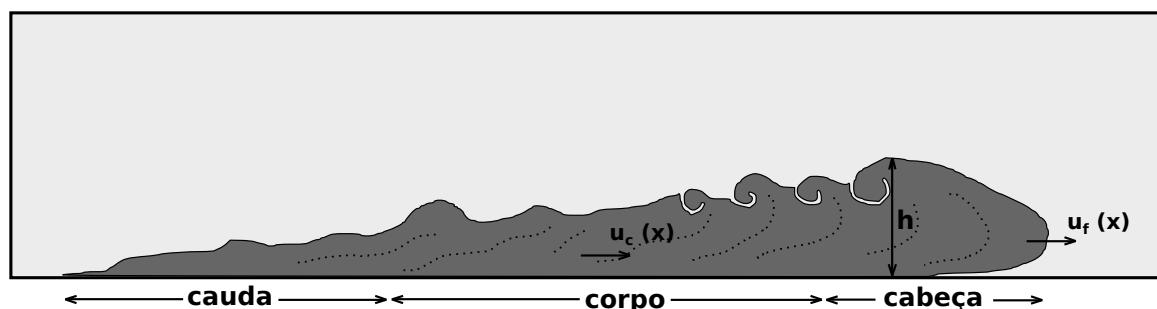


Figura 6 – Regiões de uma corrente de gravidade. u_f é a velocidade da frente da corrente ou cabeça e u_c é a velocidade do corpo da corrente. h refere-se a altura da cabeça em relação ao fundo do domínio. Fonte: Adaptado de Del Rey (2006).

A região denominada cabeça possui forma distinta do restante da corrente e apresenta uma clara fronteira que divide o fluido mais pesado do menos pesado, apesar de haver intensa mistura. Não apresenta forma única pois seu perfil é fortemente influenciado pela turbulência, efeitos viscos e pelo fluido menos denso que se opõe ao movimento.

Sua forma mais destacada está relacionada com o fato de que esta porção mais adiantada da corrente sofre toda a resistência do fluido ambiente, o qual se contrapõe ao movimento de avanço. Por estar sujeita a maiores forças do que o corpo e cauda, a cabeça deve apresentar maior espessura, implicando em um balanço de massa e quantidade de movimento diferente daqueles encontrados nas duas outras porções da corrente (MIDDLETON, 1993; SIMPSON, 1999).

Simpson e Britter (1979) apresentaram um estudo detalhado das características presentes na região frontal de uma corrente de gravidade, subdividindo-a em três zonas: zonas inferior, superior e não perturbada (Figura 7). Na zona inferior acontece um fluxo mais denso que apresenta pouca ou nenhuma mistura, da mesma forma acontece com a zona não perturbada, porém o fluido que ali se encontra é menos denso. A zona superior é onde ocorre a grande parte da mistura do fluido ambiente com a corrente por causa dos grandes vórtices que se formam devido ao cisalhamento viscoso. Tais

estruturas são conhecidas como vórtices de Kelvin-Helmholtz (K-H) (Figura 8(a)).

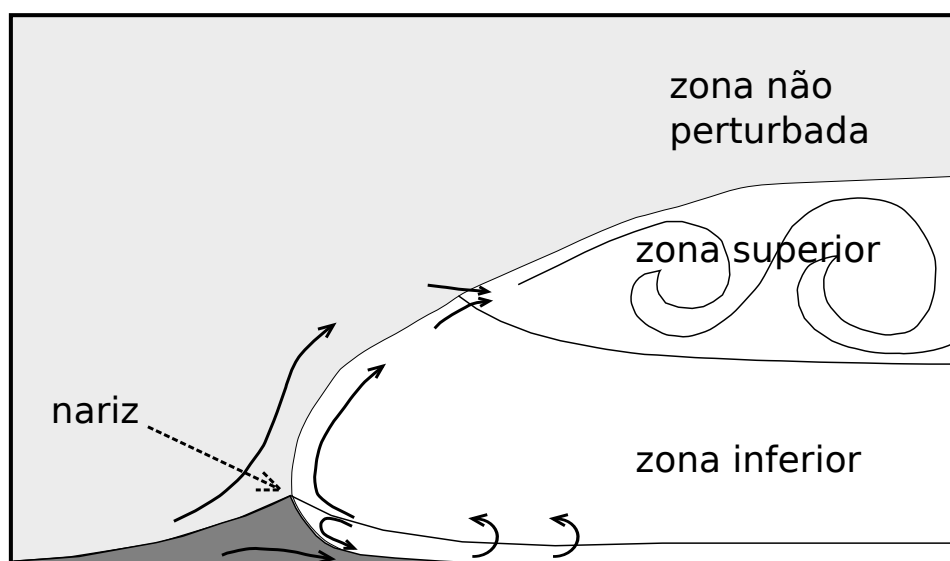


Figura 7 – Estruturas internas da região frontal de uma corrente de gravidade. Fonte: Simpson (1999).

Na parte mais anterior da cabeça notamos um sobressalto, causado pela condição de não deslizamento do escoamento em relação ao solo, denominado nariz (KNELLER; BUCKEE, 2000). Por estar afastada do solo, há a entrada de fluido ambiente abaixo da cabeça, provocando focos de circulação reversa na parte inferior. Com o avanço da corrente sobre o fluido menos denso, instabilidades gravitacionais podem originar as complexas estruturas denominadas lobos e fendas (SIMPSON, 1972) que estendem-se longitudinalmente para dentro da cabeça (Figura 8(b)).

Visto que a cabeça apresenta menor velocidade do que o corpo da corrente, o fluxo proveniente da zona inferior, ao chegar até a região do nariz, é defletido para trás em direção à zona superior, misturando-se com o fluido ambiente que é desviado da cabeça e chega na parte superior (BENJAMIN, 1968).

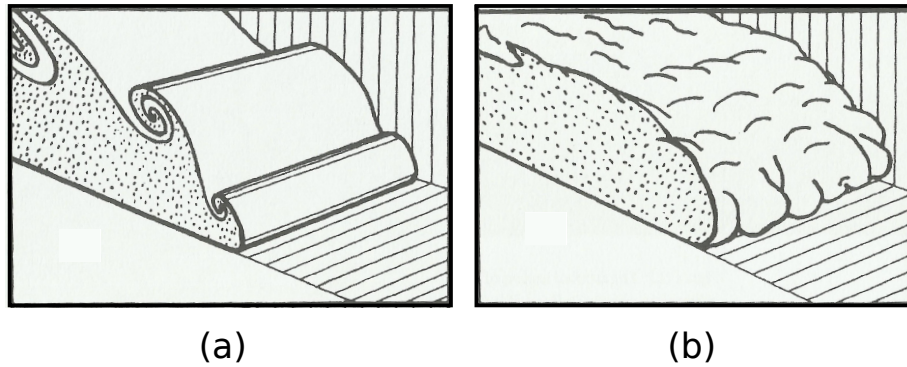


Figura 8 – Estruturas presentes na região frontal de uma corrente de gravidade. (a) Vórtices de K-H; (b) estruturas de lobos e fendas (*lobe-and-cleft*). Fonte: Simpson (1999).

3.2.2 Estrutura vertical da corrente

Kneller e Buckee (2000) apresentam também os diferentes comportamentos presentes na direção vertical. A velocidade máxima de uma corrente acontece na altura do ponto mais avançado, ou seja, o nariz. Uma linha horizontal imaginária que passa por este local separa a corrente em uma região inferior e em uma exterior (Figura 9).

A região inferior, delimitada pelo fundo, geralmente apresenta espessura menor do que a metade da espessura da região exterior, possuindo gradiente de velocidade positivo na vertical. De maneira contrária, a região exterior apresenta gradiente de velocidade negativo.

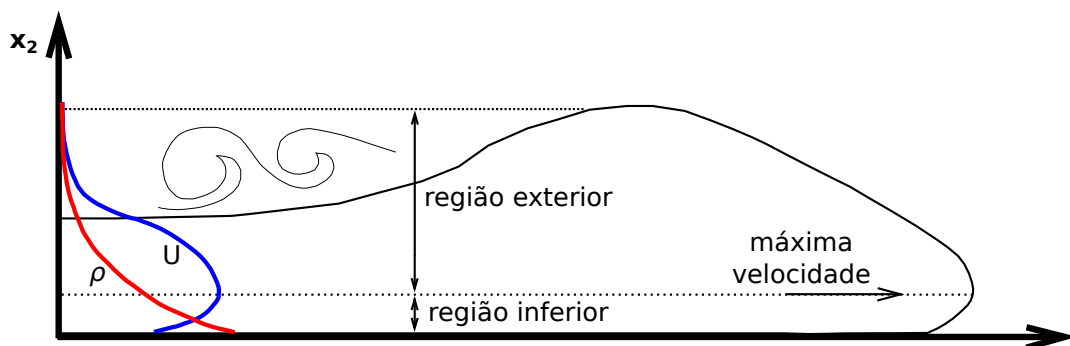


Figura 9 – Perfil esquemático da cabeça e do corpo mostrando as características referentes ao perfil de velocidade e de densidade. Fonte: Adaptado de Kneller e Buckee (2000).

3.3 Modelo teórico inicial

3.3.1 Análise dimensional

A análise dimensional, embora tenha uma abordagem simplista, trouxe boas descobertas fundamentais para o tema. Os primeiros estudos sobre a velocidade frontal de uma corrente de gravidade (\tilde{U}_f) mostram que seu valor é proporcional à raiz quadrada da gravidade reduzida e da altura da cabeça (\tilde{h}),

$$\tilde{U}_f \propto \sqrt{\tilde{g}'\tilde{h}}, \quad (3.1)$$

onde todos os termos assinalados com um til representam grandezas dimensionais. \tilde{g}' é chamada gravidade reduzida expressa por

$$\tilde{g}' = \tilde{g} \left(\frac{\tilde{\rho}_c - \tilde{\rho}_a}{\tilde{\rho}_a} \right) = \tilde{g} \left(\frac{\Delta\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}_a} \right), \quad (3.2)$$

sendo que \tilde{g} , $\tilde{\rho}_c$ e $\tilde{\rho}_a$ são a aceleração da gravidade, a massa específica da corrente (mistura fluido ambiente/partículas) e a massa específica do fluido ambiente, respectivamente.

Em seu modelo, von Kármán (1940) estabelece uma aproximação para velocidade em ambientes profundos. Nele, o autor considera que a corrente encontra-se estacionária e o fluido ambiente é que movimenta-se. Analisando as pressões na interface entre os dois fluidos e aplicando Bernoulli ele obteve que

$$\tilde{U}_f = \sqrt{2\tilde{g}'\tilde{h}}. \quad (3.3)$$

Benjamin (1968), dando sequência ao trabalho de von Kármán (1940), estabelece que o fator de proporcionalidade refere-se ao número de Froude,

$$Fr = \frac{\tilde{U}_f^2}{\tilde{g}'\tilde{h}}, \quad (3.4)$$

sendo encontrado $Fr = \sqrt{2}$ para tal caso que contempla escoamentos invíscidos em grandes profundidade. Mais recentemente, Shin et al. (2004) estabeleceu que $Fr = 1$

para escoamentos nas mesmas condições de profundidade. Huppert e Simpson (1980) e Simpson (1999) propoem que o número de Froude é dependente da relação entre altura da cabeça (\tilde{h}) e a profundidade (\tilde{L}_2) quando esta última não é grande.

Existem ainda outras abordagens teóricas que conseguem reproduzir, de forma bastante aproximada, muitos aspectos observados experimentalmente. É interessante citar os modelos Integrais (*box models*) que assumem a corrente como tendo uma forma bem simples, uma espécie de “caixa” com um comprimento e uma altura (caso 2D) variáveis com o tempo, sendo que seu principal objetivo é determinar o comportamento destas duas dimensões. Outra abordagem muito utilizada é o modelo de Águas Rasas (*shallow water*), mais complexo do que o anterior. Neste modelo assume-se somente pequenas variações das propriedades do escoamento na vertical, de modo que o campo de pressões seja puramente hidrostático e que o perfil de concentração permaneça constante. Para este modelo ser válido, a extensão horizontal da corrente necessita ser muito maior do que sua espessura (HUPPERT, 1998).

4 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E METODOLOGIA NUMÉRICA

4.1 Equações Governantes

Nesta seção serão apresentadas as equações gerais que regem a dinâmica do escoamento em questão. O conjunto de equações de Navier-Stokes, composto da equação da continuidade e de quantidade de movimento, acrescido de um equação para o transporte de quantidades escalares servem de base para modelar o problema. Todas as equações citadas anteriormente serão apresentadas na sua forma dimensional para, posteriormente, serem introduzidas suas correspondentes adimensionalizações.

4.1.1 Lei de Stokes para a partícula

Assumindo que uma partícula de sedimento possa ser aproximada, em sua geometria, por uma esfera sólida, ela tende a acelerar até alcançar uma velocidade de queda constante \tilde{u}^s (parâmetros indicados com til dizem respeito a quantidades dimensionais) ao cair dentro de um fluido de menor densidade (Figura 10). Esta velocidade é dependente do peso da esfera \tilde{F}_p e das forças de empuxo \tilde{F}_b e de arrasto \tilde{F}_d , contrárias ao movimento de queda, sendo que o balanço de forças tem a forma,

$$\tilde{F}_p = \tilde{F}_b + \tilde{F}_d, \quad (4.1)$$

que pode ser desdobrada com seus respectivos termos

$$\frac{\pi}{6} \tilde{d}_p^3 \tilde{\rho}_p \tilde{g} = \frac{\pi}{6} \tilde{d}_p^3 \tilde{\rho}_a \tilde{g} + 3\pi \tilde{\mu}_a \tilde{d}_p \tilde{u}^s, \quad (4.2)$$

e isolando-se \tilde{u}^s , tem-se a velocidade de sedimentação de Stokes,

$$\tilde{u}^s = \frac{1}{18} \tilde{d}_p^2 \tilde{g} \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a)}{\tilde{\mu}_a}, \quad (4.3)$$

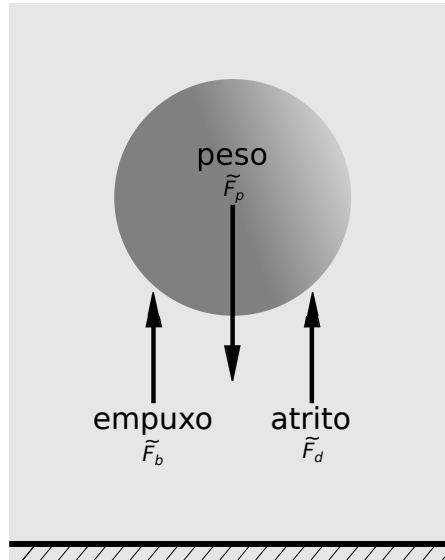


Figura 10 – Esquema das forças atuantes sobre uma partícula esférica descrita pela lei de Stokes.

onde \tilde{d}_p , $\tilde{\rho}_p$, $\tilde{\rho}_a$ e $\tilde{\mu}_a$ são o diâmetro e massa específica da partícula, bem como massa específica e viscosidade dinâmica do fluido ambiente, respectivamente. Esta expressão resulta em uma boa aproximação quando aplicada a partículas de pequeno diâmetro ($\tilde{d}_p < 0,1mm$) e, para que a floculação se torne desprezível, devem estar em baixas concentrações (JULIEN, 1998). Gladstone et al. (1998) sugere que a velocidade de sedimentação pode ser um terço menor do que a aproximada pela lei de Stokes se a partícula possuir uma forma com muitos ângulos, o que pode gerar um arrasto significativo sobre ela.

4.1.2 Conservação da massa, Navier-Stokes e transporte de quantidades escalares

O foco deste trabalho está nos escoamentos onde a fase dispersa encontra-se suficientemente diluída, de modo que se tenha baixas frações volumétricas de sedimentos $C_r \ll 1$, tornando possível desprezar variações na viscosidade da mistura bem como a influência inercial entre as partículas. Assumindo um escoamento incompressível, a equação da conservação da massa e da quantidade de movimento são expressas por

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_i} = 0, \quad (4.4a)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j} = -\frac{1}{\tilde{\rho}_a} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{x}_i} + \tilde{\nu}_a \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j \partial \tilde{x}_j} - \frac{\tilde{c}_t}{\tilde{\rho}_a} \tilde{F}_d, \quad (4.4b)$$

onde \tilde{u}_i refere-se ao campo de velocidades, \tilde{p} é a pressão, $\tilde{\nu}_a$ é a viscosidade cinemática do fluido ambiente e \tilde{c}_t é a densidade do número de partículas total, ou seja, o número de partículas por unidade de volume. A equação 4.4b, que descreve o movimento da fase fluida, é acrescentada por um termo de força que leva em conta o efeito das partículas sobre o fluido.

Adicionalmente, pelo pressuposto encontrado na aproximação de Boussinesq, é permitido escrever as equações da Continuidade e da Quantidade de Movimento apenas em função da massa específica do fluido ambiente. Isto somente é possível para baixas concentrações de sedimentos, onde as partículas são consideradas diluídas no fluido intersticial que, para o presente trabalho, possui a mesma natureza do fluido ambiente ($\tilde{\rho}_a$). Admitindo que a densidade da corrente seja função da massa específica das partículas, da massa específica do fluido ambiente e da fração volumétrica (HOGG et al., 2000),

$$\tilde{\rho}_c = \tilde{\rho}_a \left(1 + \frac{\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a}{\tilde{\rho}_a} C_r \right), \quad (4.5)$$

temos que

$$\frac{\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a}{\tilde{\rho}_a} C_r \ll 1, \quad (4.6)$$

podendo ser desconsiderada 4.6 de 4.5, sobrando somente $\tilde{\rho}_c = \tilde{\rho}_a$.

Considerando que a velocidade da partícula é dada pela soma da velocidade local do fluido \tilde{u}_i e da velocidade de sedimentação da partícula \tilde{u}_i^s , a evolução temporal do campo de concentrações é descrita pela seguinte equação de transporte de escalares

$$\frac{\partial \tilde{c}_l}{\partial \tilde{t}} + (\tilde{u}_j + \tilde{u}_l^s e_l^g) \frac{\partial \tilde{c}_l}{\partial \tilde{x}_j} = \tilde{k}_l \frac{\partial^2 \tilde{c}_l}{\partial \tilde{x}_j \partial \tilde{x}_j}, \quad l = 1, \dots, N \quad (4.7)$$

onde \tilde{k}_l é a difusividade de cada tipo de partícula, incluída por Necker et al. (2002) para considerar o espalhamento das partículas em suspensão, causado pela difusão hidrodinâmica ou pela natureza poli-dispersa do escoamento. $e_l^g = (0, -1, 0)$ é o vetor unitário agindo na direção da gravidade e N representa o número de partículas com velocidade de queda diferentes.

A adimensionalização das equações 4.4a, 4.4b e 4.7 facilita a resolução, pois as quantidades características do escoamento são reunidas em uma única grandeza adimensional. Desta forma, foi escolhido como comprimento característico a metade da altura do domínio $\tilde{h} = \tilde{L}_2/2$. A velocidade de flutuação \tilde{u}_b foi utilizada como velocidade característica, definida como

$$\tilde{u}_b = \sqrt{\tilde{g} \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a) C_r \tilde{h}}{\tilde{\rho}_a}}, \quad (4.8)$$

onde C_r também é usada como escala característica para adimensionalização.

Abaixo estão escritas as equações da continuidade, da quantidade de movimento e de transporte de escalar na sua forma adimensional, as quais somente serão tratadas desta forma daqui em diante:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.9a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + c_t e_i^g, \quad (4.9b)$$

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} + (u_j + u_l^s e_l^g) \frac{\partial c_l}{\partial x_j} = \frac{1}{Sc_l Re} \frac{\partial^2 c_l}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (4.9c)$$

sendo $u_l^s = \tilde{u}_l^s / \tilde{u}_b$ a velocidade de queda para cada fração de partículas. O detalhamento da adimensionalização da equação 4.4b é apresentado no Apêndice A. A partir daqui podemos definir c_t como

$$c_t = \sum_{l=1}^N c_l. \quad (4.10)$$

Dois grupos adimensionais conhecidos surgem, onde o primeiro é o número de Reynolds, que nos fornece uma relação entre as forças inerciais e viscosas, expressa por

$$Re = \frac{\tilde{u}_b \tilde{h}}{\tilde{\nu}}. \quad (4.11)$$

O outro grupo adimensional importante é o número de Schmidt descrito como a relação entre a taxa de difusividade dos campos de velocidades e de concentrações. Para todas as simulações deste trabalho será tomado $Sc_l = 1$.

$$Sc_l = \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{k}_l}. \quad (4.12)$$

4.2 Domínio de cálculo, condições de contorno e iniciais

As simulações feitas neste trabalho baseiam-se em uma configuração bem conhecida, chamada *lock-exchange*, já mencionada anteriormente. O domínio de cálculo possui comprimento L_1 , altura L_2 e largura L_3 (Figura 11). O eixo de coordenadas tem sua origem fixada na interface entre a mistura fluido-partículas e o fluido ambiente e está representado por (x_1, x_2, x_3) em substituição aos tradicionais (x, y, z) . O sub-volume onde inicialmente está aprisionado o fluido mais denso tem dimensões $L_{1s} \times L_{2s} \times L_{3s}$. Quanto aos cálculos bidimensionais, somente foi considerado o plano $(L_1 \times L_2)$, suprimindo-se todos os componentes com sub-índice 3.

O fechamento das equações junto às fronteiras do domínio é feito impondo-se as seguintes condições de contorno para o campo de velocidades: não deslizamento no topo e no fundo, enquanto que é permitido o livre deslizamento nas paredes laterais. Para o campo de concentrações é assegurado que não haja fluxo de partículas através das fronteiras, porém no fundo, em $x_2 = 0$, foram adotadas duas abordagens diferentes para sua comparação.

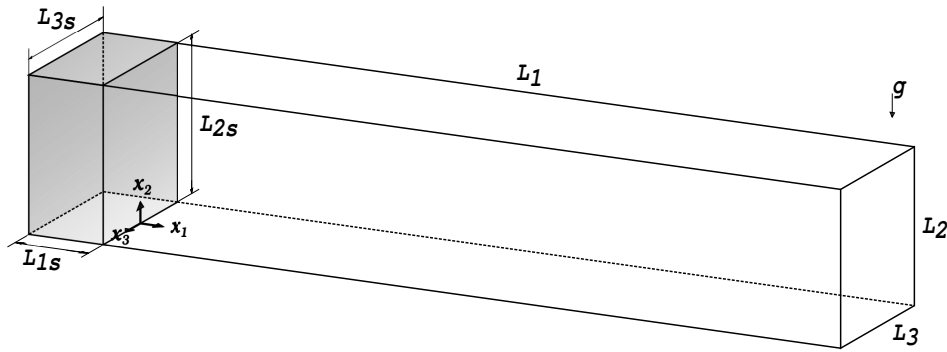


Figura 11 – Configuração inicial para o caso *lock-exchange* tridimensional. Para cálculos 2D a componente do eixo x_3 não é considerada.

A Tabela 1 mostra uma condição de contorno chamada “I”, utilizado por Necker et al. (2002), onde uma condição de saída convectiva é empregada permitindo que as partículas deixem o domínio de cálculo, com uma velocidade de queda u_i^s , logo que depositam. Isto implica desprezar a possibilidade de resuspensão das partículas sedimentadas. Na condição tipo “II”, Nasr-Azadani et al. (2013) dizem que as partículas também deixam o domínio se a equação de transporte de escalar (Eq. 4.9c) for resolvida em uma malha de cálculo deslocada para o campo de concentrações, onde o primeiro nó localiza-se à distância de meia célula acima da parede inferior. Fazendo desta forma, assume-se uma condição de fluxo nulo em $x_2 = 0$. Com ambas as condições de contorno, considera-se que a camada de material depositado seja fina o suficiente de maneira que o fundo do domínio permaneça sempre plano.

Como condição inicial, o campo de velocidades encontra-se com todas as suas componentes iguais a zero sendo que, para casos 3D, introduz-se, somente no tempo imediatamente após a liberação do volume aprisionado em $(L_{1s} \times L_{2s} \times L_{3s})$, uma perturbação em u_i , na interface corrente/fluido ambiente, posicionada em $x_1 = 0$, representando a perturbação adicionada pelo movimento de retirada da placa que divide os fluidos. O campo de concentrações inicial é gerado por uma função tangente hiperbólica, ajustada de maneira que sua forma assemelhe-se a um degrau e seu valor máximo corresponda à fração inicial da partícula correspondente, conforme Equação 4.13 e a Figura 12.

Tabela 1 – Condições de contorno para o campo de velocidades e concentrações.

	Velocidade	Concentração
$x_1 = -L_{1s}$ $x_1 = L_1$	$u_1 = 0; \frac{\partial u_2}{\partial x_1} = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} = 0$	$\frac{\partial c_i}{\partial x_1} = 0$
$x_3 = \frac{-L_3}{2}$ $x_3 = \frac{L_3}{2}$	$u_3 = 0; \frac{\partial u_1}{\partial x_3} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = 0$	$\frac{\partial c_i}{\partial x_3} = 0$
$x_2 = L_2$	$u_1 = u_2 = u_3 = 0$	$\frac{\partial c_i}{\partial x_2} = 0$
$x_2 = 0$	$u_1 = u_2 = u_3 = 0$	I) $\frac{\partial c_i}{\partial t} + u_i^s c_2^g \frac{\partial c_i}{\partial x_2} = 0$ II) $\frac{\partial c_i}{\partial x_2} = 0$

$$c_i(t = 0) = c_{0i} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left(x_1 \sqrt{Sc_i Re} \right) \right]. \quad (4.13)$$

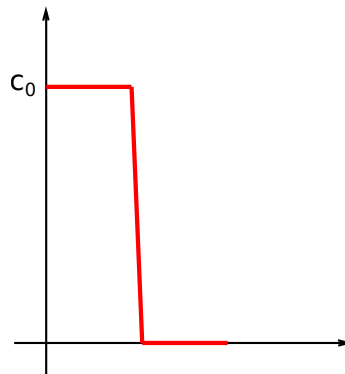


Figura 12 – Formato da função tangente hiperbólica que gera os campos iniciais de concentração.

4.3 Estratégia de cálculo

O procedimento adotado para a realização das simulações baseou-se em um “alongamento” da malha de cálculo no sentido do eixo x_1 . Esta estratégia foi esco-

lhida diante da necessidade de se ter um refinamento maior da malha nos instantes subsequentes à liberação da mistura fluido/partícula, inicialmente presa.

Ao ser retirada a placa, o deslocamento de todo o fluido pesado, em um movimento descendente junto à parede esquerda do domínio, produz grandes gradientes no campo de concentração e intensa recirculação no canto inferior esquerdo, sendo imprescindível uma qualidade de resolução bastante alta destas características para o correto avanço do cálculo. Após a corrente de gravidade passar pelo canto inferior esquerdo do domínio, torna-se possível utilizar uma malha refinada com menor rigor.

A estratégia pode ser explicada da seguinte maneira: primeiramente define-se o tamanho final do domínio de cálculo $L_1^* = L_1 + L_{1s}$ (Figura 11), o número de pontos de malha n_1 e encontra-se o $\Delta x_1 = L_1^*/n_1$ final. Após, para encontrar os parâmetros para o início da simulação, divide-se L_1^* pela metade, resultando em um novo domínio e, conseqüentemente, Δx_1 valendo a metade do anterior. Se for apropriado, se pode repetir o procedimento dividindo o segundo domínio novamente pela metade, o que resultará em um Δx_1 1/4 do inicial. A primeira parte da simulação acontece durante um tempo adimensional suficiente para que o fluxo passe pela zona mais crítica e não se aproxime da fronteira direita, de maneira que o campo de velocidades não seja perturbado significativamente neste ponto. Terminada a primeira parte, começa o processo inverso, o de alongamento onde duplica-se o domínio de cálculo, o que resulta em uma malha duas vezes maior no sentido de x_1 e assim sucessivamente (Figura 13).

Além do ganho com o refino da malha, simular o mesmo número de pontos em um domínio menor redundará em uma economia de tempo, um dos fatores críticos no custo da simulação. Esta estratégia foi utilizada tanto nos casos bidimensionais quanto nos tridimensionais, apenas com uma pequena variação de um em relação ao outro, desta forma:

- Caso 2D: Início conforme “Parte B” da Figura 13 até o tempo adimensional $t = 5$, prosseguindo com um alongamento, conforme “Parte C”, até $t = 135$;

- Caso 3D: Início na “Parte A” durante 5 tempos adimensionais, seguido de um alongamento (“Parte B”) em x_1 durante 10 tempos, até $t = 15$ e, por fim, procedendo à “Parte C” até o tempo final $t = 60$.

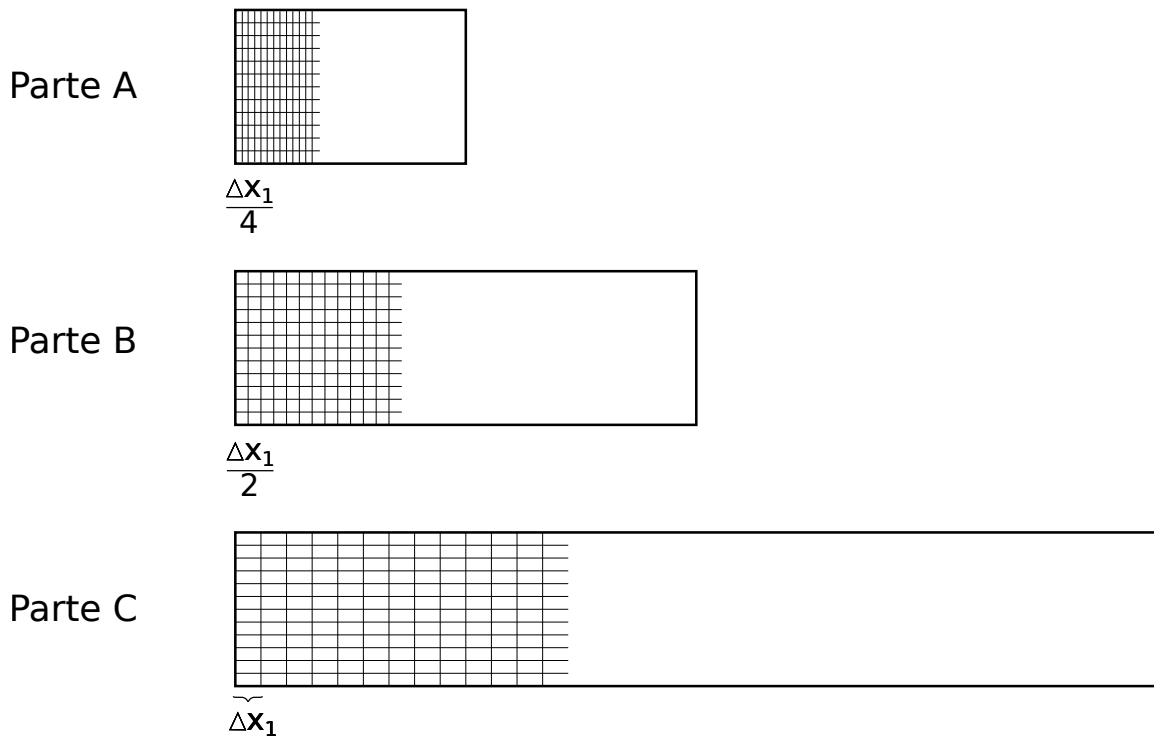


Figura 13 – Esquema demonstrativo da estratégia de alongamento da malha no sentido do eixo x_1 .

Conforme mencionado, este método somente é possível quando não há significativas perturbações no campo de velocidades junto à parede direita ao final de cada etapa (exceto da última), pois para ter validade física, o fluido não poderia “enxergar” a fronteira direita como uma parede sólida. A estratégia de alongamento foi comparada com uma simulação feita em domínio inteiro mostrando resultados bastante semelhantes, mesmo o campo de velocidades apresentando perturbações com valores máximos em torno de 0,3% junto à parede direita. Maiores detalhes são apresentados no Apêndice B.

4.4 Simulação numérica direta (DNS)

A simulação numérica direta é uma importante ferramenta para a pesquisa e visualização das estruturas turbulentas presentes em escoamentos. Este método resolve integralmente as equações de Navier-Stokes sem ser necessário incorporar modelos para resolver as menores escalas da turbulência.

Esta capacidade de calcular tanto as maiores quanto as menores escalas de turbulência demanda um número bastante alto de graus de liberdade para a malha de cálculo, limitando a investigação em números de Reynolds moderados.

Silvestrini (2003) mostra que a escala integral de comprimento (l), referente à escala das maiores estruturas em uma turbulência isotrópica e homogênea, é apresentada como

$$l \sim \frac{v^3}{\epsilon}, \quad (4.14)$$

onde v é a escala característica para as velocidades e ϵ designa a taxa de dissipação da turbulência. Já a estimativa para a escala das menores estruturas, chamada de escala de Kolmogorov é dada por

$$\eta \sim \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}, \quad (4.15)$$

com ν sendo a viscosidade cinemática. Fazendo a razão das equações 4.14 e 4.15 é possível estimar o número de graus de liberdade (N) necessários para que todas as escalas da turbulência sejam resolvidas.

$$N \sim \frac{l}{\eta} \sim \left(\frac{lv}{\nu} \right)^{3/4} \sim Re_l^{3/4}. \quad (4.16)$$

O parâmetro Re_l é o número de Reynolds turbulento baseado na escala integral. Esta relação nos diz que, para um domínio de cálculo 3D discretizado em $n_x \times n_y \times n_z$ pontos de malha, o uso de DNS fica limitado a Reynolds da ordem

$$Re_l \sim (n_x n_y n_z)^{4/9}. \quad (4.17)$$

Esta limitação torna a DNS uma ferramenta bastante voltada para a análise dos detalhes mínimos das estruturas presentes em escoamentos turbulentos, de maneira que sua aplicação para cálculos de engenharia não tem uma boa relação custo/benefício, visto que tal tipo de investigação busca comportamentos mais globais, o que pode ser perfeitamente alcançado com outros métodos que considerem somente os valores médios ou que modelam o comportamento a partir de determinadas escalas.

4.5 Balanço total de energias

A maneira mais simples de entendermos uma corrente de gravidade é considerá-la como sendo a conversão de energia potencial em energia cinética. A energia potencial inicial da mistura partícula-fluido, inicialmente em repouso, converte-se em energia cinética assim que acontece a retirada da placa.

Para as correntes de gravidade provenientes da presença de partículas em suspensão, a energia cinética, associada ao movimento do fluido, é dissipada pelo campo macroscópico de velocidades e pelo escoamento de Stokes ao redor de cada partícula.

Em seu trabalho, Necker et al. (2005) avalia a evolução temporal dos termos da energia de uma corrente com partículas, desconsiderando os efeitos difusivos que o campo de concentrações exerce sobre a energia potencial. De maneira diferente e baseado em Espath et al. (2013), o presente trabalho leva em conta todas as parcelas, sem simplificações, para que se estabeleça o balanço completo de energias, com a intenção de estimar, da forma mais precisa possível, todos os termos referentes a cada tipo de partícula presente na corrente de gravidade.

A obtenção de uma equação para a variação da energia cinética com o tempo é feita multiplicando-se a equação da quantidade de movimento (4.9b) do fluido pelo

campo de velocidades u_i , resultando em

$$\frac{D(\frac{1}{2}u_i u_i)}{Dt} = -\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} + \frac{2}{Re} \frac{\partial(S_{ij} u_i)}{\partial x_j} - \frac{2}{Re} S_{ij} S_{ij} - u_2 c_t. \quad (4.18)$$

Na equação acima, $\frac{D(\cdot)}{Dt}$ denota a derivada material e S_{ij} é o tensor taxa de deformação, representado por

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.19)$$

Para avaliar a evolução temporal da energia cinética, a equação (4.18) é integrada sobre todo o domínio V , resultando em

$$\frac{dk}{dt} = - \int_V \frac{2}{Re} S_{ij} S_{ij} dV - \int_V u_2 c_t dV, \quad (4.20)$$

e também em

$$k(t) = \int_V \frac{1}{2} u_i u_i dV, \quad (4.21)$$

onde os dois primeiros termos do lado direito da equação 4.18, ao serem integrados sobre todo o domínio, desaparecem pois, no campo de velocidades, não há transporte através das fronteiras.

Para o cálculo da energia potencial total da corrente, precisamos primeiramente encontrar a energia potencial associada a cada tipo partícula e em seguida realizar o somatório, como demonstrado abaixo

$$E_{p_l}(t) = \int_V c_l x_2 dV, \quad (4.22a)$$

$$E_{p_t}(t) = \sum_{l=1}^N E_{p_l}, \quad (4.22b)$$

onde E_{p_l} e E_{p_t} são a energia potencial de cada partícula e a energia potencial total, respectivamente.

Multiplicando a equação do campo de concentração por x_2 e fazendo alguma álgebra, obtemos a derivada da energia potencial no tempo para a l -ésima partícula

$$\frac{dEp_l}{dt} = \int_V \left(x_2 \frac{1}{Sc_l Re} \frac{\partial^2 c_l}{\partial x_j \partial x_j} + x_2 u_l^s \frac{\partial c_l}{\partial x_2} \right) dV + \int_V u_2 c_l dV. \quad (4.23)$$

Considerando que a energia mecânica total do escoamento é igual à soma da suas energias potencial e cinética, nós conseguimos estimar a variação temporal da energia mecânica pela soma das equações (4.20) e (4.23)

$$\frac{d(k + Ep_t)}{dt} = - \int_V \frac{2}{Re} S_{ij} S_{ij} dV + \sum_{l=1}^N \left[\int_V \left(x_2 \frac{1}{Sc_l Re} \frac{\partial^2 c_l}{\partial x_j \partial x_j} + x_2 u_l^s \frac{\partial c_l}{\partial x_2} \right) dV \right], \quad (4.24a)$$

$$= -\epsilon - \epsilon_{s_t}. \quad (4.24b)$$

Destacamos que o segundo termo ao lado direito da equação 4.20 cancela-se com o terceiro termo do lado direito da equação 4.23 porque há o somatório (ver 4.10) dos termos da energia potencial.

A partir desta equação, as perdas na energia podem ser divididas em dissipação macroscópica E_d e microscópica E_{s_t} , conforme abaixo

$$E_d(t) = \int_0^t \epsilon(\tau) d\tau, \quad (4.25a)$$

$$E_{s_t}(t) = \sum_{l=1}^N E_{s_l}(t) = \sum_{l=1}^N \left[\int_0^t \epsilon_{s_l}(\tau) d\tau \right]. \quad (4.25b)$$

Integrando no tempo a equação 4.24a e incorporando as perdas dissipativas, chegamos ao balanço completo de energias. A conservação é demonstrada pela soma de todos os termos, onde a energia total inicial (E_{t_0}) é esperada ser constante.

$$k + Ep_t + E_d + E_{s_t} = E_{t_0}. \quad (4.26)$$

4.6 Metodologia numérica

Para resolver numericamente a equação de Navier-Stokes (4.9b) e a equação de transporte de escalar (4.9c), é utilizado o código computacional `Incompact3D` que permite calcular escoamentos de problemas físicos de camada de mistura estratificada (MARTINEZ, 2006), canal com fundo ondulado (BUARQUE, 2007) e escoamentos ao redor de cilindros (PINTO, 2008). Este código baseia-se em um método de diferenças finitas compactas de 6ª ordem para as derivadas espaciais.

O avanço no tempo é feito com o esquema de Adams-Bashforth de 2ª ordem de precisão para casos bidimensionais e de 3ª ordem para os tridimensionais. A equação de Poisson é resolvida empregando-se um método spectral (LAIZET; LAMBALLAIS, 2009). Para as simulações 3D, utilizamos a versão paralelizada do código que baseia-se em uma estratégia de decomposição do domínio tridimensional em subdomínios bidimensionais a cada passo de tempo (LAIZET; LI, 2010)

4.6.1 Discretização espacial

A discretização espacial da Eq. 4.9b baseia-se em um esquema de diferenças finitas centradas compacto (LELE, 1992). O esquema requer, para cada nó, uma função $f_i = f(x_i)$ que retorne seus valores. A malha proposta é formada pelos nós, identificados pelo sub-índice i , igualmente espaçados. A posição de cada nó é indicada pela variável independente $x_i = \Delta x(i - 1)$, para $1 \leq i \leq M$, onde Δx é o espaçamento entre os pontos da malha e M é a quantidade de nós (Figura 14).

A aproximação para a derivada primeira da função f_i , em um ponto i , depende dos valores da função em pontos de sua vizinhança. A forma geral desta aproximação é a seguinte:

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + c \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x}. \quad (4.27)$$

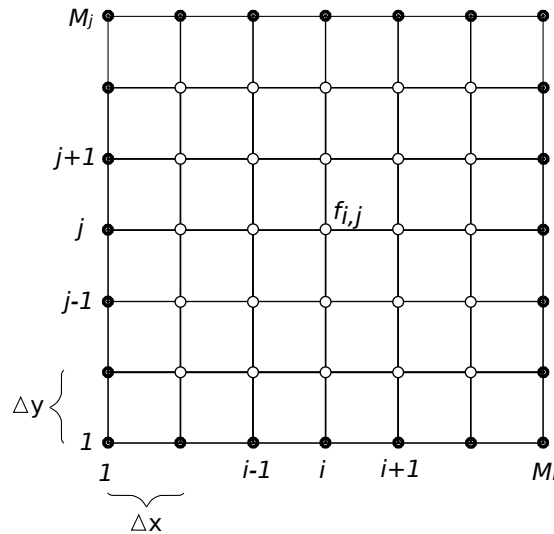


Figura 14 – Exemplo de uma malha cartesiana bidimensional. Os círculos pretos representam os nós das fronteiras.

Da mesma forma, a aproximação para a derivada segunda é dada por:

$$\beta f''_{i-2} + \alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} + \beta f''_{i+2} = a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i+3}}{4\Delta x^2} + c \frac{f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}}{9\Delta x^2}. \quad (4.28)$$

4.6.1.1 Aproximação para a derivada primeira

Para o cálculo da derivada primeira, o código Incompact3D baseia-se em esquemas de diferentes ordens. O esquema e a ordem mudam conforme a região analisada do domínio computacional, e estão distribuídos como:

- Esquema tridiagonal de 6ª ordem para as derivadas no interior do domínio, compreendendo os nós $3 \leq i \leq M - 2$, dado por:

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x}, \quad (4.29)$$

com coeficientes

$$\alpha = \frac{1}{3}; \quad a = \frac{14}{9}; \quad b = \frac{1}{9}; \quad c = \beta = 0.$$

- Esquema de 3ª ordem descentrado para as derivadas nos contornos do domínio, compreendendo os nós $i = 1$ e $i = M$, dado por:

$$f'_1 + \alpha f'_2 = \frac{af_1 + bf_2 + cf_3}{\Delta x} \quad (4.30a)$$

$$f'_M + \alpha f'_{M-1} = \frac{-af_M - bf_{M-1} - cf_{M-2}}{\Delta x}, \quad (4.30b)$$

com coeficientes

$$\alpha = 2; \quad a = -\frac{5}{2}; \quad b = 2; \quad c = \frac{1}{2}.$$

- Esquema de 4ª ordem centrado para as derivadas nos pontos vizinhos aos contornos do domínio, compreendendo os nós $i = 2$ e $i = M - 1$, dado por:

$$\alpha f'_1 + f'_2 + \alpha f'_3 = a \frac{f_3 - f_1}{2\Delta x} \quad (4.31a)$$

$$\alpha f'_{M-2} + f'_{M-1} + \alpha f'_M = a \frac{f_M - f_{M-2}}{2\Delta x}, \quad (4.31b)$$

com coeficientes

$$\alpha = \frac{1}{4}; \quad a = \frac{3}{2}.$$

4.6.1.2 Aproximação para a derivada segunda

Abaixo seguem os esquemas para a aproximação da derivada segunda:

- Esquema tridiagonal de 6ª ordem para as derivadas no interior do domínio, compreendendo os nós $3 \leq i \leq M - 2$, dado por:

$$\alpha f''_{i-1} + f''_i + \alpha f''_{i+1} = a \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2}, \quad (4.32)$$

com coeficientes

$$\alpha = \frac{2}{11}; \quad a = \frac{12}{11}; \quad b = \frac{3}{11}.$$

- Esquema de 3ª ordem descentrado para as derivadas nos contornos do domínio, compreendendo os nós $i = 1$ e $i = M$, dado por:

$$f_1'' + \alpha f_2'' = \frac{af_1 + bf_2 + cf_3 + df_4}{\Delta x^2} \quad (4.33a)$$

$$f_M'' + \alpha f_{M-1}'' = \frac{af_M + bf_{M-1} + cf_{M-2} + df_{M-3}}{\Delta x^2}, \quad (4.33b)$$

com coeficientes

$$\alpha = 11; \quad a = 13; \quad b = -27; \quad c = 15; \quad d = -1.$$

- Esquema de 4ª ordem centrado para as derivadas nos pontos vizinhos aos contornos do domínio, compreendendo os nós $i = 2$ e $i = M - 1$, dado por:

$$\alpha f_1'' + f_2'' + \alpha f_3'' = a \frac{f_3 - 2f_2 + f_1}{2\Delta x^2} \quad (4.34a)$$

$$\alpha f_{M-2}'' + f_{M-1}'' + \alpha f_M'' = a \frac{f_M - 2f_{M-1} + f_{M-2}}{2\Delta x^2}, \quad (4.34b)$$

com coeficientes

$$\alpha = \frac{1}{10}; \quad a = \frac{6}{5}.$$

4.6.2 Avanço no tempo

O avanço no tempo das Eq. 4.9a e 4.9b utiliza um esquema temporal Adam-Bashforth de segunda ordem. No primeiro passo do esquema, calcula-se o termo convectivo-difusivo da Eq. 4.9b, para um tempo t_k , da seguinte forma:

$$\vec{F}^k = \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u}^k - (\vec{u}^k \cdot \nabla) \vec{u}^k. \quad (4.35)$$

Após o cálculo do termo convectivo-difusivo, o valor para a velocidade intermediária, u^* , é obtido por:

$$\frac{\vec{u}^* - \vec{u}^k}{\Delta t} = a_k \vec{F}^k + b_k \vec{F}^{k-1}, \quad (4.36)$$

onde a_k e b_k assumem os valores $a_1 = \frac{3}{2}$ e $b_1 = -\frac{1}{2}$.

Sendo encontrada a velocidade intermediária pela Eq. 4.36, ela será utilizada, juntamente com o acréscimo do gradiente de pressão, para avançar até o tempo $k + 1$ como segue:

$$\frac{\vec{u}^{k+1} - \vec{u}^*}{\Delta t} = -c_k \nabla p^{k+1}, \quad (4.37)$$

de maneira que $c_k = a_k + b_k$.

Para a solução do campo de pressão, aplica-se o divergente sobre a Eq. 4.37, resultando em

$$\frac{\nabla \cdot \vec{u}^{k+1} - \nabla \cdot \vec{u}^*}{\Delta t} = -c_k \nabla^2 p^{k+1}, \quad (4.38)$$

e pela conservação da massa, tem-se que

$$\nabla \cdot \vec{u}^{k+1} = 0, \quad (4.39)$$

chegando-se na equação de Poisson para a pressão

$$\nabla^2 p^{k+1} = \frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{c_k \Delta t}. \quad (4.40)$$

Conhecida a pressão, retorna-se com ela à Eq. 4.37 para a resolução da velocidade em $k + 1$, como mostrado abaixo:

$$\vec{u}^{k+1} = \vec{u}^* - c_k \Delta t \nabla p^{k+1}. \quad (4.41)$$

Por fim, aplica-se novamente o divergente sobre \vec{u}^{k+1} para verificar a condição de incompressibilidade, conforme a Eq. 4.39.

O mesmo procedimento é aplicado para a equação (4.9c), tendo que

$$G_l^k = \frac{1}{Sc_l Re} \nabla^2 c_l^k - (\vec{u}^k + u_l^s e_l^g) \cdot \nabla c_l^k \quad (4.42)$$

encontra-se a concentração em $k + 1$ por

$$\frac{c_l^{k+1} - c_l^k}{\Delta t} = a_k G_l^k + b_k G_l^{k-1}. \quad (4.43)$$

4.7 Estruturas coerentes

Toda a tridimensionalidade gerada em uma corrente de gravidade pode ser analisada através da identificação dos vórtices, feita pela definição das estruturas coerentes. Duas são as maneiras mais comuns para a identificação destas estruturas: a vorticidade e o critério- Q .

A vorticidade consiste em avaliar quanto o fluido se movimenta em torno de seus eixos. É obtida aplicando-se o rotacional sobre o campo de velocidades:

$$\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u} = \omega_{x_1} \vec{i} + \omega_{x_2} \vec{j} + \omega_{x_3} \vec{k} \quad (4.44)$$

A técnica critério- Q é assim denominada pois ela avalia o segundo invariante do tensor gradiente de velocidade $\nabla \vec{u}$ (DUBIEF; DELCAYRE, 2000), sendo um balanço entre a taxa de rotação (Ω_{ij}) e a taxa de deformação (S_{ij}) do fluido, expresso por

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij} \Omega_{ij} - S_{ij} S_{ij}), \quad (4.45)$$

onde Ω_{ij} e S_{ij} são os componentes anti-simétrico e simétrico de $\nabla \vec{u}$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.46a)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.46b)$$

Valores positivos de Q ($|\Omega| > |S|$) indicam áreas onde a rotação do fluido é maior do que a taxa de deformação, caracterizando zonas de turbilhonamento. As Figuras 15(a) e 15(b) são exemplos das duas técnicas para visualização das estruturas coerentes. Para o exemplo dado, a vorticidade se mostra mais adequada para visualizar o sentido de rotação, enquanto que o critério- Q consegue reproduzir melhor as estruturas tridimensionais.

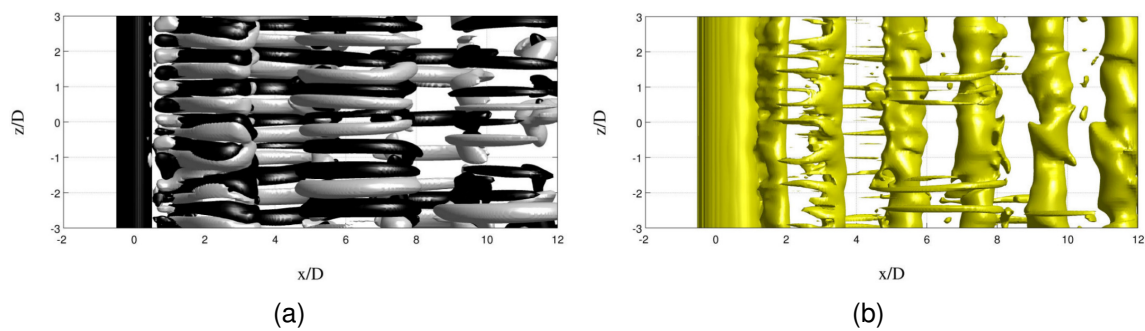


Figura 15 – Exemplo de campos instantâneos de um escoamento ao redor de um cilindro: (a) vorticidade; (b) critério- Q . Fonte: Pinto (2012).

5 RESULTADOS

5.1 Grandezas globais

Os resultados apresentados na sequência objetivam validar o código computacional *Incompact3D* para escoamentos bi-dispersos. Para tanto, utilizou-se a versão bidimensional não paralelizada do código, onde comparou-se os resultados obtidos com alguns resultados experimentais apresentados por Gladstone et al. (1998). As informações detalhadas sobre os recursos computacionais utilizados tanto nos cálculos 2D quanto no 3D, são apresentados no Apêndice C

Na Tabela 2 estão descritos os parâmetros utilizados nas simulações. São seis casos, em diferentes proporções de sua fração inicial de partículas grossas e finas, sendo que cada caso é simulado para as duas condições de contorno impostas na parede inferior até o tempo adimensional $t = 135$. As velocidades de queda foram obtidas diminuindo-se em um terço os valores encontrados pela lei de Stokes. É necessário observar que a simulação de número #6, utilizando a condição de contorno (C.C.) "I", foi realizada com $(n_1, n_2) = (2305, 257)$ devido ao fato de somente haver partículas mais grossas, as quais possuem velocidades de queda maiores. A estratégia de cálculo utilizada foi a divisão em duas partes, simulando-se com a metade do domínio até $t = 5$ e posteriormente utilizando todo o tamanho do domínio até o tempo final.

Tabela 2 – Parâmetros de simulação. C.C. refere-se à Condição de Contorno.

	$u_1^s = 0,03$	$u_2^s = 0,004$	Re	(n_1, n_2)		(L_1, L_2)	Δt
	$c_{01}(\%)$	$c_{02}(\%)$		C.C. I	C.C. II		
#1	0	100					
#2	20	80					
#3	50	50	4000	(3073, 641)	(2305, 257)	(30, 2)	$3,125 \times 10^{-4}$
#4	60	40					
#5	80	20					
#6	100	0		(2305, 257)			

5.1.1 Influência nos campos de concentração

As Figuras 16(a) e 16(b) mostram comparações das duas condições de contorno para os campos instantâneos de concentração para cada velocidade de queda, nas diferentes frações iniciais. A primeira característica que se pode notar é a influência que a proporção inicial de cada partícula exerce no quão distante a corrente de gravidade pode chegar.

É visto que as partículas com velocidade de queda pequena, em grandes proporções iniciais, fazem com que o escoamento alcance distâncias maiores, diferentemente dos casos onde há maior proporção de partículas com velocidade de queda maior, os quais percorrem menores distâncias. A explicação para isto reside no fato de que partículas mais finas permanecem em suspensão por tempos maiores antes de depositarem, justamente por terem menores velocidades de sedimentação.

A imposição de diferentes condições de contorno no fundo do domínio não resultou em significativas alterações de um cálculo em relação ao outro. O que se pode salientar é a impressão de haver maior quantidade de sedimentos em suspensão nas imagens referentes às partículas mais grossas, para a condição de contorno II.

Os perfis verticais de concentração das Figuras 17(a)–17(c) e 18(a)–18(c) mostram o comportamento das duas partículas presentes na simulação #3, para os tempos $t = 8$ e $t = 12$, em diferentes cortes verticais localizados na cabeça (Fig. 17(c) e 18(c)), em uma porção logo atrás da cabeça (Fig. 17(b) e 18(b)) e outra na região do corpo/cauda (Fig. 17(a) e 18(a)) da corrente de gravidade. A utilização de diferentes condições de contorno não trazem significativas diferenças nos perfis, exceto junto ao fundo, onde há um grande crescimento da concentração para a C.C. II, o qual fica mais evidenciado para a fração de partículas com maior velocidade de queda.

Tal aumento da concentração no fundo pode ser explicado pelo fato de não haver fluxo de partículas nesta fronteira, ocasionando um acúmulo em alguns pontos. É interessante destacar o perfil bem definido da Figura 17(c), consequência da pequena

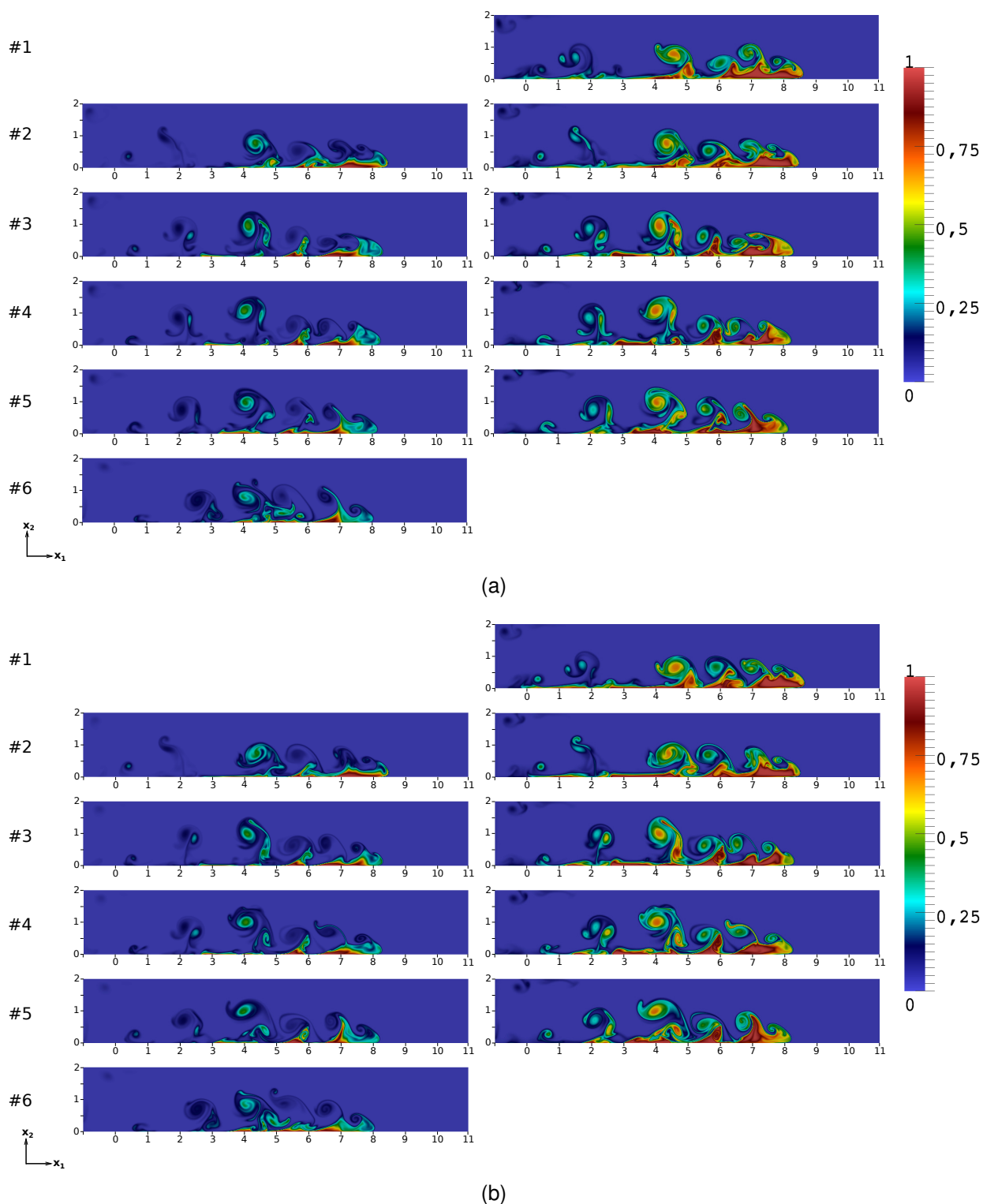


Figura 16 – Campos de concentração instantâneos para $t = 15$. Ao lado esquerdo estão as partículas com velocidade de queda $u_1^s = 0,03$ e à direita $u_2^s = 0,004$. Fig. 16(a) condição de contorno I; Fig. 16(b) condição de contorno II. Todas as imagens foram tomadas para $0 < c_l < 1$.

quantidade de material depositado e da pouca mistura com fluido ambiente, a qual já é percebida nos demais perfis juntamente com o aparecimento de vórtices. As curvas em vermelho, indicando a menor velocidade de queda, possuem valores superiores na maioria dos casos em relação às curvas em azul, sendo coerente com o fato de que partículas menores demoram mais para se depositarem.

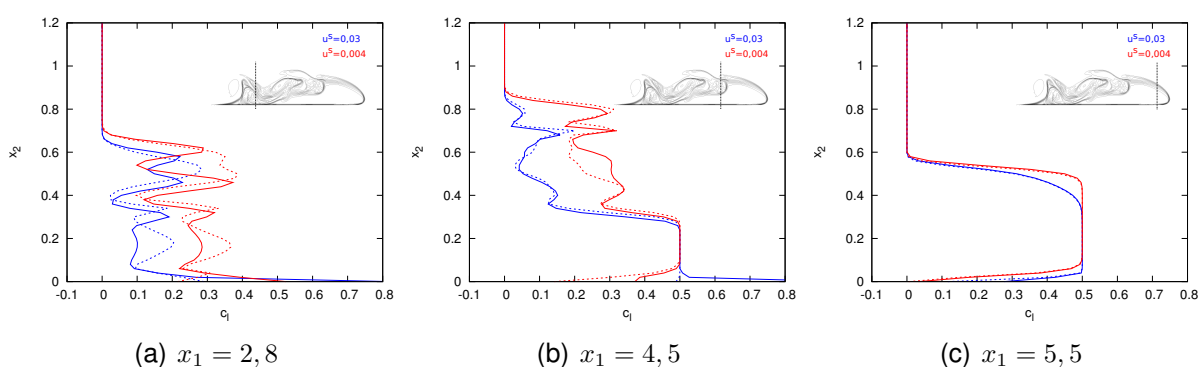


Figura 17 – Perfil vertical de concentração do caso #3 para cada velocidade de queda em $t = 8$. Linhas tracejadas representam a condição de contorno I e linhas cheias mostram o caso da condição de contorno II.

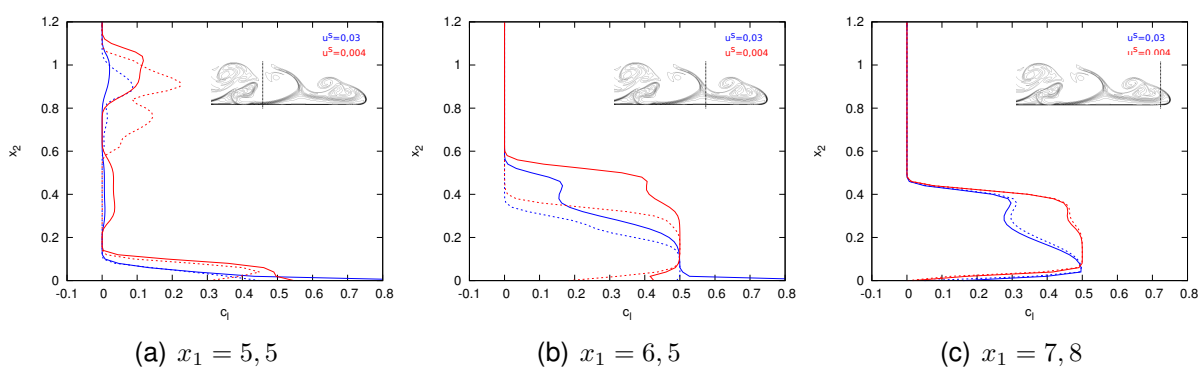
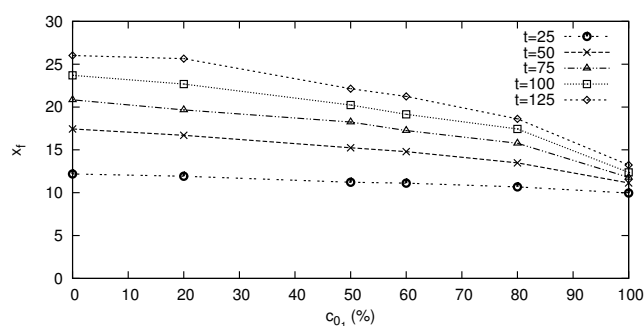


Figura 18 – Perfil vertical de concentração do caso #3 para cada velocidade de queda em $t = 12$. Linhas tracejadas representam a condição de contorno I e linhas cheias mostram o caso da condição de contorno II.

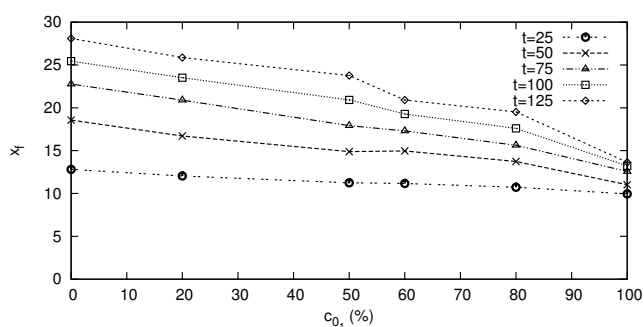
5.1.2 Evolução temporal da posição da frente da corrente

As Figuras 19(a) e 19(b) relacionam o percentual inicial de partículas mais grossas com a localização instantânea da frente da corrente para as diferentes con-

dições de contorno no fundo. Tanto numa figura quanto na outra, a simulação com 100% de partículas mais finas (#1) tem um maior deslocamento, diferentemente do caso com 100% de partículas grossas (#6) que tende a cessar seu movimento não muito tempo após seu início, justamente pela rápida sedimentação. Esta diferença na propagação não é muito acentuada para $t = 25$, tornando-se bastante relevante para os tempos posteriores. A diferença mais relevante está entre 80% e 100% de partículas grossas, mostrando que a adição de pequenas quantidades de partículas mais finas geram grandes efeitos na dinâmica do escoamento. Com relação à influência das condições de contorno, a Fig. 19(a) mostra uma tendência em diminuir seu deslocamento, contrariamente à Fig. 19(b) que está tendendo ao aumento constante na posição da frente.



(a)



(b)

Figura 19 – Posição da frente da corrente em função da fração inicial da partícula mais grossa para cinco diferentes tempos. (a) condição de contorno I; (b) condição de contorno II.

As mudanças nas velocidades da frente da corrente ficam mais evidentes através

das Figuras 20(a) a 20(f), onde são mostradas as comparações entre as condições de contorno e o trabalho de Gladstone et al. (1998). A análise da posição da frente da corrente consiste em encontrar o primeiro ponto, a partir do final do domínio ($x_1 = L_1$), onde o gradiente de concentração de cada partícula não seja zero. Em todos os casos, a velocidade permanece igual e constante, independentemente da fração inicial ou da condição de contorno, até o tempo $t \approx 10$ (Figuras 21(a) e 21(b)).

A propagação em velocidade constante é um comportamento típico de correntes de gravidade que não possuem sedimentos em suspensão ($u^s = 0$) (SHIN et al., 2004), demonstrando que, nos estágios iniciais, a velocidade do escoamento não depende da proporção inicial de partículas mais finas e mais grossas. Espath et al. (2013) sugere que o número de Reynolds tenha influência na velocidade da frente da corrente nos instantes que antecedem $t \approx 10$. Após isto, todas as linhas começam a decrescer, indicando diminuição na velocidade, justamente pela perda de massa suspensa ocasionada pelo início do processo de sedimentação. Neste estágio percebe-se a forte influência que a fração inicial de cada partícula exerce sobre a evolução do escoamento à medida que as curvas divergem umas das outras.

As curvas em azul, representando o trabalho experimental de Gladstone et al. (1998), afastam-se das curvas referentes às simulações numéricas devido ao fato de que, no caso experimental, o número de Reynolds é calculado em aproximadamente $Re = 24.700$, e por haver a hipótese da resuspensão do material já depositado, fato que não é considerado nos casos deste trabalho. Já a comparação entre os casos simulados não mostra diferença significativa na evolução da frente.

O caso #1 apresenta a maior diferença para as condições de contorno, onde a utilização da condição II começa a desviar-se de I em $t \approx 20$, alcançando a posição da frente $x_f \approx 29$ contra $x_f \approx 27$ de I. Os casos #3 e #5 apresentam uma queda na velocidade com a condição I nos tempos $t \approx 80$ e $t \approx 95$, respectivamente. Interessantemente a curva para a condição de contorno I, no caso #4, tem um aumento na velocidade após $t \approx 120$, contrariando a tendência dos demais casos que mostram

a frente da corrente atingir distâncias maiores quando na C.C. II. As oscilações em #6, onde tem-se apenas partículas mais grossas, podem acontecer porque o caso bi-dimensional depende de apenas um ponto para determinar sua posição, diferentemente do caso 3D que utiliza a média dos valores na direção do eixo x_3 .

5.1.3 Evolução temporal da taxa de sedimentação e massa suspensa

A avaliação da massa de partículas em suspensão no escoamento é feita integrando-se as concentrações das diferentes partículas presentes em todo o domínio, conforme mostrado a seguir

$$m_{pi}(t) = \int_V c_i dV, \quad (5.1)$$

e os resultados para todas as simulações estão apresentados nas Figuras 22(a) até 22(f).

O primeiro aspecto que pode ser destacado reside na diferença entre as duas condições de contorno. Ao utilizar a C.C. II, onde não há fluxo de massa, a quantidade de material em suspensão sempre apresenta maiores valores quando as partículas possuem menor velocidade de queda (vermelho). Semelhante comportamento não é observado para a outra velocidade de queda (em azul), a qual possui muito boa concordância entre as condições de contorno.

Traçando um paralelo com a evolução da frente da corrente, temos que após o regime de velocidade constante, em $t \approx 12$, cerca de 50% da massa inicial de partículas mais grossas já depositaram-se enquanto que, para $u_2^s = 0,004$, permanecem em suspensão mais de 90% das partículas para ambas as condições de contorno. Isto mostra, mais uma vez, o importante papel que as partículas mais finas desempenham no deslocamento da corrente naqueles casos em que há uma composição dos dois tipos de partículas.

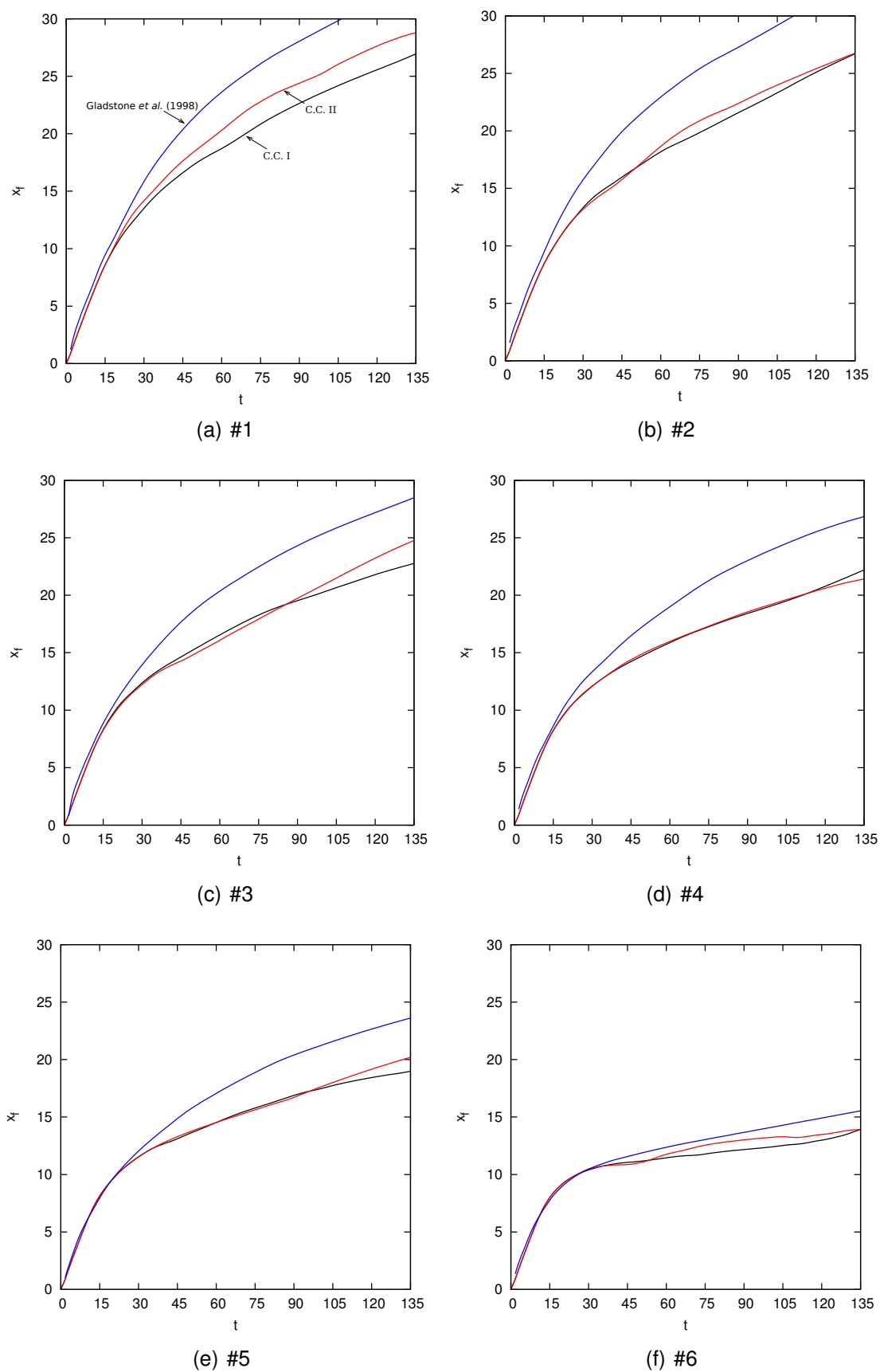


Figura 20 – Evolução temporal da frente da corrente. Preto representa a C.C. I, vermelho C.C. II e azul os resultados experimentais de Gladstone et al. (1998).

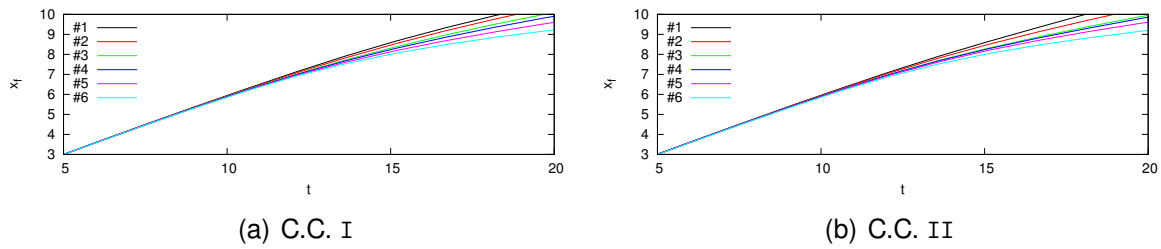


Figura 21 – Detalhe da posição da frente onde acontece a divergência entre as curvas para as duas condições de contorno impostas no fundo.

As Figuras 23(a) e 23(b) apresentam as curvas para o histórico temporal da taxa de sedimentação calculado como

$$\dot{m}_{si}(t) = \frac{1}{L_1 L_3} \int_0^{L_1} \int_0^{L_3} c_{wi}(x_1, x_3, t) u_i^s dx_3 dx_1, \tag{5.2}$$

onde c_{wi} se refere à concentração de cada partícula no fundo do domínio ($x_2 = 0$). Para ambas as partículas as curvas crescem, aparentemente, com a mesma inclinação até um ponto máximo em $t \approx 15$. Após este tempo, a taxa de sedimentação das partículas maiores cai drasticamente indicando sua rápida sedimentação, justamente o que é relatado pela massa suspensa. Com respeito às partículas mais finas, após atingir o pico, o decréscimo ocorre suavemente de maneira semelhante ao estágio de crescimento. O valor pico de cada simulação é fortemente dependente da composição inicial das partículas e da condição de contorno considerada. Utilizando a C.C. II, todos os valores são super estimados em relação à C.C. I.

O depósito das partículas produz uma camada não uniforme de sedimentos no fundo do domínio. Para estabelecer comparações com o trabalho experimental de Gladstone et al. (1998), o cálculo é feito pela integração no tempo do fluxo de partículas através da fronteira inferior do domínio, conforme apresentado por Nasr-Azadani et al. (2013)

$$D_t(x_1, t) = C_r \sum_{l=0}^N \left[\int_0^t c_{wi}(x_1, \tau) u_i^s d\tau \right], \tag{5.3}$$

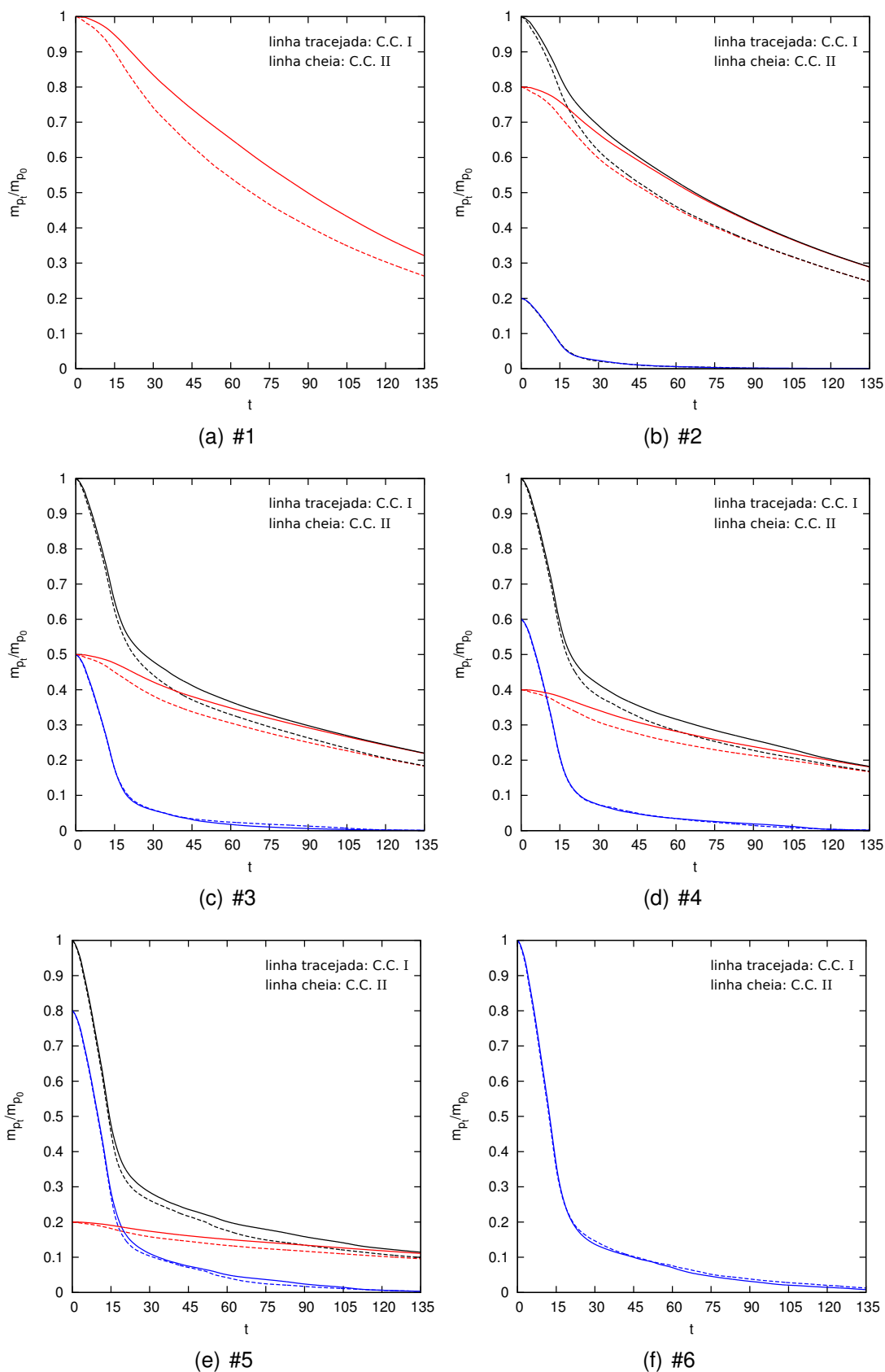


Figura 22 – Comparação do efeito das condições de contorno na massa suspensa. Valores normalizados com suas respectivas massas suspensas iniciais m_{p_0} . Azul são as partículas com $u_1^s = 0,03$; vermelho $u_2^s = 0,004$ e em preto a massa suspensa total.

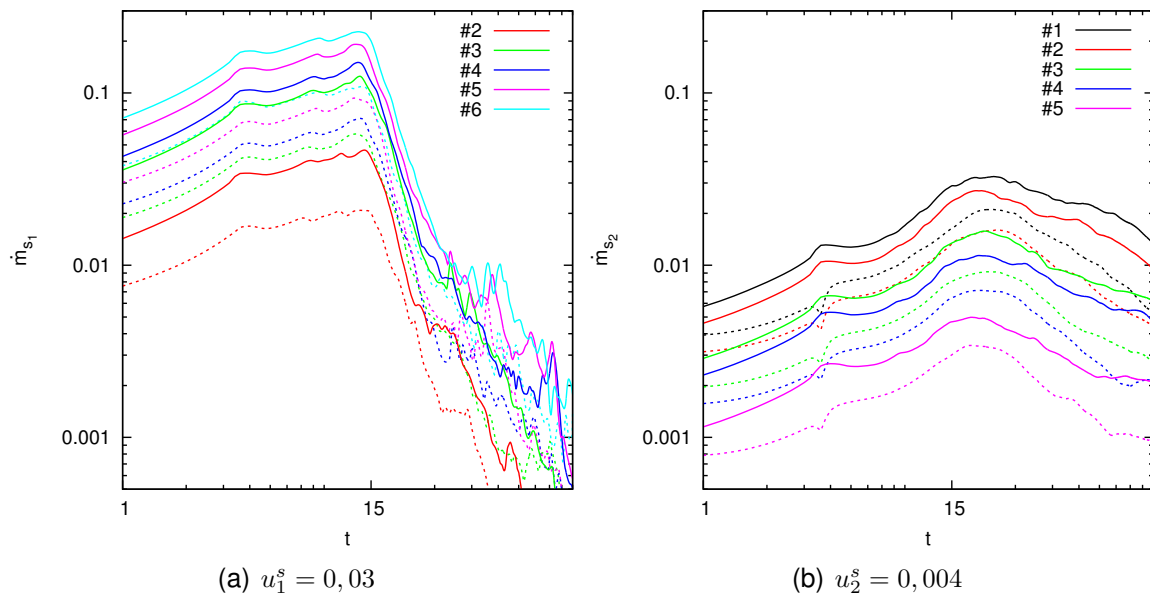


Figura 23 – Taxa de sedimentação em escala logarítmica para a partícula mais grossa e para a mais fina, avaliadas nas duas condições de contorno. Linhas tracejadas referem-se à C.C. I e linhas cheias à C.C. II.

sendo que o resultado é normalizado com o depósito no tempo final ($t = 135$). As Figuras 24(a) a 24(f) mostram as comparações para os diferentes casos, onde o perfil resultante representa uma camada de sedimentos em que as porosidades existentes em uma situação real não são consideradas.

Em ambas condições de contorno encontra-se uma boa concordância entre um resultado e outro e, da mesma forma, entre estes resultados e os dados experimentais. Nos cinco primeiros casos, o resultado experimental sempre alcança valores maiores ao final do domínio, o que talvez aconteça pela limitação do tempo de cálculo imposta pelo custo de simulação, diferente de um experimento que pode adotar tempos diferentes para cada caso, uma vez que é permitido à corrente desenvolver-se até que todo o material suspenso deposite-se. Outra possibilidade é a ocorrência da ressuspensão do material já depositado, que acaba sendo transportado pelo escoamento para locais mais distantes.

Nas Figuras 24(e) e 24(f), onde há maior quantidade de partículas grossas, são evidenciadas diferenças importantes na região de aprisionamento da mistura

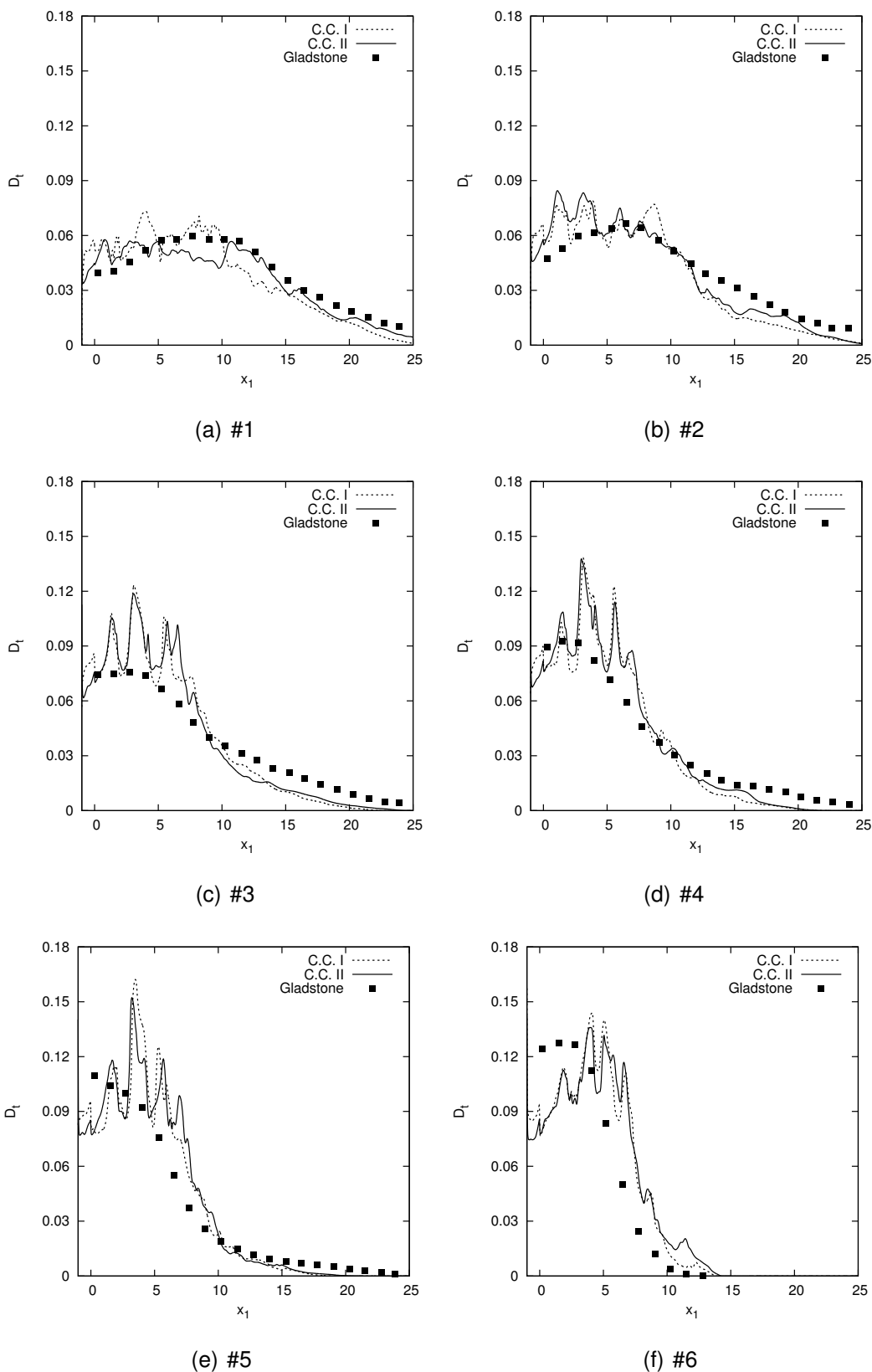


Figura 24 – Perfil de depósito em $t = 135$. Comparação entre as condições de contorno e dados experimentais.

fluido/partícula. No caso experimental, há a hipótese de que as partículas não estejam em uma mistura perfeitamente homogênea e que o mecanismo de agitação gere turbulência antes da liberação da mistura, o que pode dar início ao processo de sedimentação de forma precoce. Todas estas variáveis são eliminadas no estudo numérico, pois é possível garantir a homogeneidade da mistura.

5.1.4 Tensões geradas pela corrente

Devido à condição de não deslizamento em $x_2 = 0$, onde as velocidades do escoamento são nulas ($u_i = 0$), os gradientes de velocidades resultantes nas direções x_1 e x_3 (este último, somente para casos 3D) geram tensões cisalhantes na parede inferior. A avaliação destas tensões é feita calculando-se a velocidade de atrito do escoamento (u_τ), dada pela expressão

$$u_\tau = \frac{\tilde{u}_\tau}{\tilde{u}_b} = \sqrt{\frac{1}{Re} \sqrt{\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right)^2}}. \quad (5.4)$$

As Figuras 25(a) até 25(f) apresentam a evolução espaço-temporal de três casos. A curva que faz limite com o azul contínuo representa o deslocamento da corrente, podendo ser uma outra abordagem para avaliar a posição da frente, ressaltando que não necessariamente esta abordagem deve coincidir com àquela já mostrada para o deslocamento da frente da corrente. Nota-se que as principais tensões cisalhantes acontecem logo após o início do movimento, quando a corrente está passando pelo canto inferior esquerdo do domínio, sendo que sua intensidade logo cai à medida que a corrente vai se estendendo. A partir deste estágio do escoamento, em $t \approx 10$, as tensões estão mais distribuídas e os valores mais importantes, em geral, acompanham a cabeça da corrente de gravidade. Ressalta-se que a condição de contorno II faz com que maiores tensões atinjam distâncias superiores.

A determinação de u_τ desempenha papel importante na determinação dos parâmetros necessários para o estudo da ressuspensão das partículas já depositadas. Porém, como uma das premissas deste trabalho é assumir que não haja ressuspensão, os resultados obtidos para a velocidade de atrito não terão maiores desdobramentos.

5.2 Balanço de energias bidimensional

O balanço completo de energias consiste em conhecer como cada termo evolui ao longo do tempo e como as perdas dissipativas impactam a conversão da energia potencial em energia cinética. As comparações serão feitas entre as seis combinações de partículas consideradas, simuladas para as duas condições de contorno da parede inferior. Os resultados estão apresentados nas Figuras 26 e 27.

Primeiramente o que se nota é uma importante variação na conservação da energia (E_t) da C.C I para a C.C II. Quando é utilizada a condição de fluxo de concentração no fundo, somente no caso em que a corrente é composta por 100% de partículas mais grossas (Figura 27(e)), é que temos a conservação da energia total em 1, mesmo possuindo menor número de pontos na vertical (n_2). Por outro lado, com a C.C II vemos que a conservação de energia é respeitada a partir do momento em que se tem, no mínimo, a mesma concentração inicial de partículas finas e grossas (Figura 26(f)). Esta constatação levou à necessidade de um teste *a posteriori*, no qual sugeriu-se um aumento do número de pontos verticais (n_2) quando a fração inicial de partículas mais finas fosse superior à de partículas mais grossas. Pelo fato de não requerer um refinamento da malha de cálculo tão grande, conduziu-se o teste utilizando a C.C. II e, como a intenção era verificar o comportamento das partículas finas quando em maioria, reproduziu-se o caso #1 onde há 100% de partículas com $u_2^s = 0,004$. Para a nova simulação foi tomado $n_2 = 385$, mantendo todos os demais parâmetros iguais aos apresentados na Tabela 2.

Na Figura 26(b) podemos ver, na cor verde, o novo balanço com um refinamento maior na direção x_2 . Nenhum dos componentes sofrem significativas alterações mas, ao acompanharmos a curva para E_t , temos uma rápida e boa convergência para o valor 1, demonstrando a conservação da energia total inicial. A partir disto, presume-se que as partículas finas não apresentam uma “barreira” para a turbulência, o que ocasiona intenso movimento no campo de concentração, e a consequente necessidade de malhas mais refinadas para poder resolver estas escalas.

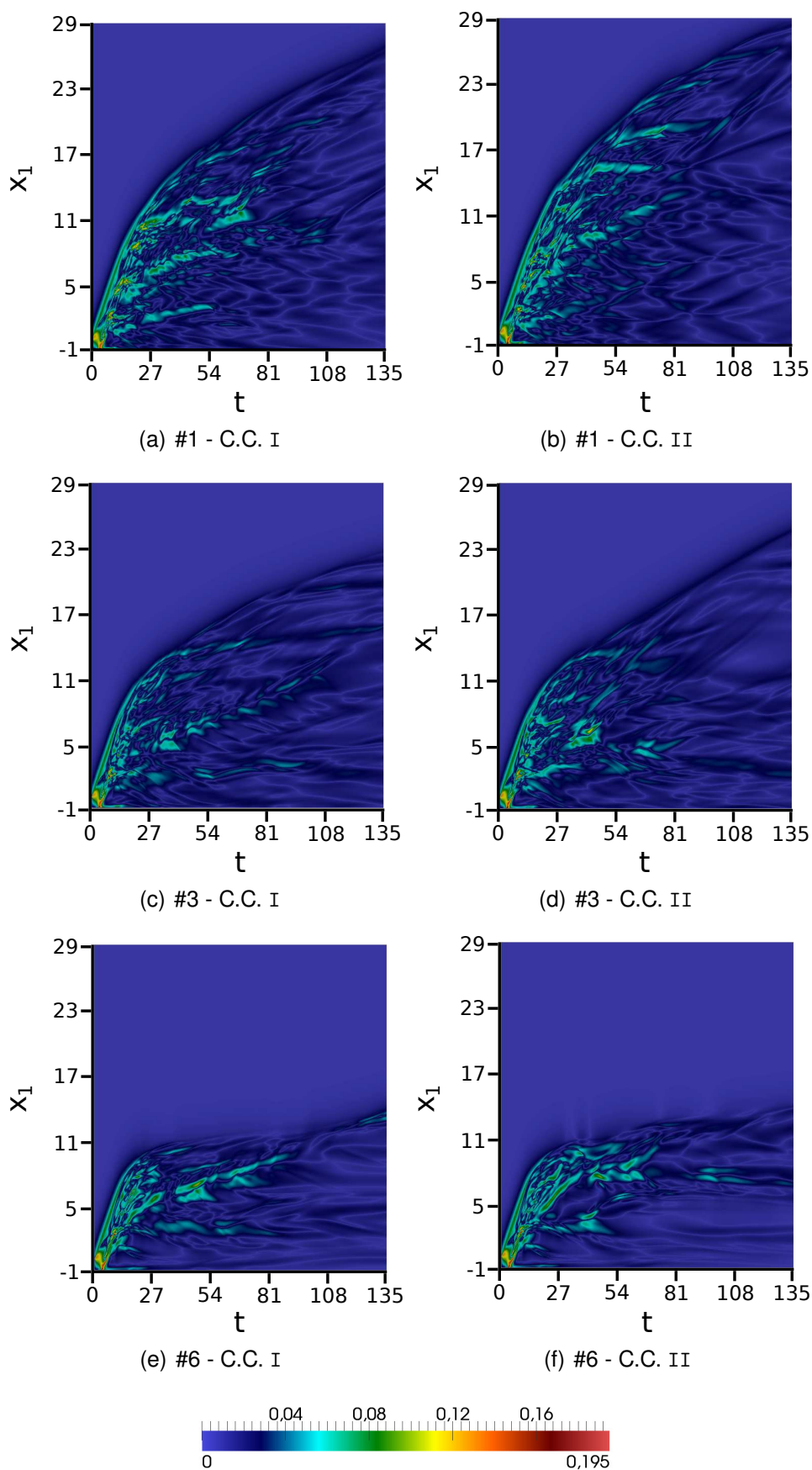


Figura 25 – Evolução espaço-temporal da velocidade de atrito gerada pela corrente junto ao fundo do domínio. Todas as figuras foram re-escaladas para um valor médio entre elas.

Analisando os casos com a C.C. I, vemos que a conservação é alcançada somente quando a micro dissipação (E_s) de uma das partículas, que no caso é a mais grossa, atinge valores maiores do que a macro dissipação (E_d) ao final da simulação (Figura 27(e)). Por outro lado, se analisarmos os casos com a C.C. II observamos que a conservação da energia chega no valor 1 a partir do momento em que a micro dissipação relacionada com a partícula maior (E_{s_1}) se sobrepõe à perda dissipativa da outra partícula (E_{s_2}) (Figura 26(f)).

Com respeito ao termo da energia potencial (E_{p_i}), em $t = 0$ temos o valor máximo para cada partícula, sendo igual à sua fração inicial. Assim que a mistura é liberada acontece um abrupta queda de E_p , variando entre 60% e 65% em relação ao valor inicial, até $t \approx 3$. Na sequência, após $t \approx 3$, o comportamento das curvas de energia potencial de cada partícula evolui de maneira distinta. As curvas representando as energias potenciais das partículas mais grossas (E_{p_1}), nos casos #3, #4, #5 e #6, em embas as condições de contorno, sofrem uma segunda queda entre $t \approx 3$ e $t \approx 10$, não tão abrupta quanto a primeira, mas que é responsável pela redução de mais ou menos 50% da sua energia potencial ainda restante. Pela lenta sedimentação das partículas mais finas, sua energia potencial (E_{p_2}) decai suavemente em oposição à E_{p_1} que tende muito mais rapidamente para zero, justamente por ter uma taxa de sedimentação superior.

Esta rápida queda em E_p reflete-se de maneira imediata no crescimento da energia cinética do escoamento (k) até o valor pico de aproximadamente 55% para todos os casos, em $t \approx 3$, comprovando o princípio de que uma corrente de gravidade acontece pela conversão de energia potencial em energia cinética. Na sequência, k começa a decair significativamente pela forte influência das perdas dissipativas macroscópicas (E_d) e microscópicas (E_{s_i}).

A fração inicial de cada partícula possui papel importante no desenvolvimento de E_d e E_{s_i} , onde podemos notar que em escoamentos com, no máximo, 50% de partículas mais grossas (casos #1, #2 e #3), as perdas devido ao movimento convec-

tivo são predominantes sobre àquelas devido à sedimentação das partículas. A micro dissipação relacionada à partícula mais grossa (E_{s_1}) aumenta rapidamente até $t \approx 15$, acompanhando a queda brusca da massa suspensa que termina, aproximadamente, no mesmo tempo adimensional, e segue crescendo com tendência a um valor constante, o qual representaria a total sedimentação desta fração de partículas. O termo dissipativo que diz respeito às partículas finas (E_{s_2}) mantém um crescimento quase linear desde o início.

Os valores finais de E_d e E_{s_1} indicam quanto da energia inicial do escoamento foi dissipada pelo movimento do fluido e quanto foi dissipada pela sedimentação das partículas. As dissipações totais, ao final das simulações, estão apresentadas na Tabela 3. A comparação entre as condições de contorno não mostra grandes diferenças entre elas, sendo que a C.C. II é sempre estimada com valores maiores, exceto para o caso #6, em que a C.C. I tem ligeira vantagem. Esta diferença sugere que a superioridade da C.C. II é devida à maior quantidade de partículas mantidas em suspensão. O caso em exceção também pode ser explicado desta forma pois, se olharmos atentamente para a Figura 22(f), ao final tem-se maior quantidade de material suspenso quando é imposta a C.C. I. Quanto ao teste feito *a posteriori*, a dissipação total calculada é de $\approx 85,3\%$, levando a uma diferença de $1,14\%$, o que é menor do que a diferença mostrada na Tabela 3

É importante destacar que a adição de pequenas quantidades de partículas grossas traz maior impacto à E_d do que se for adicionada a mesma quantidade de partículas mais finas. A diferença na macro dissipação entre os casos #1 e #2, onde há adição de 20% de partículas grossas, é mais do que o dobro da diferença entre os casos #6 e #5, onde as partículas finas é que são adicionadas na proporção de 20% .

Tabela 3 – Dissipações totais em $t = 135$. Somas da macro (E_d) e das micro (E_{s_i}) dissipações finais para cada caso.

	Dissipação total		Diferença
	C.C. I	C.C. II	
#1	84,3%	85,9%	1,9%
#2	83,5%	85,4%	2,2%
#3	84,5%	85,7%	1,5%
#4	85,5%	86,8%	1,6%
#5	88,4%	90,5%	2,4%
#6	96,5%	96,1%	-0,35%

Tabela 4 – Parametros de simulação para a comparação 2D/3D.

Re	$c_{O_2}(\%)/c_{O_2}(\%)$	u_1^s	u_2^s	(n_1, n_2, n_3)	(L_1, L_2, L_3)	Δt
4000	50/50	0,047	0,006	2D	(1441, 641)	(28, 2)
				3D	(1441, 641, 101)	(28, 2, 1)

5.3 Resultados para a configuração tridimensional

Nesta etapa da análise dos resultados será estabelecida uma comparação entre simulações 2D e 3D com as mesmas configurações, considerando $t = 60$ como tempo total de cálculo. As simulações foram feitas com a estratégia de divisão em três partes. O objetivo é entender como as estruturas tridimensionais afetam a dinâmica do escoamento. Aqui, a determinação das velocidades de sedimentação é feita diretamente pela relação dada pela Lei de Stokes, onde assume-se que as partículas de sedimentos tenham a forma esférica. Tal suposição retorna velocidades de sedimentação com valores maiores, o que permite diminuir um pouco o custo da simulação visto que são necessários menos pontos na malha de cálculo. Os parâmetros globais das simulações estão apresentados na Tabela 4.

Antes de apresentar os resultados quantitativos, serão mostradas algumas visualizações instantâneas onde é possível observar as estruturas turbulentas presentes no caso 3D. Na Figura 28 estão mostrados iso-valores para o campo de concentrações. Nos primeiros tempos adimensionais, após a liberação da mistura fluido/partícula, a corrente permanece bidimensional, sendo que a transição para o movimento tridimensional ocorre gradativamente conforme a evolução da corrente. Espath et al. (2013) relaciona

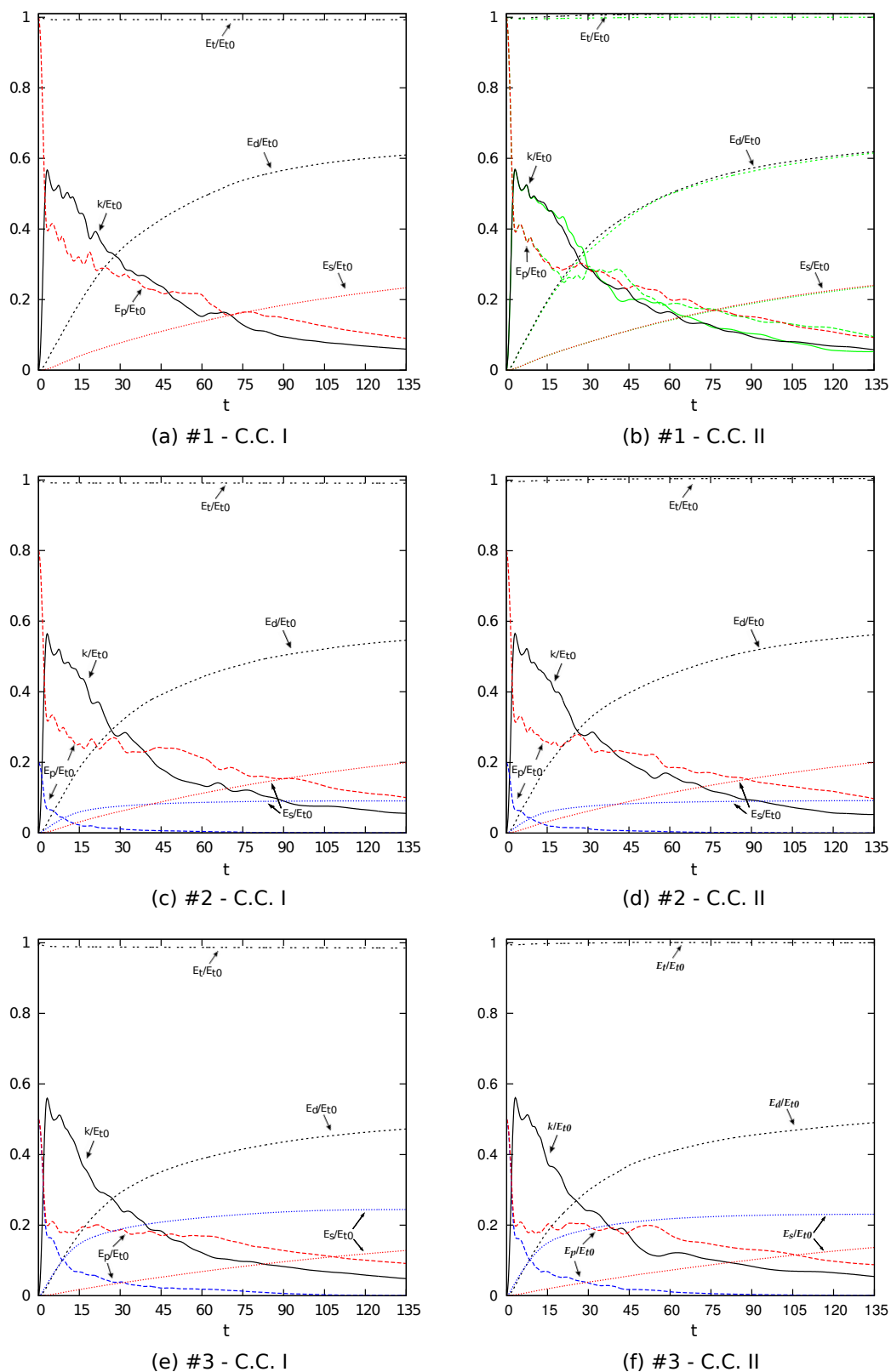


Figura 26 – Balanço de energias para os casos #1, #2 e #3 comparando as duas condições de contorno. Em (b) as linhas em verde correspondem ao teste com $n_2 = 385$.

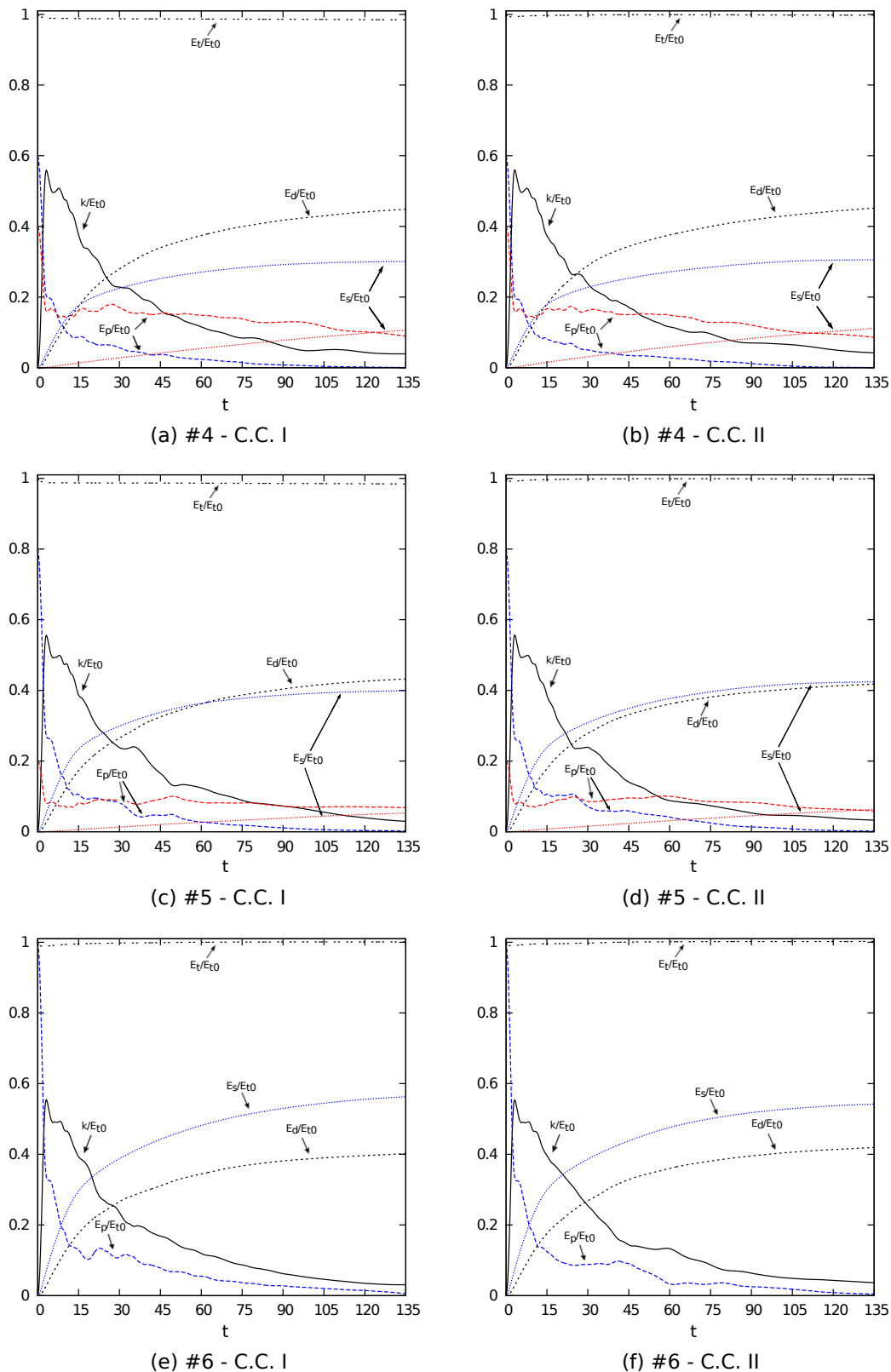


Figura 27 – Continuação da Figura 26. Balanço de energias para os casos #4, #5 e #6 comparando as duas condições de contorno.

este comportamento inicial bidimensional com o fato de a energia cinética ser nula em $t = 0$. Observando os iso-contornos em $t = 8$, onde o movimento já desenvolve-se tridimensionalmente, é possível identificar as estruturas de lobos e fendas se formando junto ao fundo, na posição frontal da corrente.

Na parte anterior da cabeça, no segmento chamado de corpo da corrente, se vê o desenvolvimento de intensa turbulência e a formação de vórtices na direção do eixo x_3 , já referidos como Kelvin-Helmholtz. Esta zona é um indicativo de onde ocorre a entrada e a mistura do fluido ambiente com a corrente (*entrainment*). No tempo $t = 12$ as estruturas turbulentas estão muito mais presentes quando nos referimos às partículas mais finas, justamente porque elas demoram mais para se depositar.

As estruturas vorticais e a intensa turbulência tridimensional podem ser melhor representadas através do critério- Q para a captura de regiões com grande concentração de vórtices. Olhando para a Figura 29, o critério- Q revela um emaranhado de vórtices em todas as direções, formando estruturas tipo “minhocas” (DUBIEF; DELCAYRE, 2000), conforme detalhe em $t = 16$. Interessantemente se formam, na cabeça e junto ao solo, conjuntos de estruturas arranjadas em dois pares de vórtices contra rotativos, indicados no detalhe para $t = 4$, onde a cor vermelha indica valores positivos e a azul valores negativos.

Quando o escoamento torna-se tridimensional, são geradas, no fundo, tensões cisalhantes não uniformes, representadas pela Figura 30 na forma da velocidade de atrito (u_τ). Em $t = 4$ é possível ver uma região de transição entre o escoamento bidimensional e o surgimento de estruturas tridimensionais, que no caso são as de lobos e fendas, nitidamente presentes. Conforme a turbulência aumenta, as zonas de velocidade de atrito aparecem de forma mais dispersa ($t = 8$ e $t = 16$) e com menor intensidade. A avaliação de u_τ também mostra como as estruturas de lobos e fendas vão se dissipando conforme a corrente vai avançando.

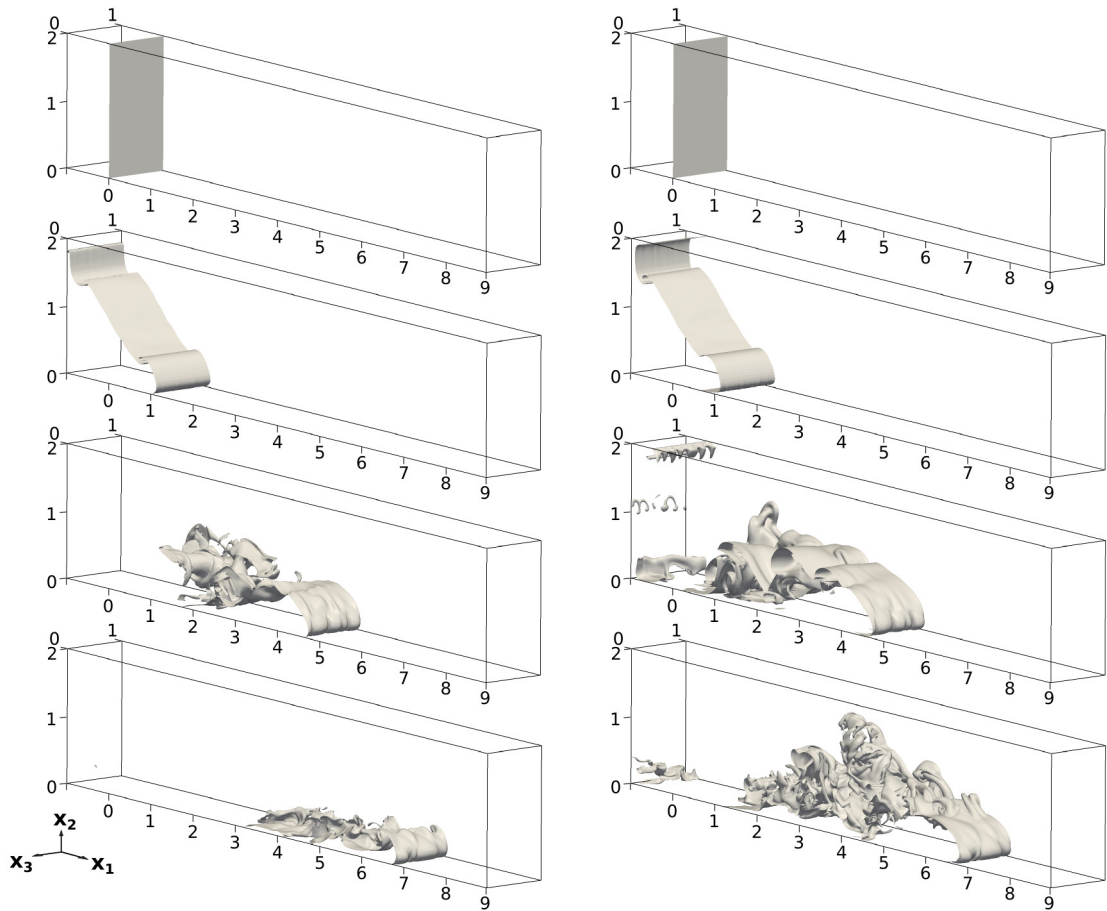


Figura 28 – Iso-superfícies de concentração para $c_l = 0,25$. Ao lado esquerdo temos $u_1^s = 0,047$ e ao lado direito $u_2^s = 0,006$. De cima para baixo: $t = 0; 2; 8; 12$.

5.3.1 Comparação 3D X 2D

Comparando imagens instantâneas dos campos de concentrações das simulações 2D e 3D em um tempo adimensional $t = 14$, representados pela Figura 31, é visível a diferença no que diz respeito às estruturas turbulentas. As principais discrepâncias estão relacionadas com a formação dos vórtices que, em 3D, quase não são percebidas, contrariamente às formas bem definidas do caso 2D. Isto é consequência da presença da terceira dimensão, que possibilita o movimento do fluido em mais direções. Os grandes vórtices do cálculo bidimensional atuam como mecanismos de

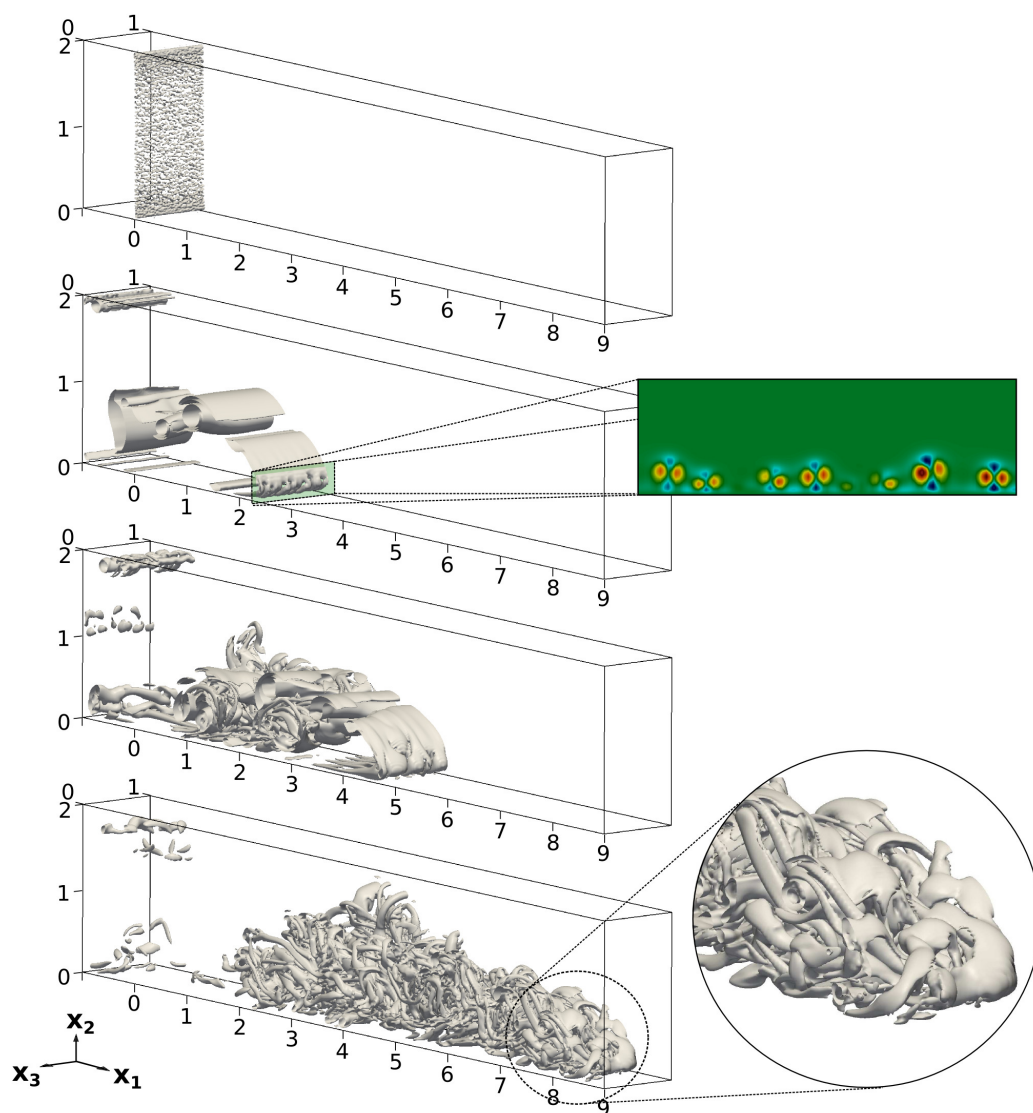


Figura 29 – Critério- Q em iso-superfícies tomadas para $Q = 1$. Detalhes mostram os vórtices longitudinais que se formam no fundo e a aglomeração de vórtices. De cima para baixo: $t = 0, 2; 4; 8; 16$.

aprisionamento de partículas, o que pode ser inferido pelos significativos níveis de concentração presentes nos vórtices das figuras 2D em comparação com as 3D que, por sua vez, acumulam a concentração junto ao fundo do domínio, justamente por não possuir os referidos grandes vórtices capazes de manter as partículas em suspensão.

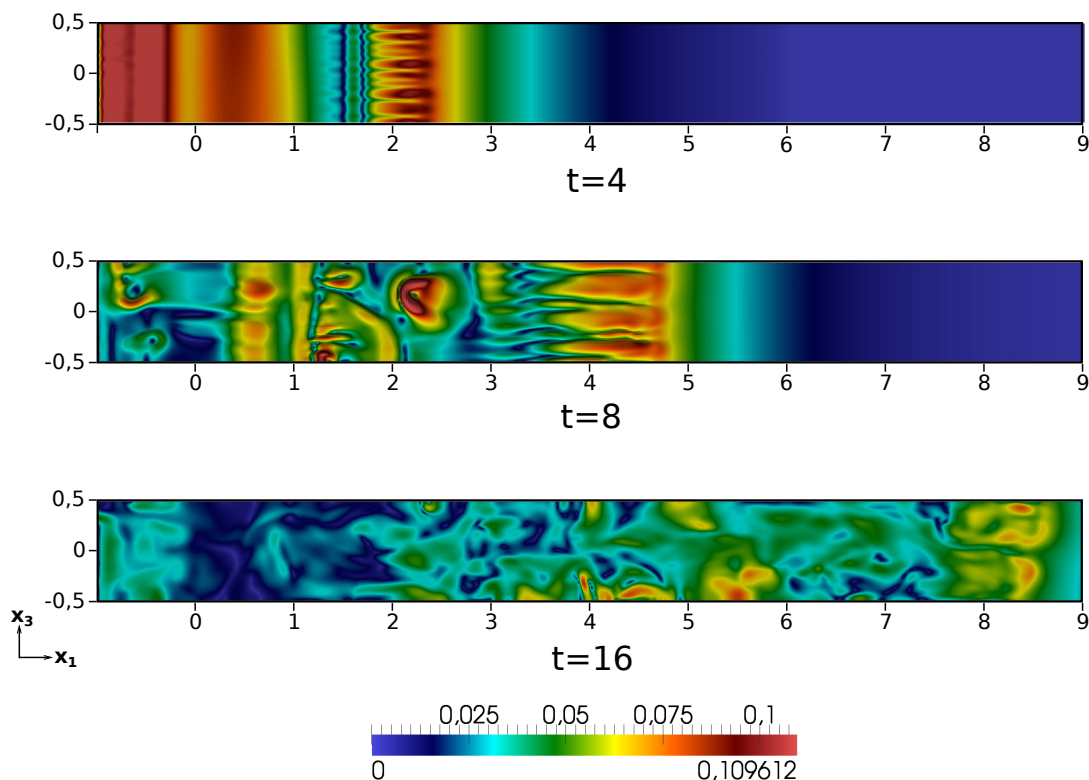


Figura 30 – Velocidade de atrito junto ao fundo do domínio ($x_2 = 0$).

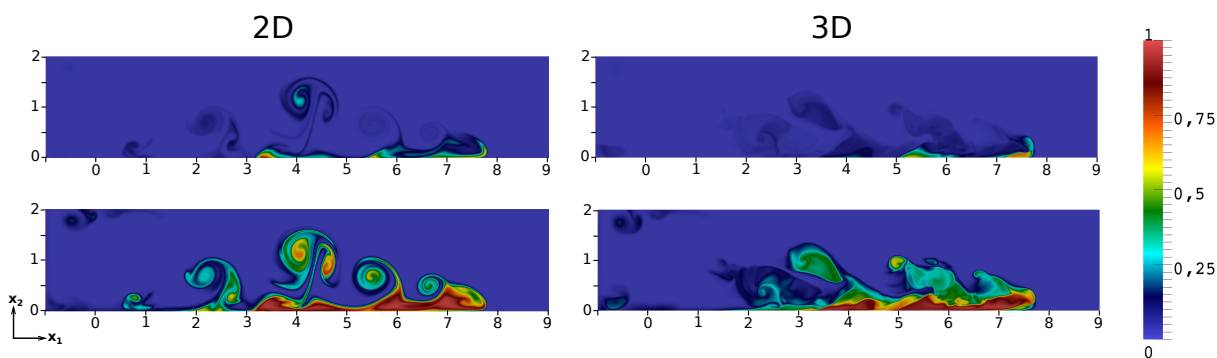


Figura 31 – Campos instantâneos de concentração para os casos 2D e 3D em $t = 14$ tomadas em um plano médio ($x_3 = 0$) e $0 < c_i < 1$.

A maior quantidade de partículas em suspensão, apresentada pelo caso bidimensional, pode ser constatada pela avaliação da massa suspensa (Figura 32). Podemos ver que, ao final das simulações, o valor total de material em suspensão para o caso 3D fica por volta de 18%, enquanto que para o 2D temos aproximadamente 26%, representando uma diferença de cerca de 30% entre os casos, confirmando o pressuposto de que a tridimensionalidade torna mais rápido o processo de sedimentação.

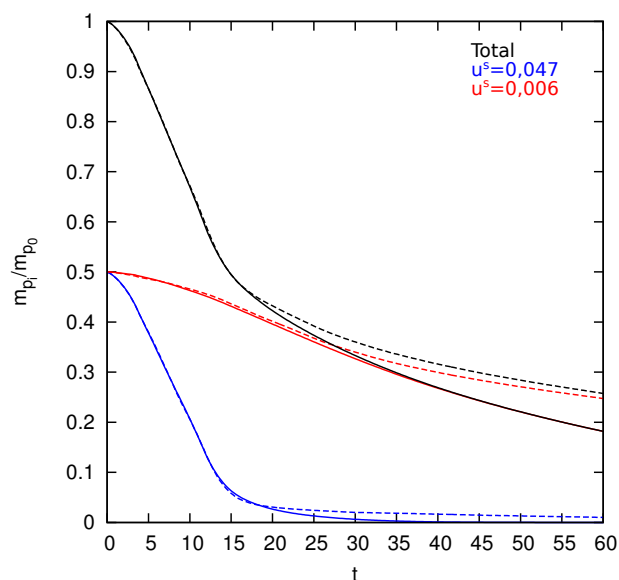


Figura 32 – Evolução temporal das partículas em suspensão. Linhas cheias referem-se à simulação 3D e linhas tracejadas à simulação 2D.

Como anteriormente visto, o processo de sedimentação das partículas afeta o deslocamento da corrente de gravidade (Figura 33). Durante os estágios iniciais, até $t \approx 10$, a velocidade se mantém constante também para o caso 3D, igualmente ao que foi constatado para os casos 2D anteriores. Aqui, vemos que as duas simulações transcorrem iguais até $t \approx 15$, quando elas começam a se afastar, alcançando, ao final, $x_f \approx 18,5$ e $x_f \approx 15$ para 3D e 2D, respectivamente. Mesmo tendo mais massa em suspensão, isto não é suficiente para que o caso bidimensional alcance maiores distâncias, sugerindo que a turbulência tridimensional consegue transportar mais rapidamente as partículas em comparação aos grandes vórtices que aprisionam concentração, mostrados da Figura 31.

As curvas dos perfis finais do depósito (Figura 34) foram calculadas levando-se em conta a expressão apresentada por Necker et al. (2002), a fim de ser evitada a determinação de parâmetros dimensionais necessários para calcular C_r . Sendo assim,

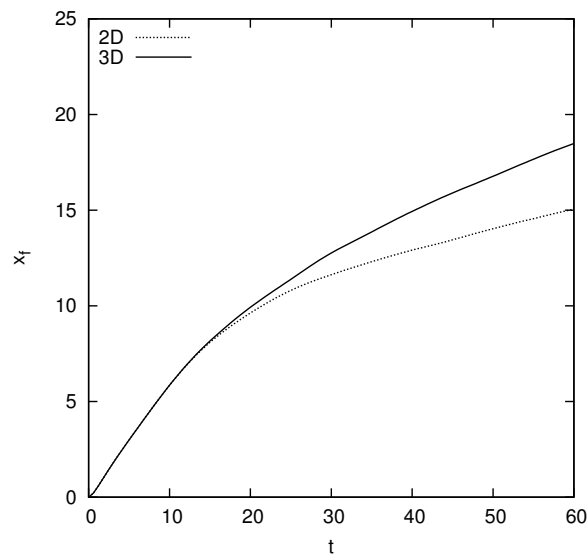


Figura 33 – Variação da posição da frente da corrente com o tempo.

temos que

$$D_t(x_1, t) = \frac{1}{L_1 L_3} \sum_{l=0}^N \left[\int_0^t \langle c_{w_l}(x_1, \tau) \rangle_{x_3} u_l^s d\tau \right], \quad (5.5)$$

onde $\langle . \rangle_{x_3}$ mostra que o valor obtido deve ser uma média dos valores na direção x_3 , somente para o caso tridimensional. O grande pico que a curva para 2D apresenta possivelmente seja reflexo de não haver um valor médio de concentração em cada tempo, o que suavizaria o resultado (vide resultado 3D). A maior distância percorrida para o caso 3D propicia que as partículas alcancem, também, maiores distâncias, perfeitamente em concordância com a curva de depósito. Estabelecendo uma comparação qualitativa e levando-se em conta a diferença entre as velocidades de sedimentação e o tempo final, o resultado experimental apresentado na Figura 24(c) teria uma boa aproximação com o resultado 3D, pois mostra um perfil mais suave e que atinge valores superiores aos das simulações em 2D.

Nesta etapa da discussão será apresentado o balanço completo de energias para a simulação tridimensional em comparação com a bidimensional. Olhando para a Figura 35, até $t \approx 8$, os dois resultados refletem uma razoável semelhança, diferente-

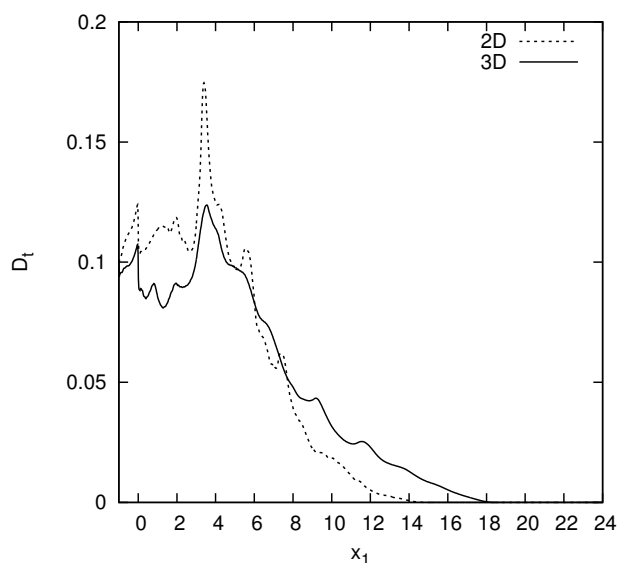


Figura 34 – Perfil da camada de sedimentos ao final das simulações 2D e 3D.

mente do que acontece nos tempos subsequentes onde as diferenças mais importantes aparecem. O que mais chama a atenção é o significativo aumento da dissipação devido ao movimento convectivo (E_d) do escoamento em 35(b), chegando a ser responsável por mais de 55% de toda a dissipação da corrente e sendo 45% maior do que o valor final encontrado para o caso 2D. Isto é plausível tendo em vista que a corrente movimenta-se muito mais no espaço do que no plano.

Analisando as energias potenciais (E_p), fica refletido o que foi encontrado na Figura 32, pois a menor quantidade de massa suspensa, em 3D, traduz-se em menores valores de E_p , onde seu valor é aproximadamente 5,5% contra $\approx 14\%$ para 2D, avaliando somente a partícula mais fina. Já as partículas mais grossas não possuem significantes diferenças porque seus valores são praticamente nulos ao final das simulações. As micro dissipações (E_s), atribuídas ao escoamento ao redor de cada partícula, assumem basicamente o mesmo comportamento, salientando-se o fato de que, para 3D, a curva indicativa da partícula maior permanece constante a partir do tempo $t \approx 28$ correspondendo à total sedimentação da mesma.

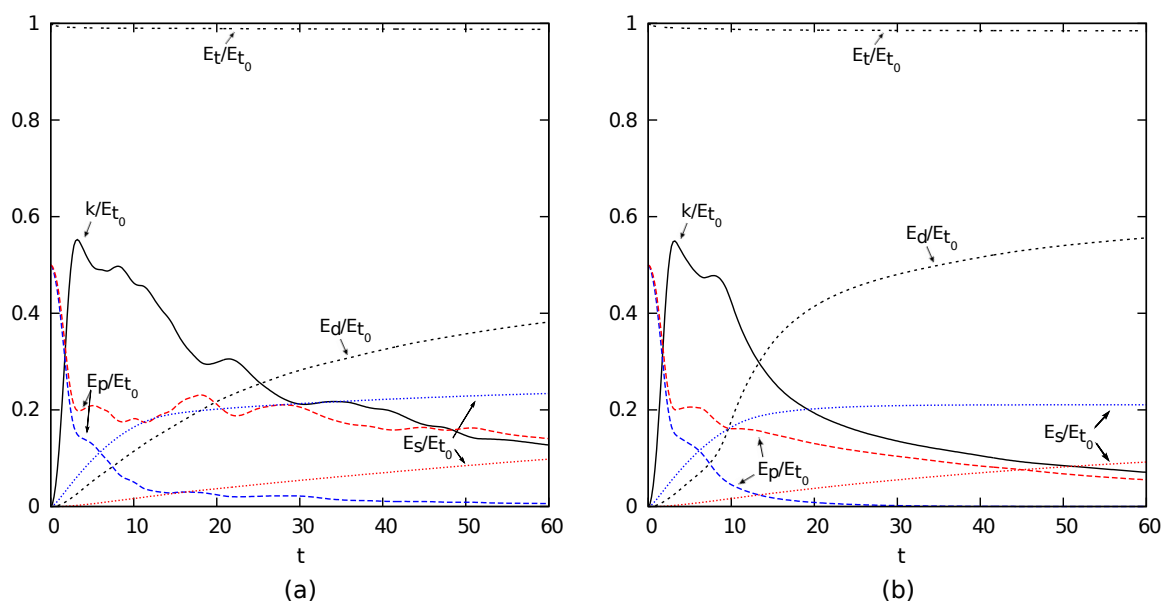


Figura 35 – Balanço de energias. (a) caso 2D; (b) caso 3D. As linhas azuis se referem às partículas com $u_1^s = 0,047$ e as vermelhas às partículas com $u_2^s = 0,006$.

6 CONCLUSÃO

A utilização do método da Simulação Numérica Direta foi empregado ao longo desta pesquisa com a intenção de entender como as principais características das correntes de gravidades, formadas a partir de sedimentos em suspensão, são afetadas pela interação entre o escoamento e as diferentes proporções iniciais de partículas mais finas e mais grossas. Além disto, também investigou-se quais as implicações resultantes da imposições de duas condições de contorno diferentes na parede inferior do domínio, para cada caso.

A avaliação consistiu em analisar os resultados obtidos através dos campos de concentração, da evolução temporal da frente da corrente, dos perfis finais de depósito, da quantidade de massa suspensa e do balanço completo de energias. Foram dois conjuntos de simulações onde o primeiro é composto por doze casos bidimensionais e o segundo por um bi e um tridimensional. O parecer geral de todas as características anteriormente citadas estão apresentados a seguir.

6.1 Quanto aos campos de concentração

Os resultados desta análise permitem fazer a decomposição da corrente bidispersa em função de cada fração de partículas, possibilitando visualizar somente as partículas grossas ou somente as partículas finas. A partir disto foi possível representar perfis instantâneos da concentração de cada partícula na direção vertical (x_2) para o caso com 50% partículas grossas 50% partículas finas, trazendo importantes diferenças entre as condições de contorno. O emprego da condição de contorno onde não há fluxo de concentração no fundo acabou ocasionando um acúmulo de concentração junto à parede inferior, principalmente no caso das partículas com maior velocidade de queda, quando os perfis verticais são traçados em locais da corrente onde há maior mistura com o fluido ambiente.

6.2 Quanto à evolução da corrente

Até o tempo adimensional $t \approx 10$, em todos os casos a propagação da corrente acontece com velocidade constante, independentemente da fração inicial de cada partícula. Tal comportamento é o mesmo encontrado em correntes que não possuem sedimentos em suspensão, onde assume-se $u^s = 0$. Nos casos 2D, após $t \approx 10$, as curvas referentes à posição da frente da corrente se afastam pelo início do processo de sedimentação. Pelo fato de as partículas mais grossas possuírem maior velocidade de sedimentação, quanto maior for o percentual inicial destas partículas, menor será a distância percorrida pela corrente. A comparação das simulações bidimensionais com o caso experimental de Gladstone et al. (1998) mostra grande diferença pelo fato de que, neste último, pode ser assumida a hipótese de ressuspensão das partículas já sedimentadas e do alto número de Reynolds, igual à 24000, em comparação a $Re = 4000$ considerado neste estudo. O resultado 3D mostrou uma evolução maior da corrente em comparação com o 2D, aproximando-se mais do resultado experimental.

No que diz respeito à distância total percorrida, a adição de pequenas quantidades de partículas mais finas à uma corrente predominantemente composta por partículas mais grossas, gera efeitos mais significantes do que a adição da mesma quantidade de partículas grossas em um escoamento com predominância de partículas finas. Este comportamento não linear acontece porque, mesmo em quantidades modestas, as partículas mais finas conseguem permanecer por mais tempo em suspensão e, conseqüentemente, sendo transportadas por maiores distâncias (por exemplo 20% partículas finas - 80% partículas grossas).

Quando comparou-se as condições de contorno, foi observado que a condição de fluxo (C.C. I) alcança a mesma distância que a C.C. II nos casos #2 e #6. Os casos #1, #3 e #5 mostraram maiores distâncias para C.C. II. Somente em #4 a C.C. I é maior do que C.C. II.

6.3 Quanto ao processo de sedimentação

A sedimentação das partículas mais grossas ocorreu muito mais rapidamente sendo que, em todos os casos, aproximadamente 50% de toda sua massa foi depositada nos primeiros 10-12 tempos adimensionais, justamente o momento em que a velocidade da corrente começa a decair. Por outro lado, neste mesmo momento, somente 10% das partículas mais finas já sofreram sedimentação, reforçando a afirmação de que elas tem papel fundamental no avanço da corrente naqueles casos em que há uma composição entre as duas partículas.

As condições do contorno trouxeram diferenças significativas somente na fração de partículas finas que, em todos os casos com a C.C. II tiveram seus valores super estimados em relação aos valores obtidos com a C.C. I. Esta diferença trouxe aproximadamente 16% de aumento na massa suspensa total dos casos que utilizaram a C.C. II.

6.4 Quanto ao balanço de energias

Do ponto de vista numérico, a C.C. II apontou uma significativa vantagem na conservação da energia total quando a quantidade de partículas grossas é maior ou igual à quantidade de partículas finas, pois conseguiu-se convergir a solução utilizando 257 pontos de cálculo na vertical, o que só foi possível, para a C.C. I, no caso em que a corrente era composta somente por partículas mais grossas. Pode-se dizer que isto acontece porque as partículas grossas geram uma espécie de “amortecimento” na turbulência do escoamento. A convergência do caso com 100% de partículas finas foi alcançado quando aumentou-se o número de pontos em x_2 , de 257 para 385 (na C.C. II). Alcançar a conservação da energia total inicial, mantendo-a em 1 é muito importante, do ponto de vista numérico, pois demonstra a estabilidade do código computacional.

Verificou-se que é nos primeiros 3 tempos adimensionais que acontece a maior queda na energia potencial de cada partícula (E_{p_i}), chegando a somente 35%-40% do

seu valor inicial. A queda de E_p refletiu-se no imediato aumento da energia cinética, chegando a aproximadamente 55% em $t \approx 3$. Notou-se também que a dissipação devida ao movimento convectivo do fluido (E_d) é predominante em relação à dissipação devida à sedimentação das partículas (E_s) para o caso com 100% de partículas finas, sendo que, conforme se adicionam partículas grossas, (E_s) aumenta chegando a ser superior a (E_d) para o caso em que não há partículas finas.

A simulação tridimensional reproduziu um comportamento bastante diferente do que a bidimensional, pois a macro dissipação (E_d) é aproximadamente 45% maior, comprovando a importância da tridimensionalidade na dinâmica da corrente.

7 PROPOSTA PARA TRABALHOS FUTUROS

A partir desta Dissertação, alguns desdobramentos referentes ao tema são vislumbrados para futuras pesquisas. Podem ser citados:

- A incorporação de mais do que dois tamanhos de grão no escoamento, visto que a curva granulométrica de um escoamento real pode apresentar muito mais tipos de partículas;
- A análise mais detalhada da possibilidade de ressuspensão das partículas já depositadas e a implementação de um modelo para tal processo no código. Isto é possível a partir da determinação da distribuição das velocidades de atrito no fundo do domínio, a qual foi abordada neste trabalho;
- Estabelecer uma análise mais detalhada dos mecanismos de geração e propagação das estruturas tridimensionais, tais como os vórtices de Kelvin-Helmholtz e as estruturas de lobos e fendas;
- Simular o caso *lock-exchange* para um domínio onde seja possível o espalhamento da corrente em todas as direções.

REFERÊNCIAS

- BENJAMIN, T. B. Gravity currents and related phenomena. **J. Fluid. Mech.**, v. 31, p. 209–248, 1968.
- BUARQUE, D. C. **Simulação numérica direta de um escoamento turbulento em um canal com fundo ondulado**. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.
- COLEMAN, G. N.; SANDBERG, R. D. **A Primer on Direct Numerical Simulation of Turbulence – Methods, Procedures and Guidelines**. Southhampton, UK, 2010. 21 p. Technical Report.
- DENGLER, A. T.; WILDE, P.; NODA, E. K.; NORMARK, W. R. Turbidit currents generated by hurricane Iwa. **Geo-Marine Letters**, v. 4, p. 5–11, 1984.
- DUBIEF, Y.; DELCAYRE, F. On coherent-vortex identification in turbulence. **Journal of Turbulence.**, p. N11, 2000.
- ESPATH, L. F. R.; PINTO, L. C.; LAIZET, S.; SILVESTRINI, J. H. Two- and three-dimensional direct numerical simulation of particle-laden gravity currents. **Computers and Geosciences**, v. 63, p. 9–16, 2013.
- GLADSTONE, C.; PHILLIPS, J. C.; SPARKS, R. S. J. Experimentation on bidisperse, constant-volume gravity curenets: propagation and sediment deposition. **Sedimentology**, v. 46, p. 833–843, 1998.
- HOGG, A. J.; UNGARISH, M.; HUPPERT, H. E. Particle-driven gravity currents: asymptotic and box model solutions. **European Journal of Mechanics - B/Fluids.**, v. 19, p. 139–165, 2000.
- HU, C.; MONTGOMERY, E. T.; SCHMITT, R. W.; MULLER-KARGER, F. E. The dispersal of the amazon and orinoco river water in the tropical atlantic and caribbean sea: Observation from space and s-palace floats. **Deep Sea Research**, v. 51, p. 1151–1171, 2004.
- HUPPERT, H. E. Quantitative modelling of granular suspension flows. **Philosophical Transactions of the Royal Society.**, v. 356, p. 2471–2496, 1998.
- HUPPERT, H. E. Gravity currents: a personal perspective. **J. Fluid. Mech.**, v. 554, p. 299–322, 2006.
- HUPPERT, H. E.; SIMPSON, J. E. The slumping of gravity currents. **J. Fluid. Mech.**, v. 99, p. 785–799, 1980.
- JULIEN, P. Y. **Erosion and sedimentation**. Cambridge, Reino Unido: Cambridge University Press, 1998.
- KNELLER, B.; BUCKEE, C. The structure and fluid mechanics of turbidity currents: a review of some recent studies and their geological implications. **Sedimentology**, v. 47, p. 62–94, 2000.

- KáRMÁN, T. von. The engineer grapples with nonlinear problems. **Bulletin of the American Mathematical Society**, v. 46, p. 615–683, 1940.
- LAIZET, S.; LAMBALLAIS, E. High-order compact schemes for incompressible flows: A simple and efficient method with quasi-spectral accuracy. **Journal of Computational Physics**, v. 228, p. 5989–6015, 2009.
- LAIZET, S.; LI, N. Incompact3d: A powerful tool to tackle turbulence problems with up to $O(10^5)$ computational cores. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 67, p. 1735–1757, 2010.
- LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. **Journal of Computational Physics**, v. 103, p. 16–42, 1992.
- MANICA, R. **Geração de Correntes de Turbidez de Alta Densidade: Condicionantes Hidráulicos e Depositionais**. Tese (Doutorado) — Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.
- MARTINEZ, D. M. V. **Transição à turbulência na camada de mistura estavelmente estratificada utilizando simulação numérica direta e simulação de grandes escalas**. Tese (Doutorado) — Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2006.
- MEIBURG, E.; KNELLER, B. Turbidity currents and their deposits. **Annu. Rev. Fluid. Mech.**, v. 42, p. 135–156, 2010.
- MIDDLETON, G. V. Sediment deposition from turbidity currents. **Annual Review of Earth and Planetary Sciences**, v. 21, p. 89–114, 1993.
- MULDER, T.; ALEXANDER, J. The physical character of subaqueous sedimentary density flows and their deposits. **Sedimentology**, v. 48, p. 269–299, 2001.
- MUTTI, E.; TINTERRI, R.; REMACHA, E.; MAVILLA, N.; ANGELLA, S.; FAVA, L. **An Introduction to the Analysis of Ancient Turbidite Basins from an Outcrop Perspective: AAPG Continuing Education Course Note, No. 39**. [S.l.]: American Association of Petroleum Geologists, 1999. (AAPG Continuing Education Course Note Series).
- NASR-AZADANI, M. M.; HALL, B.; MEIBURG, E. Polydisperse turbidity currents propagating over complex topography: Comparison of experimental and depth-resolved simulation results. **Computers and Geosciences**, v. 53, p. 141–153, 2013.
- NECKER, F.; HÄRTEL, C.; KLEISER, L.; MEIBURG, E. High-resolution simulations of particle-driven gravity currents. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 28, p. 279–300, 2002.
- NECKER, F.; HÄRTEL, C.; KLEISER, L.; MEIBURG, E. Mixing and dissipation in particle-driven gravity currents. **J. Fluid. Mech.**, v. 545, p. 339–372, 2005.
- PINTO, L. C. **Análise por simulação numérica direta do desprendimento de vórtices de um cilindro circular em movimento forçado**. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2008.

- PINTO, L. C. **Análise por simulação numérica direta do escoamento ao redor de um cilindro submetido a vibração induzida por vórtices**. Tese (Doutorado) — Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.
- REY, A. C. D. **Simulação Física de Processos Gravitacionais Subaquosos: uma aproximação para o entendimento da sedimentação marinha profunda**. Tese (Doutorado) — Instituto de Geociências, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2006.
- ROOIJ, F. D.; DALZIEL, S. B. Time- and space-resolved measurements of deposition under turbidity currents. **Spec. Publs. int. Ass. Sediment.**, v. 31, p. 207–215, 2001.
- SHIN, J. O.; DALZIEL, S. B.; LINDEN, P. F. Gravity currents produced by lock exchange. **J. Fluid. Mech.**, v. 521, p. 1–34, 2004.
- SILVESTRINI, J. H. Simulação numérica direta e de grandes escalas de escoamentos transicionais e turbulentos. In: _____. [S.l.]: ABCM, 2003. (Coleção cadernos de turbulência, v. 2: Turbulência), p. 1–81.
- SIMPSON, J. E. Effects of the lower boundary on the head of a gravity current. **J. Fluid. Mech.**, v. 53, p. 759–768, 1972.
- SIMPSON, J. E. **Gravity Currents: In the Environment and the Laboratory**. Nova Iorque: Cambridge University Press, 1999.
- SIMPSON, J. E.; BRITTER, R. E. The dynamics of the head of a gravity current advancing over a horizontal surface. **J. Fluid. Mech.**, v. 94, p. 477–495, 1979.
- UNGARISH, M. Energy balances for propagating gravity currents: homogeneous and stratified ambients. **J. Fluid Mech.**, v. 565, p. 363–380, 2006.
- UNGARISH, M. **An Introduction to Gravity Currents and Intrusions**. Boca Raton, Florida: Taylor & Francis, 2009.

Apêndices

APÊNDICE A – ADIMENSIONALIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Partindo da equação de quantidade de movimento, em sua forma dimensional, é demonstrada a sua estabilidade dimensional, sendo o espaço, o tempo e a massa representados por L , T e M .

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j} = -\frac{1}{\tilde{\rho}_a} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{x}_i} + \tilde{\nu}_a \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j \partial \tilde{x}_j} - \frac{\tilde{c}_t}{\tilde{\rho}_a} \tilde{F}_d, \quad (\text{A.1})$$

$$\left[\frac{L}{T} \right] \left[\frac{1}{T} \right] + \left[\frac{L}{T} \right] \left[\frac{L}{T} \right] \left[\frac{1}{L} \right] = - \left[\frac{L^3}{M} \right] \left[\frac{M}{T^2 L} \right] \left[\frac{1}{L} \right] + \left[\frac{L^2}{T} \right] \left[\frac{L}{T} \right] \left[\frac{1}{L^2} \right] - \left[\frac{1}{L^3} \right] \left[\frac{L^3}{M} \right] \left[\frac{ML}{T^2} \right].$$

Realizando os devidos cancelamentos, ficam somente os termos de aceleração. A seguir são apresentadas algumas definições necessárias para prosseguir à adimensionalização:

$$\tilde{F}_d = 3\pi \tilde{\mu}_a \tilde{d}_p \tilde{u}^s e_i^g, \quad (\text{A.2a})$$

$$\tilde{u}^s = \frac{1}{18} \tilde{d}_p^2 \tilde{g} \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a)}{\tilde{\mu}_a}, \quad (\text{A.2b})$$

$$\tilde{u}_b = \sqrt{\tilde{g}' \tilde{h}}, \quad (\text{A.2c})$$

$$\tilde{g}' = \pi \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a)}{6\tilde{\rho}_a} \tilde{c}_{t0} \tilde{d}_p^3 \tilde{g}. \quad (\text{A.2d})$$

Substituindo A.2b em A.2a tem-se

$$\tilde{F}_d = \pi \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a)}{6} \tilde{d}_p^3 \tilde{g} e_i^g. \quad (\text{A.3})$$

A adimensionalização de cada termo da equação A.1 é feita da seguinte forma:

- $u = \frac{\tilde{u}}{\tilde{u}_b};$
- $t = \frac{\tilde{u}_b \tilde{t}}{\tilde{h}};$

- $x = \frac{\tilde{x}}{\tilde{h}}$;
- $p = \frac{\tilde{p}}{\tilde{\rho}_a \tilde{u}_b^2}$;
- $c_t = \frac{\tilde{c}_t}{\tilde{c}_{t_0}}$.

Substituindo cada termo da equação A.1 pelas adimensionalizações acima e por A.3

$$\frac{\tilde{u}_b^2}{\tilde{h}} \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\tilde{u}_b^2}{\tilde{h}} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\tilde{\rho}_a} \frac{\tilde{\rho}_a \tilde{u}_b^2}{\tilde{h}} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tilde{\nu}_a \frac{\tilde{u}_b^2}{\tilde{h}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{c_t \tilde{c}_{t_0}}{\tilde{\rho}_a} \pi \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a)}{6} \tilde{d}_p^3 \tilde{g} e_i^g, \quad (\text{A.4})$$

e dividindo A.4 por $\frac{\tilde{u}_b^2}{\tilde{h}}$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{c_t \tilde{c}_{t_0}}{\tilde{\rho}_a} \pi \frac{(\tilde{\rho}_p - \tilde{\rho}_a)}{6} \tilde{d}_p^3 \tilde{g} e_i^g \frac{\tilde{h}}{\tilde{u}_b^2}. \quad (\text{A.5})$$

A partir de A.2c, \tilde{g}' também pode ser escrito como

$$\tilde{g}' = \frac{\tilde{u}_b^2}{\tilde{h}}, \quad (\text{A.6})$$

de modo que A.5 fica

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + c_t \frac{\tilde{g}'}{\tilde{g}'} e_i^g, \quad (\text{A.7})$$

e, finalmente

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + c_t e_i^g. \quad (\text{A.8})$$

APÊNDICE B – COMPARAÇÃO ENTRE SIMULAÇÕES COM E SEM ESTRATÉGIA DE ALONGAMENTO

Aqui serão apresentadas alguns gráficos comparando duas simulações com estratégias diferentes de cálculo: aquela utilizada neste trabalho (para o caso 2D) e a que não há o alongamento da malha. O objetivo é mostrar que o fato de serem incorporadas pequenas perturbações iniciais no campo de velocidades ao se fazer o cálculo em um domínio parcial, não afeta o resultado de forma significativa. Para os casos considerados, empregou-se a condição de contorno “II” mostrada na seção 4.2 e os parâmetros estão mostrados a seguir.

Tabela 5 – Parâmetros para simulação com alongamento (*stretching*) e sem alongamento (*no stretching*).

	$c_{0_i}(\%)$	u_l^s	(n_1, n_2)	(L_1, L_2)	Δx_{final}
com alongamento	100	0,004	(2305, 257)	(30, 2)	0,013
sem alongamento			(4609, 257)		0,0065

Logo de início é possível perceber o número reduzido de pontos na direção x_1 necessários para o caso com alongamento, resultando em um Δx_{final} com a metade do tamanho.

Abaixo estão ilustradas as grandezas mais relevantes, demonstrando a validade da estratégia.

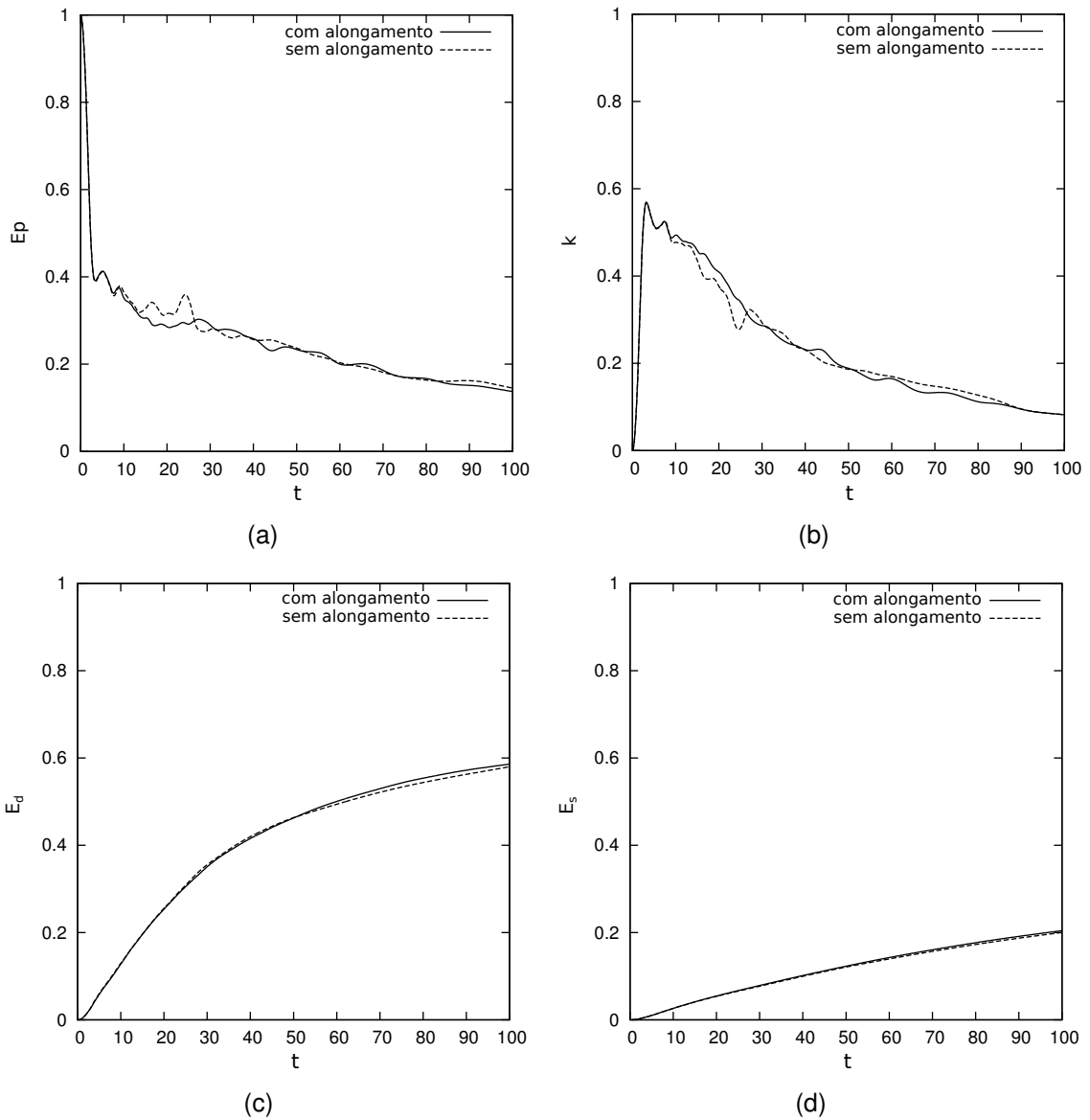


Figura 36 – Balanço de energias comparando uma simulação com alongamento (*stretching*) e sem alongamento (*no stretching*). (a) energia potencial; (b) energia cinética; (c) macro dissipação; (d) micro dissipação.

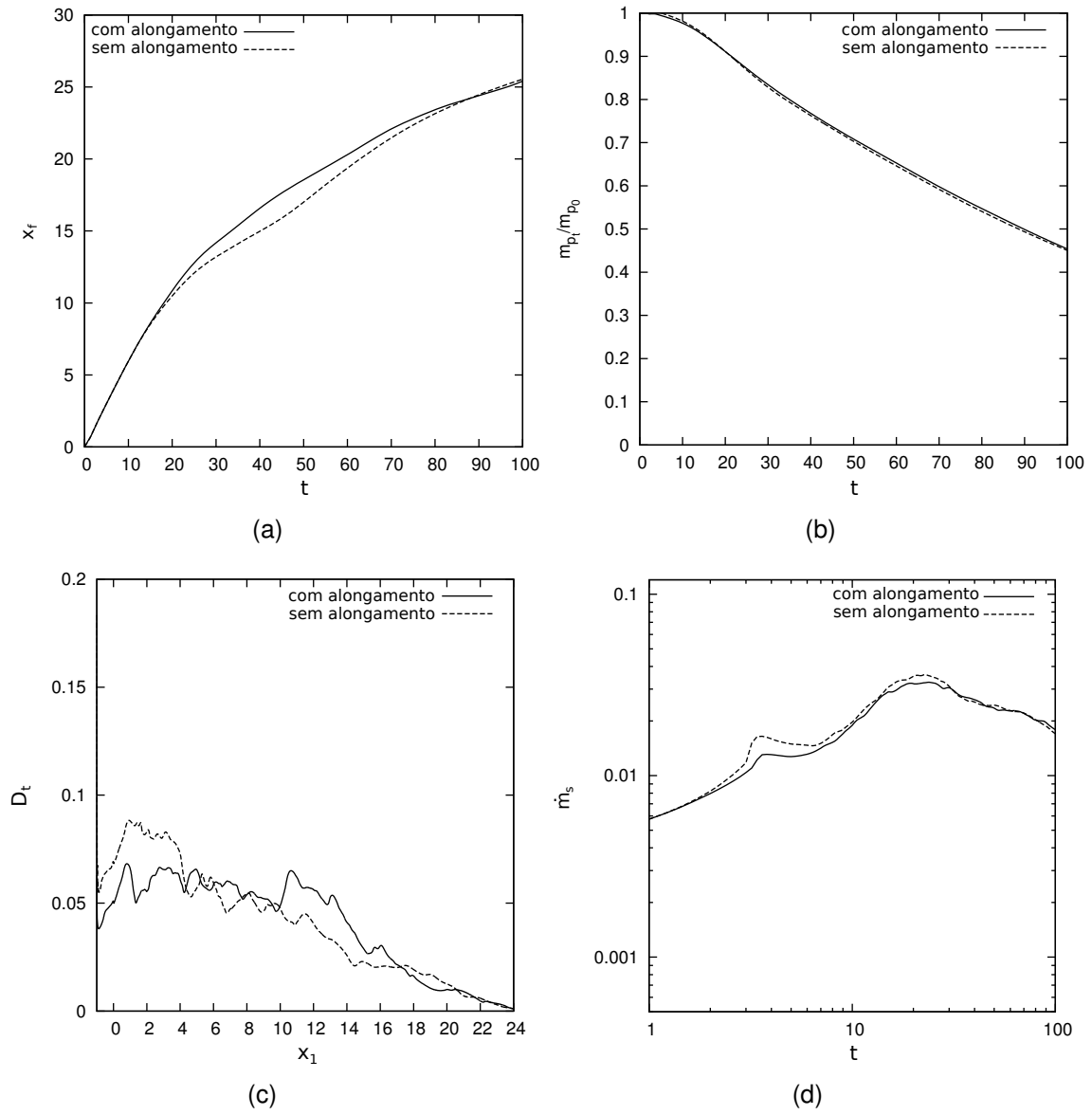


Figura 37 – (a) evolução da frente da corrente; (b) massa suspensa; perfil do depósito; (d) taxa de sedimentação.

APÊNDICE C – RECURSOS COMPUTACIONAIS

Máquina para os cálculos bidimensionais:

- Desktop Dell XPS;
- Processador Intel I7-2600 3.4GHz com 4 núcleos Hyper-Threading;
- Memória ram 16 GB;
- Placa gráfica ATI Radeon 2GB.

Cálculos tridimensionais:

- Realizados no cluster Cerrado do Laboratório de Alto Desempenho (LAD) da Faculdade de informática da PUCRS;
- Cada máquina do cluster é composta por dois processadores Intel Xeon Six-Core E5645 2.4GHz Hyper-Threading e 24GB de memória;
- Cálculo paralelo utilizando 144 processadores.

⇒ Volume total de dados gerados: ≈ 1 TB.

⇒ Tempo total das simulações: ≈ 73 dias ¹.

¹Não se refere ao tempo efetivo, pois muitos cálculos bidimensionais foram realizados simultaneamente graças à tecnologia multi-núcleos.