

ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE
MATERIAIS

BRUNO AVILA FARENZENA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CORRENTES DE DENSIDADE
HIPERPICNAIS SOB REFERENCIAL MÓVEL**

Porto Alegre
2020

PÓS-GRADUAÇÃO - *STRICTO SENSU*



Pontifícia Universidade Católica
do Rio Grande do Sul

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CORRENTES DE DENSIDADE HIPERPICNAIS SOB REFERENCIAL MÓVEL

BRUNO AVILA FARENZENA

GRADUADO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MESTRADO EM ENGENHARIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

ORIENTADOR: PROF. DR. JORGE HUGO SILVESTRINI

Tese 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 Doutor em Engenharia e Tecnologia de Materiais.

Trabalho vinculado ao projeto "Simulação numérica de geração e evolução de correntes hiperpicnais por DNS". Cooperação Instituição/Empresa com recursos da Petrobras.

**Porto Alegre
Março de 2020**

Ficha Catalográfica

F222s Farenzena, Bruno Avila

Simulação numérica de correntes de densidade hiperpicnais sob referencial móvel / Bruno Avila Farenzena . – 2020.

104 f.

Tese (Doutorado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais, PUCRS.

Orientador: Prof. Dr. Jorge Hugo Silvestrini.

1. Correntes de densidade. 2. Escoamento hiperpicnal. 3. Referencial móvel. I. Silvestrini, Jorge Hugo. II. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da PUCRS
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Bibliotecária responsável: Clarissa Jesinska Selbach CRB-10/2051



SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA FRENTE DE CORRENTES DE DENSIDADE HIPERPICNAIS EM REFERENCIAL MÓVEL

CANDIDATO: BRUNO AVILA FARENZENA

Esta Tese de Doutorado foi julgada para obtenção do título de DOUTOR 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

DRA. EDITH BEATRIZ CAMANO SCHETTINI - INSTITUTO DE PESQUISAS HIDRÁULICAS - UFRGS

DR. MARCELLO AUGUSTO FARACO DE MEDEIROS - DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MATERIAIS AERONÁUTICA E AUTOMOBILÍSTICA - USP

DR. RUBEM MÁRIO FIGUEIRÓ VARGAS - DO PGETEMA - PUCRS

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente aos meus pais, Carla Rejane Avila e Hélio Vilmar Farenzena, e meu irmão Guilherme Avila Farenzena pelo apoio incondicional durante o desenvolvimento desta pesquisa. Agradeço ao professor Jorge Hugo Silvestrini por oferecer a oportunidade de participar dos projetos de pesquisa realizados no LASET. A equipe do LASET, que me ajudaram a dar continuidade ao trabalho. Aos meus colegas e amigos Felipe Schuch, Filipi Vianna, Karina Ruschel e Ricardo Frantz pelo apoio nos mais variados assuntos. O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

*“-What is the music of life?
-Silence, my brother.”*

(Skyrim)

Resumo

FARENZENA, Bruno Avila. **SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CORRENTES DE DENSIDADE HIPERPICNAIS SOB REFERENCIAL MÓVEL**. Porto Alegre. 2020. Tese de Doutorado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Tecnologia de Materiais, PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO RIO GRANDE DO SUL.

Correntes de densidade são escoamentos resultantes de um gradiente de pressão gerado por variações de forças de empuxo entre dois fluidos que entram em contato. A propagação destes escoamentos promove a formação de diferentes regiões internas, tais como uma região frontal conhecida como cabeça, uma região à montante da cabeça chamada de corpo e uma região posterior referida como cauda. A cabeça de uma corrente de densidade é uma região de fortes gradientes de velocidade, responsável por grande parte do entranhamento de fluido na corrente e também possui heterogeneidades em seu ponto mais à jusante conhecidas como estruturas de lobos e fendas. Neste trabalho é apresentado um modelo matemático que permite realizar simulações numéricas da cabeça de uma corrente de densidade em tempos suficientemente longos com um custo computacional reduzido. Tal modelo matemático é baseado no acoplamento de um referencial móvel no sistema de coordenadas que corresponde a modificações nos termos de transporte das equações de Navier-Stokes e de transporte escalar e nas condições de contorno do problema. Com base neste modelo matemático e utilizando o código computacional Incompact3d, Simulações Numéricas Diretas e Simulações de Grandes Escalas foram realizadas primeiramente para verificar a validade do modelo proposto e posteriormente para buscar mais informações a respeito do comportamento da cabeça de uma corrente de densidade em longos períodos de tempo e sobre a origem das estruturas de lobos e fendas. Como resultados de base de validação do modelo proposto, foram realizadas simulações na configuração de escoamento conhecida na literatura como lock-exchange e também considerou-se relações empíricas disponíveis na literatura. A partir dos resultados obtidos com o modelo matemático proposto, foi observado que em períodos de tempo mais longos a corrente de densidade não apresenta a formação de novos vórtices de Kelvin-Helmholtz e as estruturas de lobos e fendas possuem largura que, em média, cresce em função do número de Reynolds da cabeça da corrente, comportamento que é exatamente o oposto do que está documentado na literatura de abordagens experimentais. Com base na Teoria da Estabilidade Linear, foi concluído que as estruturas de lobos e fendas são originadas pelo desenvolvimento de instabilidades gravitacionais, do tipo Rayleigh-Taylor, associadas à região de estratificação instável no ponto mais à jusante da cabeça da corrente de densidade.

Palavras-chave: Correntes de densidade, escoamento hiperpicnal, referencial móvel

Abstract

FARENZENA, Bruno Avila. **NUMERICAL SIMULATION OF HYPERPYCNAL DENSITY CURRENTS UNDER MOVING FRAME**. Porto Alegre. 2020. PhD Thesis. Graduation Program in Materials Engineering and Technology, PONTIFICAL CATHOLIC UNIVERSITY OF RIO GRANDE DO SUL.

Density currents are flows resulting from a pressure gradient generated by variations in buoyant forces between two fluids that come into contact. The propagation of these flows promotes the formation of different internal regions, such as a frontal region known as the head, a region upstream of the head called the body and a posterior region referred to as the tail. The head of a density stream is a region of strong velocity gradients, responsible for much of the fluid entrainment in the current and also has heterogeneities at its most downstream point known as lobe and cleft structures. In this work a mathematical model is presented that allows to perform numerical simulations of the head of a density current in sufficiently long times with a reduced computational cost. Such mathematical model is based on the coupling of a moving frame in the coordinate system that corresponds to changes in the transport terms of the Navier-Stokes equations and scalar transport and in the boundary conditions of the problem. Based on this mathematical model and using the computational code Incompact3d, Direct Numerical Simulations and Large Eddy Simulations were performed first to verify the validity of the proposed model and later to seek more information about the behavior of the head of a density current over long time periods and on the origin of the lobe and cleft structures. As results of the validation basis of the proposed model, numerical simulations were performed in the flow configuration known in the literature as lock-exchange and also considered empirical relationships available in the literature. From the results obtained with the proposed mathematical model, it was observed that in longer periods of time the density current does not present the formation of new Kelvin-Helmholtz vortices and the lobe and cleft structures have a width that, on average, grows as a function of the head Reynolds number, a behavior that it is the exact opposite of what is documented in the literature of experimental approaches. Based on the Linear Stability Theory, it was concluded that the lobe and cleft structures are originated by the development of gravitational instabilities, of the Rayleigh-Taylor type, associated with the region of unstable stratification at the point further down the head of the density current.

Keywords: Density currents, hyperpycnal flow, moving frame

Lista de ilustrações

Figura 1.1 – Exemplos de correntes de densidade que podem ocorrer na natureza (a) e (b) e que podem ser causadas por ações antrópicas (c).	20
Figura 1.2 – Exemplo da anatomia de uma corrente de densidade com altura h se propagando com velocidade u_f . Fonte: Francisco (2018).	20
Figura 3.1 – Classificação de correntes de densidade em relação à $\Delta\rho$: escoamento homopical (a), escoamento mesopical (b), escoamentos hipopical e hiperpical (c). Adaptado de Mulder e Alexander (2001).	25
Figura 3.2 – Exemplo dos mecanismos de iniciação de correntes de densidade: <i>remobilização não-instantânea de material</i> (a) e (c) e <i>remobilização não-instantânea de material</i> (b) e (d) . Adaptado de Francisco (2018)	26
Figura 3.3 – Diferentes condições iniciais empregadas no estudo de correntes de densidade <i>lock-release</i> hiperpicais: configuração canalizada (a), configuração cilíndrica (b) e configuração canal/bacia (c).	27
Figura 3.4 – Exemplo do comportamento da velocidade da frente de uma corrente de densidade em um canal em função do tempo, onde são observadas as diferentes fases dinâmicas. Adaptado de Cantero et al. (2007). . . .	29
Figura 3.5 – Alcance da corrente de densidade no tempo de <i>slumping</i> normalizada pelo comprimento da parcela do canal ocupado pelo fluido mais denso em função da velocidade média da frente, onde a linha tracejada representa o comprimento do canal em configurações <i>lock-exchange</i>	30
Figura 3.6 – Exemplo das regiões e estruturas presentes em uma corrente de densidade hiperpical.	31
Figura 3.7 – Exemplo das alturas da cabeça e do nariz de uma corrente de densidade. Adaptado de Simpson (1972)	32
Figura 3.8 – Esquema simplificado dos reservatórios e transferências de energia em um escoamento estratificado. Adaptado de Winters et al. (1995). . . .	33
Figura 3.9 – Exemplo da distribuição de energia cinética $E(k)$ em função do número de onda associado às escalas do escoamento k . Sendo k_c é o número de onda de corte arbitrário, k_η é o número de onda associado a escala de Kolmogorov e a área preenchida corresponde à quantidade de energia não resolvida pela abordagem de simulação de grandes escalas. . . .	38
Figura 4.1 – Esquema da configuração inicial de uma corrente de densidade <i>lock-exchange</i>	40

Figura 4.2 – Esquema da configuração de escoamento “Modelo da frente em equilíbrio”, primeiramente é apresentado a o desenvolvimento de uma corrente de densidade na configuração <i>lock-exchange</i> e posteriormente o referencial móvel utilizado na obtenção do modelo matemático proposto.	43
Figura 4.3 – Exemplo do método empregado na definição dos limites da cabeça de uma corrente de densidade baseado na grandeza integral h_{LA} .	47
Figura 4.4 – Exemplo do método de definição da velocidade frente baseado no método descrito para um instante de tempo dado.	49
Figura 4.5 – Exemplo de comparação entre os métodos tradicional e proposto para a computação da velocidade da frente.	49
Figura 4.6 – Exemplo da determinação do comprimento de onda de lobos e fendas a partir de uma isolinha de concentração no plano (x_1, x_3) localizado no fundo do canal $(x_2 = 0)$ para um instante de tempo dado.	50
Figura 4.7 – Esquema do balanço de energia, baseado na abordagem da partição de energial potencial (LORENZ, 1955), na configuração <i>lock-exchange</i> . Adaptado de Winters et al. (1995).	53
Figura 4.8 – Fluxograma simplificado de funcionamento do código computacional Incompact3d.	56
Figura 4.9 – Número de onda modificado para os diferentes esquemas numéricos apresentados com $n_\pi = 4$.	62
Figura 4.10 – Exemplo do uso da função de mapeamento descrita por Eq. (4.68) usando 32 pontos de colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto.	64
Figura 5.1 – Iso-superfície de concentração do caso LE2.5e3 nos instantes de tempo $t = 4$ (a), $t = 8$ (b), $t = 16$ (c) e $t = 28$ (d). Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.	67
Figura 5.2 – Iso-superfície de concentração para os casos LE1e3 (a), LE2.5e3 (b) e LE5e3 (c) no instante de tempo $t = 28$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.	68
Figura 5.3 – Iso-superfície de concentração para o caso LE2.5e3 utilizando a abordagem DNS (a) e a abordagem ILES (b) no instante de tempo $t = 28$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.	69
Figura 5.4 – Evolução temporal da posição da frente (a) e velocidade da frente (b) dos caso <i>lock-exchange</i> . Na posição da frente foi subtraído a posição inicial $x_{f,0}$.	69
Figura 5.5 – Velocidade média da frente durante a fase de <i>slumping</i> em função do número de Reynolds.	70

Figura 5.6 – Relação entre altura do nariz e altura da cabeça da corrente de densidade em função do tempo para cada caso <i>lock-exchange</i> (a) e comparação dos valores médios desta relação de alturas em função do número de Reynolds da cabeça com a relação empírica proposta por Simpson (1972) (b). As linhas verticais em (b) indicam o desvio padrão associado as médias de (a).	71
Figura 5.7 – Evolução temporal de iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para cada caso de simulação <i>lock-exchange</i> : (a) LE1e3, (b) LE2.5e3 e (c) LE5e3. Em todas as figuras foi adotado um incremento de tempo de 0,1 tempos adimensionais e um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas.	72
Figura 5.8 – Iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para o caso de simulação LE2.5e3 para diferentes instantes de tempo e o histograma de comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas para $t = 4$ (b), $t = 8$ (c) e $t = 28$ (d). Foi adotado um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas da sub-figura (a).	73
Figura 5.9 – Comparação da relação entre o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça da corrente de densidade em função do número de Reynolds da cabeça com a relação empírica proposta por Simpson (1972). As linhas verticais indicam o desvio padrão associado aos valores médios.	74
Figura 5.10–Balanço de energia em função do tempo para os casos de simulação LE1e3 (a), LE2.5e3 (b) e LE5e3 (c), sendo E uma parcela qualquer de energia.	75
Figura 5.11–Eficiência de mistura em função do número de Reynolds.	76
Figura 5.12–Iso-superfície de concentração para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c) no instante de tempo $t = 20$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.	79
Figura 5.13–Iso-superfície de concentração para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c) no instante de tempo $t = 500$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.	79
Figura 5.14–Comprimento da cabeça da corrente de densidade em função do número de Reynolds.	80
Figura 5.15–Posição da frente no referencial móvel (a) e posição da frente global (b) para todos os casos de simulação no Modelo da Frente em Equilíbrio.	80

Figura 5.16–Evolução temporal de iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para o caso de simulação MFE2.5e3 (a-b) e LE2.5e3 (c). A sub-figura (b) é uma ampliação da sub-figura (a) no intervalo $0 \leq x_1 - x_{f,0} \leq 12,5$. Em todas as figuras foi adotado um incremento de tempo de 0,2 tempos adimensionais e um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas.	81
Figura 5.17–Evolução temporal de iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para o caso de simulação MFE5e3, onde a sub-figura (a) representa o estado transiente, (b) o estado de equilíbrio e (c) é uma ampliação de (b) no retângulo cinza. Em todas as figuras foi adotado um incremento de tempo de 0,2 tempos adimensionais e um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas.	82
Figura 5.18–Altura do nariz (a) e comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas (b), normalizados pela altura da cabeça, em função do número de Reynolds da cabeça. As linhas verticais indicam o desvio padrão associado aos valores médios.	83
Figura 5.19–Relação entre o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça da corrente em função do número de Reynolds da cabeça, onde MFE-EE representa resultados obtidos com Modelo da Frente em Equilíbrio no estado de equilíbrio.	84
Figura 5.20–Número de Richardson local em função de $x_1 - x_f$. Resultados obtidos no estado de equilíbrio.	85
Figura 5.21–Iso-linhas de taxa de amplificação em função da coordenada $x_1 - x_f$ e do comprimento de onda para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c). Nesta figura, a linha tracejada representa a fronteira de estabilidade, as demais isolinhas são desenhadas com um incremento de taxa de amplificação de 0,4 e a linha cinza representa o comprimento de onda mais amplificado para cada posição $x_1 - x_f$	86
Figura 5.22–Comprimento de onda mais amplificado em função número de Reynolds.	87
Figura 5.23–Histograma do comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas nos tempos iniciais para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c), onde a linha tracejada representa os resultados obtidos pelo estudo de estabilidade linear.	88
Figura 5.24–Relação entre o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça da corrente em função do número de Reynolds da cabeça para o Modelo da Frente em Equilíbrio, um múltiplo do comprimento de onda mais amplificado e a Eq. (3.7).	88

Figura 5.25–Iso-linhas de vorticidade no plano (x_2, x_3) na posição x_1 correspondente à máxima taxa de amplificação com o estudo de estabilidade linear (a) e simulação numérica (b) e a concentração em função da coordenada vertical (c). Nas figuras (a) e (b) as linhas pretas e sólidas representam valores positivos enquanto que as linhas pretas e tracejadas correspondem à valores negativos. A linha cinza tracejada representa a localização do nariz da corrente. Resultados para o caso MFE1e3. . . .	89
Figura 7.1 – Esquema da relação das taxas de transferência de energia turbulenta com os reservatórios de energia do escoamento (a) e distribuição das taxas de transferência de energia turbulenta em função da direção x_1 para o caso MFE2.5e3 (b).	93

Lista de tabelas

Tabela 5.1 – Parâmetros das simulações na configuração <i>Lock-exchange</i> (LE). Todas os casos de simulação possuem $Sc = 1$	66
Tabela 5.2 – Parâmetros das simulações na configuração <i>Modelo da frente em equilíbrio</i> (MFE).	77
Tabela B.1 – Número de processadores empregados, espaço ocupado em disco e tempo aproximado de cálculo de cada simulação no centro de computação do Laboratório de Alto Desempenho (LAD) na Escola Politécnica da PUCRS.	104

Lista de abreviaturas e siglas

LE	<i>Lock-Exchange</i>
MFE	Modelo da Frente em Equilíbrio
MFE-EE	Modelo da Frente em Equilíbrio no Estado de Equilíbrio
LST	Teoria da Estabilidade Linear (<i>Linear Stability Theory</i>)
DNS	Simulação Numérica Direta (<i>Direct Numerical Simulation</i>)
LES	Simulação de Grandes Escalas (<i>Large Eddy Simulation</i>)
ILES	Simulação Implícita de Grandes Escalas (<i>Implicit Large Eddy Simulation</i>)

Lista de símbolos

ρ_1	Massa específica da corrente de densidade $[M][L]^{-3}$
ρ_0	Massa específica do fluido ambiente $[M][L]^{-3}$
$\Delta\rho$	Diferença entre a massa específica da corrente de densidade e a massa específica do fluido ambiente $[M][L]^{-3}$
ν	Viscosidade cinemática $[L]^2[T]$
\tilde{u}_b	Velocidade de flutuação $[L][T]^{-1}$
\tilde{u}_f	Velocidade da frente da corrente de densidade $[L][T]^{-1}$
$\tilde{u}_{f,s}$	Velocidade da frente da corrente de densidade durante a fase de <i>slumping</i> $[L][T]^{-1}$
\tilde{H}	Altura da coluna de fluido com acréscimo de massa específica [L]
\tilde{g}	Aceleração gravitacional $[L][T]^{-2}$
\tilde{x}_f	Posição da frente [L]
$\tilde{x}_{f,0}$	Posição inicial da frente [L]
\tilde{h}_{head}	Altura da cabeça da corrente de densidade [L]
\tilde{L}_{head}	Comprimento da cabeça da corrente de densidade [L]
\tilde{h}_{nose}	Altura do nariz da corrente de densidade [L]
$\tilde{\lambda}$	Largura de estrutura de lobos e fendas [L]
$\bar{\lambda}$	Largura média das estruturas de lobos e fendas
t	Tempo
x_i	Espaço de coordenadas
u_i	Campo de velocidades
q_i	Variável qualquer do escoamento
p	Pressão
φ	Concentração escalar

Γ_{in}	Superfície de entrada
Ω	Volume de controle
φ_{in}	Concentração escalar na entrada
$u_{1,in}$	Velocidade na entrada
A_{in}	Amplitude da velocidade na entrada
\mathcal{P}	Energia potencial
\mathcal{P}_0	Energia potencial inicial
\mathcal{P}_a	Energia potencial disponível
\mathcal{P}_b	Energia potencial <i>background</i>
\mathcal{K}	Energia cinética
\mathcal{I}	Energia interna
ε	Taxa de dissipação viscosa
ε'	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
Φ	Taxa de difusão de massa
\mathcal{B}	Fluxo de <i>buoyancy</i>
\mathcal{M}	Fluxo diapicnal
η	Eficiência de mistura
Re	Número de Reynolds baseado em \tilde{u}_b e \tilde{H}
Re_{head}	Número de Reynolds da cabeça da corrente de densidade
Ri	Número de Richardson
Sc	Número de Schmidt
L_1	Comprimento do domínio computacional na direção de propagação do escoamento
L_2	Comprimento do domínio computacional na direção vertical
L_3	Comprimento do domínio computacional na direção perpendicular a propagação do escoamento

n_1	Número de pontos da malha de cálculo na direção de propagação do escoamento
n_2	Número de pontos da malha de cálculo na direção vertical
n_3	Número de pontos da malha de cálculo na direção perpendicular a propagação do escoamento
Δt	Passo de tempo
t_f	Tempo final de simulação
n_π	Intensidade da dissipação artificial aportada pelos esquemas numéricos
$\bar{\varphi}_{\text{MFE}}$	Estado de base da concentração
k_3	Número de onda na direção perpendicular a propagação do escoamento
ω_i	Taxa de amplificação de uma perturbação
λ_{max}	Comprimento de onda mais amplificado

Sumário

1	Introdução	19
2	Objetivos	22
2.1	Objetivos específicos	22
3	Revisão Bibliográfica	24
3.1	Correntes de densidade	24
3.1.1	A configuração <i>Lock-release</i>	26
3.1.2	A anatomia de uma corrente de densidade e as estruturas de lobos e fendas	30
3.2	Mistura irreversível	32
3.3	Teoria da estabilidade linear	34
3.4	Simulação numérica direta e simulação de grandes escalas	37
4	Metodologia	39
4.1	Formulação matemática do problema	39
4.1.1	Formulação da configuração <i>lock-exchange</i>	40
4.1.2	Modelo da Frente em Equilíbrio (MFE)	42
4.1.3	Equações de estabilidade linear	44
4.2	Pós-processamentos	46
4.2.1	Determinação dos limites da cabeça de uma corrente de densidade	46
4.2.2	Altura do nariz e altura da cabeça de uma corrente de densidade	48
4.2.3	Velocidade da frente	48
4.2.4	Determinação da comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas	50
4.2.5	Mistura irreversível e balanço de energia em configuração <i>lock-exchange</i>	51
4.3	Código computacional Incompact3d	53
4.4	Métodos numéricos	57
4.4.1	Método das diferenças finitas de alta ordem	57
4.4.2	Método de Chebyshev	62
5	Resultados e Discussões	65
5.1	Simulações na configuração <i>Lock-exchange</i>	65
5.1.1	Características gerais	66
5.1.2	Balanço de energia e eficiência de mistura	73
5.2	Simulações do Modelo da Frente em Equilíbrio (MFE)	76
5.2.1	Características gerais	78
5.2.2	O estado de equilíbrio	83
5.3	A origem das estruturas de lobos e fendas	85

6	Conclusão	90
7	Proposta para Trabalhos Futuros	93
	Referências	95

	Apêndices	100
	APÊNDICE A Equações de energia para a configuração <i>lock-exchange</i>	101
	A.1 Energia potencial	101
	A.2 Energia potencial <i>background</i>	102
	A.3 Energia cinética	103
	APÊNDICE B Recursos computacionais utilizados	104

1 Introdução

As correntes de densidade ou gravidade representam um grupo de fenômenos que estão presentes tanto na natureza quanto em situações criadas pelo ser humano. Tais fenômenos ocorrem quando há escoamento relativo entre dois fluidos, miscíveis ou imiscíveis, com diferentes massas específicas devido à variações de força de empuxo (BENJAMIN, 1968; SIMPSON, 1972). Este fenômeno é muito frequente na natureza e esta presente em nosso dia à dia, por exemplo, uma corrente de densidade é formada quando abrimos a porta de uma casa aquecida e o ar frio de fora escoar pelo chão sob o ar menos denso de dentro (UNGARISH, 2009).

Na natureza as correntes de densidade podem ser observadas em diversos casos, tais como: formação de tempestades, causadas pelo deslocamento relativo entre grandes massas de ar quente e massas de ar frio (Figura 1.1a); as tempestades de areia, características de regiões arenosas e com baixa umidade, que transportam grandes quantidades de partículas de areia (Figura 1.1b); as correntes oceânicas que se movem pela presença de gradientes na concentração salina e na temperatura da água; e quando um rio transportando sedimentos e matéria orgânica entra no oceano (SIMPSON, 1999; HORNER-DEVINE et al., 2015). Nesses casos a causa da diferença de massa específica é geralmente atribuída à variações de temperatura, umidade, salinidade ou partículas em suspensão (MEIBURG; KNELLER, 2010). Quando observados na natureza, as correntes de densidade são escoamentos turbulentos cujos mecanismos de transição e produção de turbulência estão, geralmente, associados a instabilidades gravitacionais e instabilidades cisalhantes.

Em situações propiciadas pelo ser humano podemos observar correntes de densidade, por exemplo, na fabricação de vidros quando o material fundido escoar sobre o molde, nos escapamentos dos automóveis ou até mesmo na implosão de estruturas (Figura 1.1c) (UNGARISH, 2009). O primeiro estudo quantitativo de uma corrente de densidade foi realizado por Theodore von Kármán em 1940 motivado pela demanda do exército americano em avaliar sobre quais circunstâncias de vento um gás venenoso liberado no campo de batalha iria propagar-se apenas em direção às tropas inimigas, sem causar danos às tropas aliadas (HUPPERT, 2006).

De uma maneira geral, os escoamentos gerados por estes fenômenos possuem uma região frontal chamada de cabeça, e duas regiões posteriores chamadas de corpo e cauda (HACKER et al., 1996; MEIBURG; KNELLER, 2010), conforme mostrado na Figura 1.2. Durante a propagação de uma corrente de densidade, a região frontal possui heterogeneidades resultantes do entranhamento de fluido ambiente na corrente. Tais he-



Figura 1.1 – Exemplos de correntes de densidade que podem ocorrer na natureza (a) e (b) e que podem ser causadas por ações antrópicas (c).

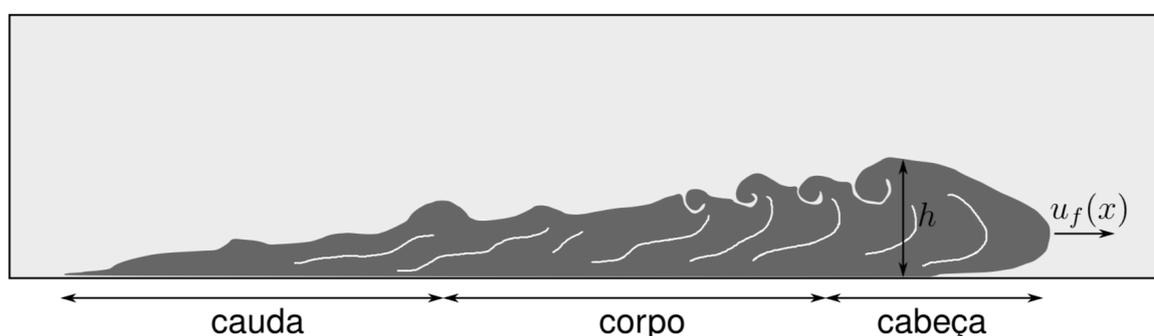


Figura 1.2 – Exemplo da anatomia de uma corrente de densidade com altura h se propagando com velocidade u_f . Fonte: Francisco (2018).

terogeneidades são, comumente, conhecidas como estruturas de lobos e fendas e em muitos casos são responsáveis por deixar “assinaturas” características do escoamento, por exemplo, a forma dos depósitos de sedimentos observados nas bacias de hidrocarbonetos (MEIBURG; KNELLER, 2010).

O estudo de correntes de densidade vem ganhando espaço nos últimos anos em diferentes áreas do conhecimento como geologia, oceanologia, meteorologia, engenharia, entre outras (HACKER et al., 1996; HUPPERT, 2006; MEIBURG; KNELLER, 2010). Este aumento de interesse no estudo destes fenômenos está associado ao grande alcance das aplicações, desde a previsão de impacto de desastres ambientais, estudos de dispersão de poluentes até otimização de processos de manufatura. Porém muitas vezes é muito custoso ou até mesmo inviável realizar a construção de bancadas experimentais ou a instrumentação destes fenômenos. Neste contexto a modelagem matemática e ferramentas computacionais tornam-se relevantes no auxílio da compreensão dos mecanismos físicos presentes correntes de densidade, assim como a abertura da possibilidade de colocar hipóteses a prova devido a grande riqueza dos dados gerados.

A modelagem matemática de correntes de densidade permite a obtenção de informações detalhadas do escoamento que nem sempre são possíveis por meio de abordagens experimentais e observações de campo. Este tipo de abordagem também permite realizar análises da sensibilidade do fenômeno a diferentes mecanismos de maneira iso-

lada, uma vez que as hipóteses de formulação do problema matemático podem ser arbitradas. Porém devido à natureza complexa dos problemas matemáticos associados à mecânica de fluidos (equações de Navier-Stokes), sua resolução esta geralmente aliada a métodos numéricos e o uso de ferramentas computacionais. Neste contexto a modelagem matemática possui limitações relativas ao custo computacional de uma simulação que pode ser quantificado, de uma maneira simples, em termos de tempo de processamento e espaço de armazenamento de dados.

Existem muitos fatores que podem levar uma simulação numérica aos limites dos recursos computacionais, podendo ser destacado a ordem de grandeza dos valores assumidos pelo número de Reynolds (relação entre forças inerciais e forças viscosas do escoamento) e o tamanho do domínio de calculo. Com a finalidade de obter um melhor aproveitamento dos recursos computacionais disponíveis, existem diversas abordagens disponíveis na literatura que minimizam o impacto de elevados valores do número de Reynolds no custo computacional de uma simulação numérica, por exemplo a Simulação de Grandes Escalas (LES). Alternativamente, é possível propor transformações no sistema de coordenadas com a finalidade simular apenas uma região de interesse do escoamento e conseqüentemente minimizar o tamanho do domínio de calculo.

Por fim, este trabalho propõe abordagens para realizar simulações numéricas, baseadas na resolução das equações de Navier-Stokes, com um domínio de calculo reduzido buscando a obtenção de mais informações a respeito do desenvolvimento das estruturas de lobos e fendas presentes na região frontal de uma corrente de densidade.

2 Objetivos

O objetivo primário deste trabalho é inicialmente formular um modelo matemático, baseado em transformação galileana do sistema de coordenadas, que permite realizar a simulação da cabeça de correntes de densidade em estado estacionário e posteriormente proporcionar uma reflexão mais detalhada a respeito da origem das estruturas de lobos e fendas. As simulações resultantes deste modelo matemático são realizadas por meio de Simulação Numérica Direta (DNS) e Simulação de Grandes Escalas (LES) utilizando o código computacional `Incompact3D`, enquanto que a origem das estruturas de lobos e fendas é tratada com a Teoria da Estabilidade Linear. Seguindo nesta linha de pesquisa, o trabalho levanta as questões:

“Existe a possibilidade de formular um modelo matemático reduzido que reproduz a dinâmica da cabeça de uma corrente de densidade e permita realizar simulações em períodos de tempo arbitrários?”

“Como se comporta a cabeça de uma corrente de densidade em tempos suficientemente longos?”

“Quais são os mecanismos associados a origem das estruturas de lobos e fendas?”

Também foi estipulado como objetivo secundário determinar a eficiência de mistura irreversível em correntes de densidade baseado na abordagem da partição de energia potencial ([LORENZ, 1955](#)), levantando a questão:

“Qual é a eficiência de mistura global de correntes de densidade na configuração de escoamento referida como *lock-exchange*?”

2.1 Objetivos específicos

Com a finalidade de responder as questões levantadas pelos objetivos, surgem objetivos específicos:

- Formular matematicamente uma configuração de escoamento baseada em um referencial móvel;
- Adaptar o código computacional `Incompact3d` para a nova configuração de escoamento;

- Buscar soluções em estado estacionário nesta configuração de escoamento;
- Analisar a largura média das estruturas de lobos e fendas ao longo do tempo de desenvolvimento do escoamento;
- Analisar a região de estratificação instável da cabeça de uma corrente de densidade por meio da teoria da estabilidade linear;
- Analisar a distribuição energética do escoamento;
- Implementar os conceitos de mistura irreversível em uma ferramenta computacional.

3 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos básicos com o objetivo de facilitar a compreensão deste trabalho e também resultados já documentados na literatura que servirão de base para a comparação com os resultados obtidos. Inicia-se com a descrição de correntes de densidade contendo classificações relativas ao excesso de massa específica e aos mecanismos de iniciação deste fenômeno, com destaque para configuração de escoamento conhecida como *lock-release*. Posteriormente é descrito a anatomia de uma corrente de densidade, as estruturas de lobos e fendas presentes na região frontal e os mecanismos de mistura irreversível presentes neste escoamento. Finalmente apresenta-se a definição de ferramentas matemáticas e numéricas empregadas no trabalho, incluindo a teoria da estabilidade linear, simulação numérica direta e simulação de grandes escalas.

3.1 Correntes de densidade

Conforme descrito anteriormente, as correntes de densidade são fenômenos que ocorrem tanto na natureza quanto em situações antrópicas e são caracterizados pelo escoamento relativo entre dois fluidos (com diferentes massas específicas) devido à variações de forças de empuxo. Geralmente estes fenômenos são classificados em relação ao excesso de massa específica e ao mecanismo de iniciação.

Considerando uma corrente de densidade, com massa específica ρ_1 , escoando em um fluido ambiente com massa específica ρ_0 , podemos classificar o escoamento a partir da diferença das massas específicas formalmente definida como $\Delta\rho = \rho_1 - \rho_0$. Quando ρ_0 é aproximado como constante, de acordo com [Mulder e Alexander \(2001\)](#), é dito que:

- $\Delta\rho = 0$: Escoamento homopical (Figura [3.1a](#));
- $\Delta\rho < 0$: Escoamento hipopical (Figura [3.1c](#));
- $\Delta\rho > 0$: Escoamento hiperpical (Figura [3.1c](#)).

Alternativamente, quando a massa específica do fluido ambiente possui uma estratificação tal que $\rho_{0,\min} < \rho_1 < \rho_{0,\max}$, o escoamento é definido como mesopical ou intrusivo (Figura [3.1b](#)). Correntes de densidade hipopicais resultam em um escoamento sobre o fluido ambiente e normalmente, em um contexto geofísico, são considerados mais importantes próximos da foz de rios onde ocorre a dispersão de sedimentos ([MULDER; ALE-](#)

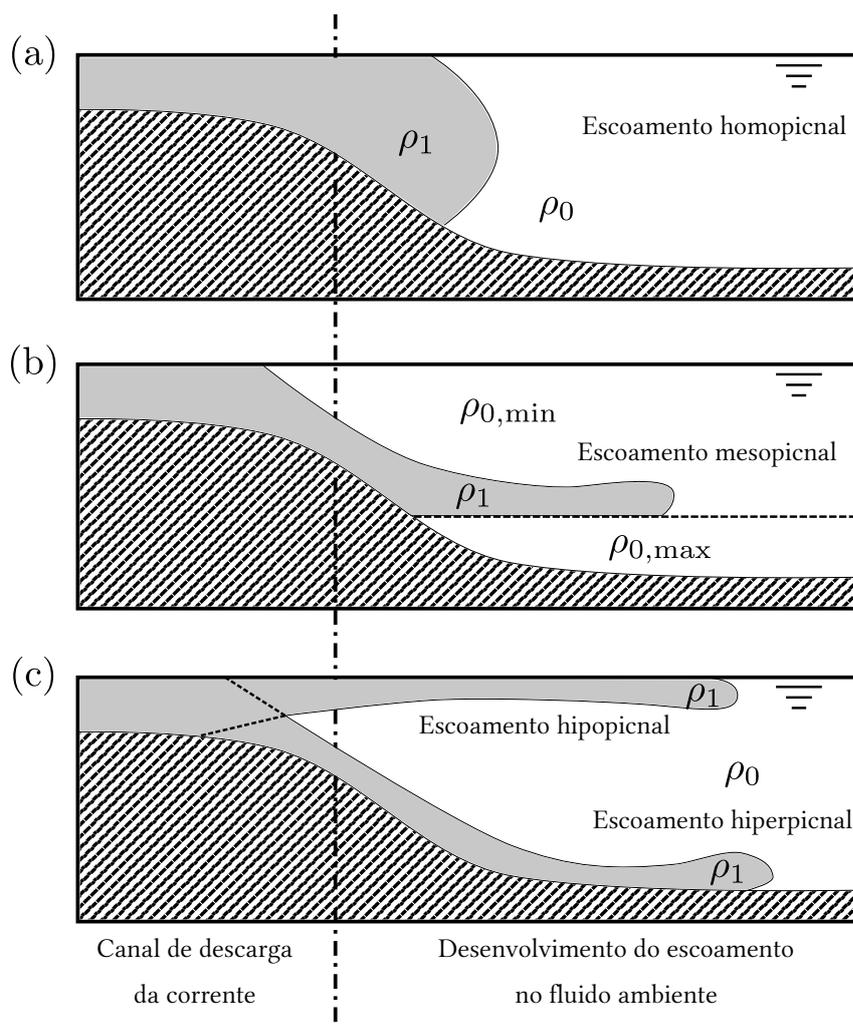


Figura 3.1 – Classificação de correntes de densidade em relação à $\Delta\rho$: escoamento homopícnal (a), escoamento mesopícnal (b), escoamentos hipopícnal e hiperpícnal (c). Adaptado de Mulder e Alexander (2001).

XANDER, 2001). Enquanto que correntes de densidade hiperpícnais são caracterizadas por um escoamento sob o fluido ambiente, correspondendo a correntes que interagem com o leito. O caso mesopícnal trata de um escoamento intermediário entre correntes hipopícnais e hiperpícnais. É importante constatar que esta classificação simplificada não é estática porque quando ocorre a interação entre os fluidos da corrente e ambiente, o valor de $\Delta\rho$ pode variar.

Além da classificação em relação ao valor de $\Delta\rho$, podemos classificar uma corrente de densidade em relação ao mecanismo de iniciação. Desta forma podemos ter dois grandes grupos de correntes de densidade: *remobilização não-instantânea de material* (Figuras 3.2b e 3.2d) e *remobilização instantânea de material* (Figuras 3.2a e 3.2c). Os escoamentos associados a remobilização não-instantânea de material, também chamados de *quasi-steady flow* (MULDER; ALEXANDER, 2001), são caracterizados pela alimentação contínua de material durante um determinado período de tempo. No con-

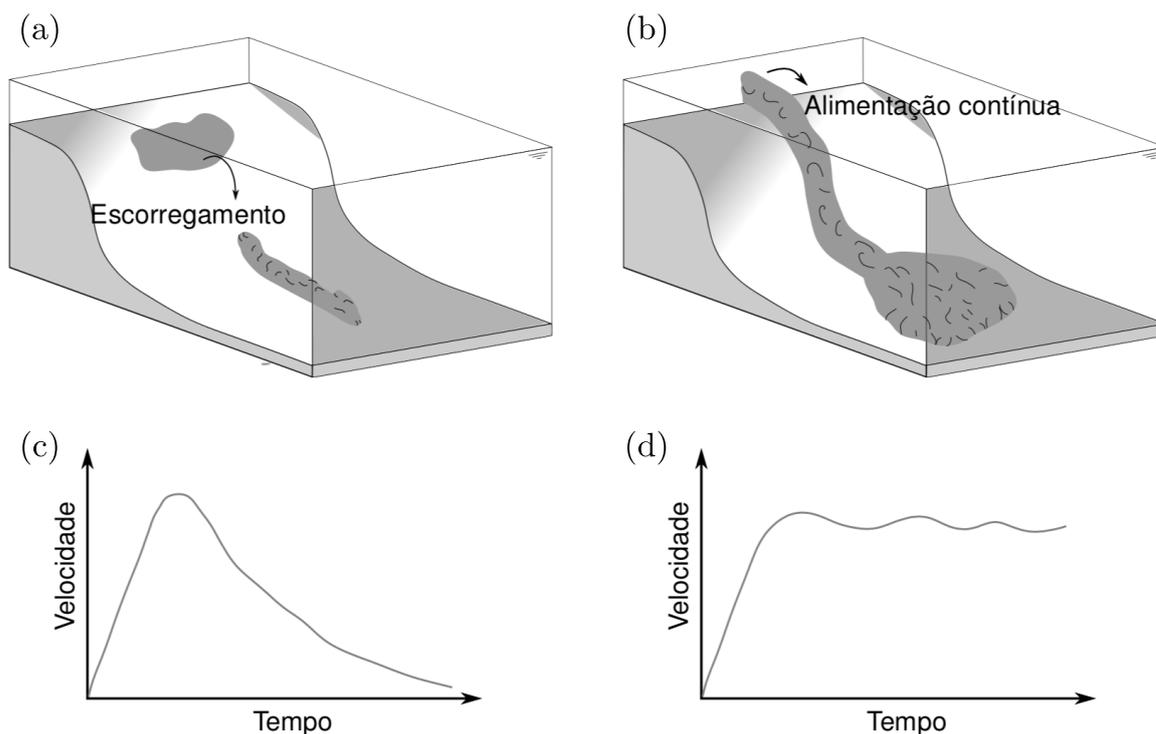


Figura 3.2 – Exemplo dos mecanismos de iniciação de correntes de densidade: *remobilização não-instantânea de material* (a) e (c) e *remobilização não-instantânea de material* (b) e (d) . Adaptado de [Francisco \(2018\)](#)

texto geofísico podem ser eventos que tem duração de horas, dias ou até mesmo anos, permitindo que o escoamento alcance uma velocidade constante. Enquanto que os escoamentos resultantes de uma remobilização instantânea de material, conhecidos como *surge-like flow* ([MULDER; ALEXANDER, 2001](#)), são definidos pelo deslocamento de uma quantidade finita de material e comportam-se como resposta à um pulso quando analisados ao longo do tempo. Neste caso, o escoamento tem como características uma rápida aceleração seguida por um decaimento da velocidade.

3.1.1 A configuração *Lock-release*

A abordagem mais simples empregada no estudo de correntes de densidade é baseada na reprodução de eventos de remobilização instantânea de material e consiste na liberação instantânea de um volume fixo de um fluido com uma determinada massa específica em um fluido ambiente com menor massa específica por meio da retirada de uma placa que inicialmente mantém ambos fluidos separados. Esta abordagem é conhecida da literatura como correntes de densidade *lock-release* e vem sendo estudada tanto experimentalmente quanto numericamente. Normalmente é empregada para estudar escoamentos hiperpicnais usando sedimentos em suspensão ou sal dissolvido como agente que promove a diferença de massa específica entre os dois fluidos, porém há registros na literatura de autores que empregaram a abordagem *lock-release* para estu-

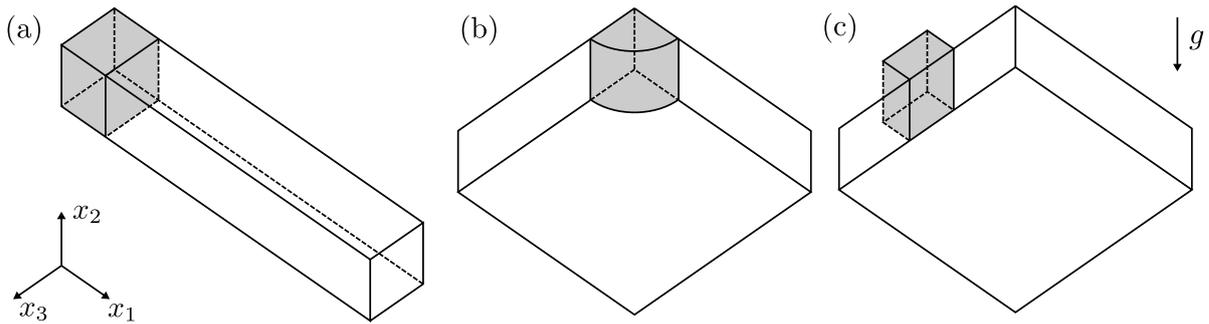


Figura 3.3 – Diferentes condições iniciais empregadas no estudo de correntes de densidade *lock-release* hiperpicnais: configuração canalizada (a), configuração cilíndrica (b) e configuração canal/bacia (c).

dar escoamentos hipopícnais (PARSONS et al., 2001) e mesopícnais (CHEONG et al., 2006). A forma de propagação do escoamento resultante está associada à condição inicial do fluido confinado, sendo mais comum o emprego de configurações canalizadas (SIMPSON, 1972; HACKER et al., 1996; SHER; WOODS, 2015), axi-simétricas (CANTERO et al., 2007; ZGHEIB et al., 2015) e de canal/bacia (FRANCISCO et al., 2018). É usual em configurações canalizadas a nomenclatura *lock-exchange* para tratar de uma corrente de densidade *lock-release* quando ambos fluidos possuem o mesmo volume.

Em configurações canalizadas (Figura 3.3a) o fluido está inicialmente confinado entre as paredes de um canal e quando o escoamento é iniciado observa-se variações mais importantes de velocidade e de massa específica nas direções vertical e de propagação do escoamento. Enquanto que em configurações cilíndricas (Figura 3.3b, representa um quarto do domínio correspondente) o fluido está inicialmente confinado em um cilindro e quando o escoamento é iniciado, forma-se uma corrente de densidade que se propaga de forma circular onde é observado variações mais importantes de velocidade e de massa específica nas direções vertical e radial. Já em configurações canal/bacia (Figura 3.3c), o fluido é inicialmente confinado em um pequeno canal e quando o escoamento é iniciado a corrente de densidade resultante é liberada em uma região não-confinada, resultando em um escoamento onde todas as direções possuem variações importantes de velocidade e massa específica.

Inicialmente o problema de correntes de densidade *lock-release* foi estudado em configurações canalizadas, devido a sua menor complexidade na análise dos dados adquiridos. Os primeiros questionamentos foram direcionados para a determinação da velocidade de propagação da frente de uma corrente de densidade em função da variação de massa específica inicial. Foi determinada uma velocidade potencial (KáRMÁN, 1940), referida na literatura como velocidade de *buoyancy* e normalmente denotada como \tilde{u}_b ¹, que fornece uma ideia de ordem de grandeza das velocidades associadas a um escoamento originado por uma configuração *lock-release*. Esta velocidade pode ser determi-

¹ • representa grandezas dimensionais.

nada assumindo que para uma determinada coluna de fluido com altura \tilde{H} , volume \tilde{V} , área de seção longitudinal \tilde{A} e massa específica com um acréscimo de $\Delta\rho$ em relação a massa específica do fluido ambiente ρ_0 , existe uma conversão total de energia potencial em energia cinética na forma:

$$\underbrace{\tilde{A} \int_0^{\tilde{H}} g \Delta\rho \tilde{x}_2 d\tilde{x}_2}_{\text{Energia potencial}} = \underbrace{\frac{1}{2} \tilde{V} \rho_0 \tilde{u}_b^2}_{\text{Energia cinética}}, \quad (3.1)$$

onde g é a aceleração da gravidade e \tilde{x}_2 é a coordenada vertical. Realizando a integração da energia potencial e isolando a velocidade de flutuação, podemos determinar esta velocidade potencial em função da aceleração da gravidade, a altura da coluna de fluido, a massa específica do fluido ambiente e o acréscimo de massa específica em relação ao fluido ambiente:

$$\tilde{u}_b = \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_0} g \tilde{H}}. \quad (3.2)$$

Quando realizamos a adimensionalização aplicada a um problema do tipo *lock-release*, pelo menos dois grupos adimensionais associados ao valor característico de velocidade são incluídos na análise: o número de Reynolds (Re) que relaciona forças inerciais com forças viscosas e o número de Richardson (Ri) que relaciona energia potencial com energia cinética. Em problemas deste tipo é comum considerar a velocidade de flutuação e a altura da coluna de fluido mais denso como escalas características, resultando em números adimensionais na forma:

$$Re = \frac{\tilde{u}_b \tilde{H}}{\nu} = \frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_0} g \tilde{H}^3}, \quad e \quad Ri = \frac{\Delta\rho g \tilde{H}}{\rho_0 \tilde{u}_b^2} = 1, \quad (3.3)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido. Desta forma, o número de Reynolds possui todas as informações a respeito da coluna de fluido mais densa (\tilde{H} , $\Delta\rho$ e ρ_0) enquanto que o número de Richardson torna-se uma constante. Posteriormente [Kármán \(1940\)](#) determinou na configuração de canal que, quando é assumido um escoamento não-viscoso, a velocidade de propagação da frente de uma corrente de densidade (\tilde{u}_f) vale exatamente a metade da velocidade de flutuação ($\tilde{u}_f = \tilde{u}_b/2$). Porém em escoamentos reais a velocidade de propagação da frente é geralmente menor do que a metade da velocidade de flutuação, devido a efeitos de dissipação viscosa e mistura entre fluido da corrente e o fluido ambiente.

De acordo com [Cantero et al. \(2007\)](#), uma corrente de densidade produzida em problemas *lock-release* pode apresentar até três regimes dinâmicos que são classificadas de acordo com o comportamento da velocidade de propagação da frente ao longo do tempo. Estas fases dinâmicas possuem uma fraca dependência com a condição inicial do escoamento, podem ser consideradas como comportamentos auto-similares e

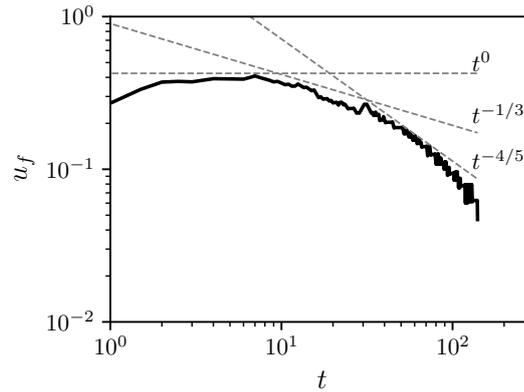


Figura 3.4 – Exemplo do comportamento da velocidade da frente de uma corrente de densidade em um canal em função do tempo, onde são observadas as diferentes fases dinâmicas. Adaptado de [Cantero et al. \(2007\)](#).

seguem uma determinada ordem: após uma rápida aceleração, a corrente de densidade se propaga com uma velocidade constante (referida como *slumping phase*); em um determinado tempo, chamado de tempo de *slumping*, se dá o início da fase inercial onde a velocidade de propagação da frente decresce na forma t^{-n} ; após um tempo suficientemente longo, a corrente entra no regime viscoso e a velocidade de propagação decresce na forma t^{-m} (com $m > n$). Os coeficientes n e m , são constantes que dependem da geometria inicial do fluido confinado (canal, axi-simétrico, etc). A Figura 3.4 sumariza o comportamento da velocidade de propagação de uma corrente de densidade produzida pela configuração *lock-release* em um canal, onde observa-se a passagem do escoamento pelas três fases dinâmicas. Neste caso, os coeficientes n e m possuem valores consensuais na literatura, valendo $1/3$ e $4/5$ respectivamente.

A quantificação do tempo de *slumping* em configurações *lock-release* canalizadas vem sendo discutida na literatura há algum tempo. Dentre vários trabalhos neste tópico pode-se destacar a equação proposta por [Marino et al. \(2005\)](#), que consiste em determinar este instante de tempo a partir dos parâmetros do problema. Esta equação proposta possui à forma

$$\tilde{t}_s = \left(\frac{2\xi}{3\tilde{u}_{f,s}} \right)^3 \tilde{x}_{f,0}, \quad (3.4)$$

onde $\tilde{x}_{f,0}$ é o comprimento do canal ocupado pelo fluido mais denso (alternativamente pode ser interpretado como a posição inicial da frente da corrente de densidade), $\tilde{u}_{f,s}$ é a velocidade média da frente da corrente durante a fase de *slumping* e ξ é uma constante a ser ajustada. Em seu trabalho, [Marino et al. \(2005\)](#) estimou que esta constante assumi valores no intervalo $1,35 \leq \xi \leq 1,8$. Em uma investigação mais recente, [Cantero et al. \(2007\)](#) determinou que $\xi = 1,47$ produz o melhor ajuste da Eq. (3.4) quando alimentada com valores de $\tilde{u}_{f,s}$ medidos em função do número de Reynolds.

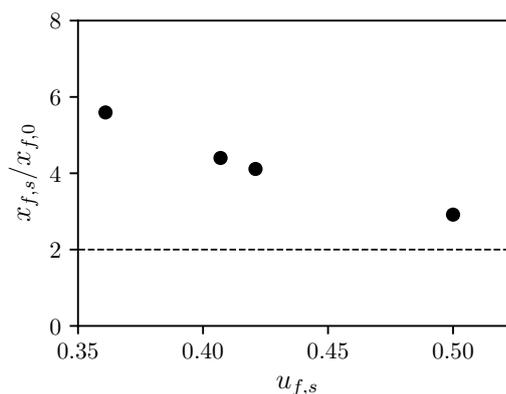


Figura 3.5 – Alcance da corrente de densidade no tempo de *slumping* normalizada pelo comprimento da parcela do canal ocupado pelo fluido mais denso em função da velocidade média da frente, onde a linha tracejada representa o comprimento do canal em configurações *lock-exchange*.

O emprego da Eq. (3.4) fornece uma boa estimativa de qual seria o alcance de uma corrente de densidade durante a fase de *slumping*, na forma $\tilde{x}_{f,s} = \tilde{u}_{f,s} \times \tilde{t}_s$. Quando aplica-se os dados disponíveis no trabalho de [Cantero et al. \(2007\)](#) para estimar esta distância percorrida, é possível concluir que configurações *lock-exchange* sempre produzem escoamentos com velocidade de propagação da frente constante porque o alcance da fase de *slumping* é maior do que o comprimento do canal, conforme observado na Figura 3.5.

3.1.2 A anatomia de uma corrente de densidade e as estruturas de lobos e fendas

Após o desenvolvimento inicial do escoamento são observadas diferentes regiões internas que possuem características hidrodinâmicas e funções no transporte do fluido da corrente distintas. Conforme o exemplo de uma corrente de densidade hiperpical apresentado pela Figura 3.6, existe uma região frontal chamada de cabeça e a montante outra região referida como o corpo da corrente. Alguns autores também se referem a outra região a jusante do corpo como a cauda da corrente de densidade, que é geralmente descrita como a interface posterior da corrente de densidade com o fluido ambiente ([HACKER et al., 1996](#)).

A cabeça da corrente, já estudada experimentalmente ([SIMPSON, 1972](#); [SIMPSON; BRITTER, 1979](#); [GARCÍA; PARSONS, 1996](#); [NOGUEIRA et al., 2014](#)), teoricamente ([ALLEN, 1971](#)) e numericamente ([HÄRTEL et al., 2000](#)), é retratada como a região frontal da corrente que penetra no fluido ambiente e é responsável pela maior parcela do entranhamento de fluido ambiente na corrente. Este entranhamento de fluido ambiente está associado ao grande deslocamento de fluido na parte superior da cabeça, caracterizado por um forte gradiente de velocidade na direção vertical que promove o movi-

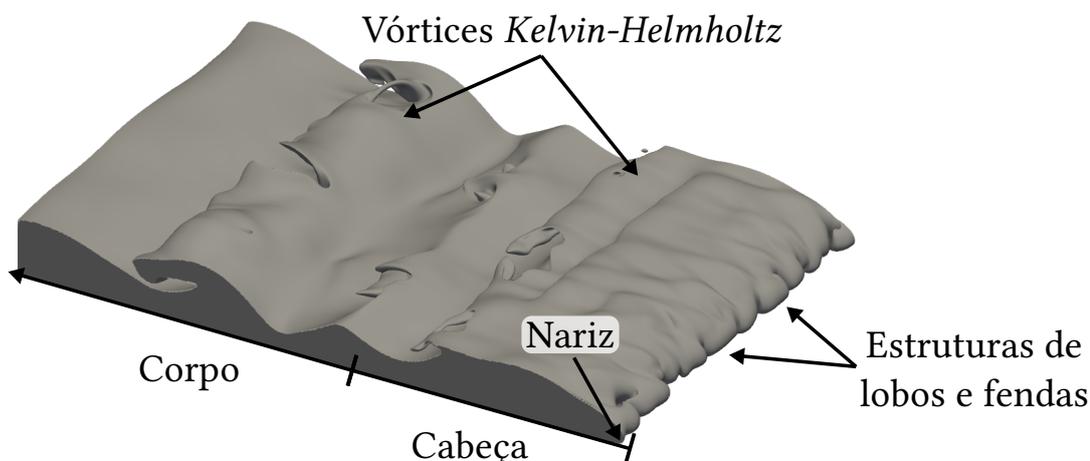


Figura 3.6 – Exemplo das regiões e estruturas presentes em uma corrente de densidade hiperpicnal.

mento de fluido na direção montante em relação à propagação do escoamento (HUGHES, 2016). Esta particularidade do escoamento propicia o crescimento de instabilidades cisalhantes que, geralmente, são observadas na forma de vórtices *Kelvin-Helmholtz* (SIMPSON, 1999). O ponto mais a jusante da cabeça é chamado de nariz, quando o leito está associado à uma condição de deslizamento livre o nariz da corrente coincide com o leito. Enquanto que no caso de uma condição de não-deslizamento ocorre um descolamento do nariz em relação ao leito (BRITTER; SIMPSON, 1978; SIMPSON; BRITTER, 1979) e tendo como consequência a formação de uma região instavelmente estratificada na cabeça da corrente com a possibilidade do desenvolvimento de instabilidades gravitacionais (SIMPSON, 1972).

Além do desenvolvimento de instabilidades cisalhantes, o entranhamento de fluido ambiente na cabeça de uma corrente de densidade pode causar heterogeneidades próximas ao nariz que se propagam na direção transversal à propagação do escoamento conhecidas como estruturas de lobos e fendas. Estas estruturas do escoamento caracterizam uma alternância de regiões de alto e baixo contraste de massa específica entre o leito e o nariz da corrente favorecendo a movimentação de fluido ambiente na parte inferior da corrente (SIMPSON, 1972). No caso de correntes de densidade transportando sedimentos em suspensão as estruturas de lobos e fendas são responsáveis por variações locais na altura do depósito, podendo causar variações topológicas no leito apenas por efeitos hidrodinâmicos (ESPATH et al., 2015).

Simpson (1972) buscou estabelecer relações quantitativas entre as diferentes escalas geométricas presentes na cabeça de uma corrente de densidade hiperpicnal canalizada. Para esta finalidade foram realizadas numerosas experiências empregando a configuração *lock-release* variando a altura do nível de água e a concentração de sal,

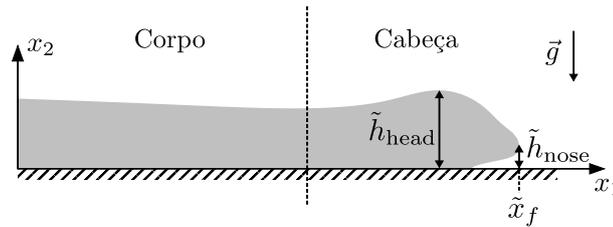


Figura 3.7 – Exemplo das das alturas da cabeça e do nariz de uma corrente de densidade. Adaptado de [Simpson \(1972\)](#)

onde foi medido a velocidade de propagação do escoamento (\tilde{u}_f), as alturas da cabeça e do nariz da corrente (\tilde{h}_{head} e \tilde{h}_{nose} respectivamente), conforme apresentado na Figura 3.7, e comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas ($\tilde{\lambda}$). Para cada experiência foi determinado a relação entre as alturas do nariz e da cabeça, a relação entre largura média das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça e o número de Reynolds associado a cabeça da corrente de densidade, determinado na forma:

$$Re_{\text{head}} = \frac{\tilde{u}_f \tilde{h}_{\text{head}}}{\nu}, \quad (3.5)$$

Finalmente foram propostas as seguintes leis de escala das relações entre os comprimentos característicos em função do número de Reynolds da cabeça da corrente:

$$\frac{\tilde{h}_{\text{nose}}}{\tilde{h}_{\text{head}}} = 0,61 Re_{\text{head}}^{-0,23 \pm 0,01}, \quad (3.6)$$

$$\frac{\tilde{\lambda}}{\tilde{h}_{\text{head}}} = 7,4 Re_{\text{head}}^{-0,39 \pm 0,02}. \quad (3.7)$$

Estas relações empíricas permitem concluir, dentro das limitações das experiências, que quanto maior é o valor o número de Reynolds, o nariz da corrente estará mais próximo do leito e menor é o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas.

3.2 Mistura irreversível

De acordo com diversos autores, a mistura irreversível de um escoamento estratificado pode ser definida como a parcela de energia fornecida pelo escoamento que é utilizada para misturar o campo de massa específica de maneira irreversível ([WINTERS et al., 1995](#); [PELTIER](#); [CAULFIELD, 2003](#)), sendo assim, essa mistura trata de um processo de transferência de energia. Ela é geralmente tratada como um processo que está associado as pequenas escalas do escoamento e, geralmente, a eficiência deste processo é empregada na formulação de modelos de difusividade mássica turbulenta ([OSBORN, 1980](#)).

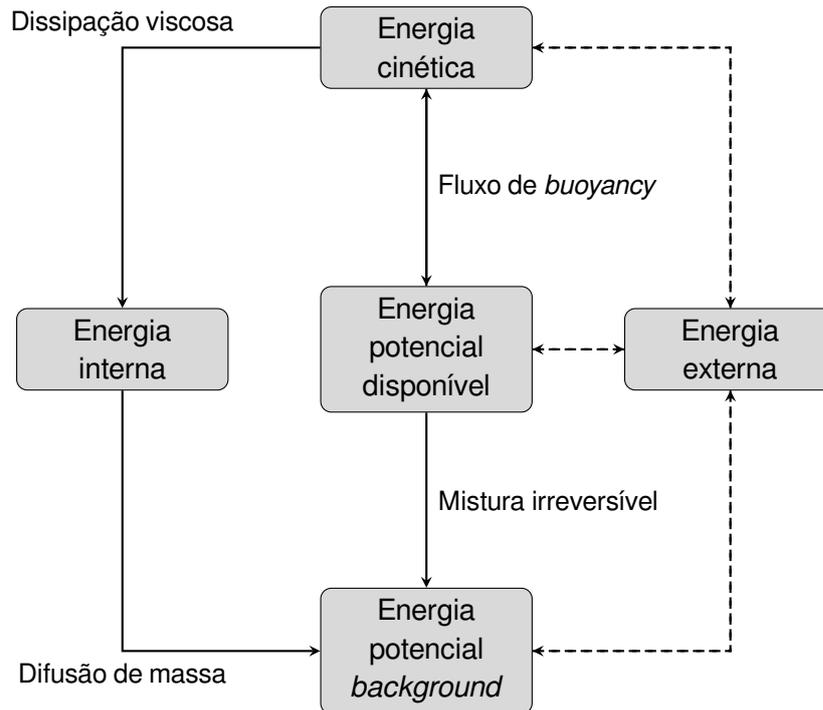


Figura 3.8 – Esquema simplificado dos reservatórios e transferências de energia em um escoamento estratificado. Adaptado de [Winters et al. \(1995\)](#).

A quantificação deste processo de transferência de energia é fundamentada na abordagem da partição de energia potencial introduzida por [Lorenz \(1955\)](#). Esta abordagem permite dividir a energia potencial de um escoamento estratificado em duas parcelas: disponível e *background*. Conforme descrito na literatura ([LORENZ, 1955](#); [WINTERS et al., 1995](#); [PELTIER; CAULFIELD, 2003](#)), a energia potencial disponível é a parcela de energia potencial que está, como sugere seu nome, disponível no escoamento para ser transformada em quantidade de movimento. Enquanto que a energia potencial *background* correspondente a um estado de energia potencial mínima alcançado por redistribuição adiabática da massa específica. Neste contexto a mistura irreversível é a transferência de energia potencial disponível para energia potencial *background*.

[Winters et al. \(1995\)](#) derivou, baseado na abordagem de partição da energia potencial, as equações de energia em um volume de controle qualquer para um escoamento estratificado empregando as hipóteses de escoamento incompressível, fluido newtoniano e pequenas variações de massa específica, resultando em um balanço de energia representado pela Figura 3.8. Nesta figura as caixas representam reservatórios de energia e as flechas descrevem as possíveis transferências de energia entre os reservatórios, onde as flechas possuem apenas um sentido trata-se transferências irreversíveis, as flechas com dois sentidos são transferências reversíveis e as linhas tracejadas correspondem aos fluxos de energia associados às superfícies do volume de controle. No caso de sistemas fechados, os fluxos de superfície são nulos e a energia externa é desconsiderada e, em função do fluxo de buoyancy ser a única transferência reversível de energia, é comum

tratar a soma de energia cinética e energia potencial disponível como o total de energia disponível no sistema. Desta forma, definiu-se a eficiência de mistura de irreversível (aqui denotada como η) como a relação entre as perdas de energia disponível por efeitos de mistura irreversível e todas as perdas de energia disponível (PELTIER; CAULFIELD, 2003):

$$\eta = \frac{\text{Mistura irreversível}}{\text{Mistura irreversível} + \text{Dissipação viscosa}}. \quad (3.8)$$

Na aplicação de correntes de densidade, Hughes e Linden (2016) realizaram experiências utilizando a configuração *lock-exchange* canalizada e sal em suspensão como agente que promove o contraste de massa específica, visando quantificar a eficiência de mistura desses escoamentos. Devido as limitações de seus experimentos foi proposto a quantificação da eficiência de mistura desconsiderando as variações de energia interna, resultando em uma relação entre variações de energia potencial *background* e variações de energia disponível. Variando o número de Reynolds associado a cabeça de corrente de densidade no intervalo $7,4 \times 10^3 \leq Re_{\text{head}} \leq 7,2 \times 10^4$, observou-se que a eficiência de mistura possui um comportamento assintótico com este parâmetro, alcançando o valor máximo de 0,08. Posteriormente foi proposto um modelo matemático simplificado que desconsidera os efeitos da cabeça da corrente de densidade e trata o escoamento como uma camada de mistura, originando-se uma relação da eficiência de mistura como função da declividade da dessa camada no ponto de inflexão normalizada pela altura do canal (δ_{ML}):

$$\eta = \frac{2\delta_{ML}^2}{3} \frac{1 - \frac{2\delta_{ML}}{3}}{\left(1 - \frac{\delta_{ML}}{2}\right)^2}. \quad (3.9)$$

A partir de seis medições experimentais variando o número de Reynolds, os autores encontraram um valor constante de $\delta_{ML} = 0,33$. Substituindo este valor de δ_{ML} na Eq. (3.9), encontra-se uma eficiência de mistura de 0,081, sugerindo que o valor da eficiência de mistura de uma corrente de densidade é dominado pela dinâmica associada ao corpo da corrente.

3.3 Teoria da estabilidade linear

De uma maneira geral, a transição de um escoamento do regime laminar para o regime turbulento está associada com uma instabilidade do escoamento laminar de referência. Sendo assim, pequenas perturbações crescem em amplitude extraindo energia do escoamento médio e geram estruturas coerentes com amplitude finita que, através de interações não-lineares, iniciam o processo de transição à turbulência (GENNARO;

RODRÍGUEZ, 2016). Em muitos casos as estruturas coerentes observadas em escoamentos turbulentos têm origem na instabilidade do escoamento de referência. Neste contexto, a teoria da estabilidade linear é uma ferramenta cujo emprego fornece uma melhor compreensão dos mecanismos físicos associados à uma estrutura coerente, além de servir de base para a construção de modelos teóricos e modelos reduzidos (GENNARO; RODRÍGUEZ, 2016; LOISEAU et al., 2019).

O estudo da instabilidade, baseado na teoria da estabilidade linear, é geralmente fundamentado em analisar o comportamento do escoamento após a introdução de perturbações com amplitude infinitesimal, permitindo a linearização das equações governantes do problema. Em casos mais específicos quando se assume a homogeneidade das equações linearizadas em respeito ao tempo, é possível atribuir comportamento exponencial nas perturbações, transformando as equações em um problema de autovalores/autovetores (GENNARO; RODRÍGUEZ, 2016).

A maior parte dos conceitos utilizados na teoria da estabilidade linear têm sido herdados ou desenvolvidos em conjunto com a teoria matemática de sistemas dinâmicos. Neste contexto, um sistema dinâmico é estabelecido por um sistema de equações diferenciais, onde o estado do sistema é definido por um vetor q_i que contém todas as variáveis do problema e satisfaz as equações governantes do problema. É dito que um estado de referência \bar{q}_i é estável, no sentido de Lyapunov, se após a introdução de uma perturbação q'_i qualquer retorna a seu estado original, caso contrário o estado de referência é instável (GENNARO; RODRÍGUEZ, 2016). Na análise de escoamentos o vetor q_i é composto por velocidade, pressão e outras grandezas escalares como, por exemplo, a temperatura e a salinidade, e o estado de referência \bar{q}_i é chamado de escoamento de base.

De uma maneira geral, as equações que descrevem o comportamento das perturbações derivam da linearização das equações governantes do problema. Este procedimento é realizado introduzindo uma decomposição das variáveis do problema em estado de referência e perturbação na forma:

$$q(x_j, t) = \bar{q}(x_j) + q'(x_j, t), \quad (3.10)$$

sendo x_j o sistema de coordenadas e t o tempo. Supondo que a amplitude da perturbação é infinitesimal ($|q'| \ll 1$) e que o estado de referência é uma solução das equações, desconsideram os termos não lineares por análise de ordem de grandeza. As perturbações podem ser classificadas em dois grandes grupos em relação ao seu comportamento temporal: não-modais e modais. Perturbações não-modais descrevem o crescimento ou decrescimento transiente e estão associadas ao estudo de dinâmicas de tempo curto e matematicamente correspondem a problemas de valor inicial (SCHMID, 2007; SCHMID; BRANDT, 2014). Enquanto que perturbações modais representam o cresci-

mento/decrescimento assintótico (ou exponencial), estando relacionadas ao estudo de dinâmica de tempo longo (onde o transiente inicial é desprezado) e são matematicamente descritas por problemas de autovalores/autovetores generalizados (DRAZIN; REID, 2004; JUNIPER et al., 2014).

O estado referência para um escoamento é descrito, na literatura Loiseau et al. (2019), como uma solução laminar das equações de Navier-Stokes invariante no tempo. No contexto do estudo da cabeça de uma corrente de densidade hiperpicnal em configuração *lock-exchange* não há nenhum trabalho que propôs um escoamento de base que satisfaz esta descrição, uma vez que o escoamento resultante de tal condição inicial é transiente. Em uma tentativa de caracterizar as estruturas de lobos e fendas em termos de uma instabilidade do escoamento, Härtel et al. (2000) realizaram análises de estabilidade linear com perturbações modais adotando uma média temporal de simulações numéricas da cabeça da corrente em um referencial móvel como escoamento de base. Embora tenham encontrado resultados de comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas que estão de acordo com o trabalho de Simpson (1972), de acordo com Sipp e Lebedev (2007) e Loiseau et al. (2019), esta abordagem pode levar a resultados equivocados, uma vez que a média temporal de um escoamento turbulento não é equivalente a um escoamento de base.

Em uma investigação mais recente, Xie et al. (2019) consideraram que o desenvolvimento das instabilidades hidrodinâmicas que resultam nas estruturas de lobos e fendas estão associadas apenas a estratificação instável do nariz da corrente e, desprezando o campo de velocidades, assumiram campos instantâneos de massa específica como escoamento de base. Esta abordagem permitiu aos autores formular um modelo simplificado que como resultado expressa a largura de uma estrutura de lobos (λ) e fendas em função do número de Reynolds (Eq. 3.3) e do número de Schmidt (Sc):

$$\lambda = 2\pi \left\{ \frac{2}{Re^2} \left[2 \left(1 + \frac{1}{Sc} \right) + \sqrt{4 \left(1 + \frac{1}{Sc} \right)^2 - 3} \right]^2 - 1 \right\}^{1/3}. \quad (3.11)$$

Conforme observado, no estudo de instabilidades na cabeça de correntes de densidade não existe consenso na escolha de um escoamento de base. Porém todos os resultados presentes na literatura sugerem que, de fato, há uma conexão direta entre o mecanismo de estratificação instável no nariz da corrente com o desenvolvimento das estruturas de lobos e fendas por meio de instabilidades gravitacionais.

3.4 Simulação numérica direta e simulação de grandes escalas

Uma característica presente em escoamentos nas mais diversas aplicações é a turbulência. Até o momento, não há uma definição global e exata para a turbulência porém, de acordo com [Lesieur \(2008\)](#), escoamentos turbulentos possuem padrões que se repetem em diferentes configurações. Geralmente, escoamentos turbulentos são tridimensionais, instáveis, dissipativos e apresentam flutuações (em torno de uma média) que são vistas como um movimento caótico contendo estruturas coerentes. A turbulência também pode ser interpretada como uma componente rotacional do escoamento que atua em grande espectro de escalas de comprimento e tempo. Os grandes vórtices estão associados às baixas frequências enquanto que os pequenos vórtices às altas frequências. Os grandes vórtices são instáveis e podem se reduzir a pequenos vórtices, que podem se reduzir a vórtices menores ainda e assim sucessivamente. Este fenômeno está associado a uma transferência de energia entre as diferentes escalas do escoamento, configurando uma cascata de energia no espaço espectral. Desta forma, energia do escoamento média extraída pelos grandes vórtices é posteriormente dissipada pelos pequenos vórtices. Finalmente, por serem o meio de extração de energia do escoamento médio, os grandes vórtices são aqueles que possuem as maiores parcelas de energia associada a turbulência do escoamento.

Com base nestes padrões de transferência de energia entre as escalas do escoamento, as simulações computacionais objetivam encontrar soluções numéricas das equações de Navier-Stokes que de alguma forma leve em consideração todas as escalas do escoamento ou pelo menos uma parcela importante de escalas. No contexto de considerar todas as escalas do escoamento, é pertinente questionar “Qual seria a menor escala do escoamento?”. A teoria de Kolmogorov, baseada em uma hipótese e combinada com pressupostos de análise dimensional e observações experimentais se propõe a responder este questionamento. Conforme demonstrado por [Möller e Silvestrini \(2004\)](#), a ordem de magnitude das menores escalas de comprimento de um escoamento, referida como escala de Kolmogorov e denotada por η , pode ser aproximada na forma:

$$\eta \approx \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon'} \right)^{1/4}, \quad (3.12)$$

onde ε' é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta.

No presente estudo, são utilizadas duas abordagens na realização das simulações computacionais: Simulação Numérica Direta, ou na língua inglesa *Direct Numerical Simulation* (DNS), e Simulação de Grandes Escalas, ou na língua inglesa *Large Eddy Simulation* (LES). A primeira tem como objetivo resolver todas as escalas do escoamento (Figura 3.9), fornecendo um maior detalhamento dos resultados e uma solução numérica que é tida como mais próxima possível da solução exata das equações ([LESIEUR, 2008](#)).

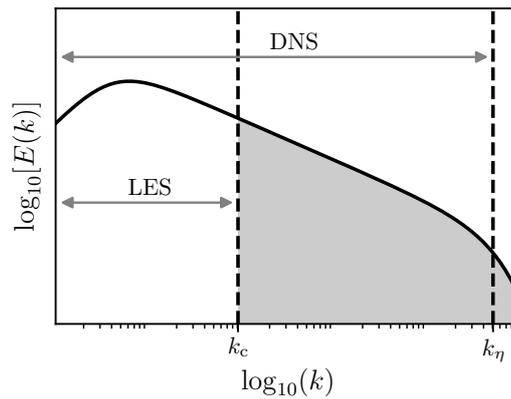


Figura 3.9 – Exemplo da distribuição de energia cinética $E(k)$ em função do número de onda associado às escalas do escoamento k . Sendo k_c é o número de onda de corte arbitrário, k_η é o número de onda associado a escala de Kolmogorov e a área preenchida corresponde à quantidade de energia não resolvida pela abordagem de simulação de grandes escalas.

Em função dessas características, uma Simulação Numérica Direta requer um número de graus de liberdade da malha de cálculo maior, quando comparada a outras abordagens, o que aumenta consideravelmente o custo computacional de uma simulação e limita a sua aplicação. Enquanto que na abordagem de Simulação de Grandes Escalas, as escalas do espectro de turbulência são resolvidas até um número de onda de corte arbitrário k_c (Figura 3.9). A energia correspondente a números de onda maiores do que k_c , podem ser tratados de diversas formas, por exemplo filtros combinados com modelos sub-malha que descrevem o comportamento da cascata de energia ou até mesmo o aporte de dissipação artificial com a finalidade de desconsiderar as menores escalas do escoamento. Estas características permitem reduzir o número de graus de liberdade da malha de cálculo necessários para realizar uma simulação, implicando em menores custos computacionais o que aumenta as possibilidades de aplicação porém os resultados obtidos tem um menor detalhamento (FRANTZ, 2018).

4 Metodologia

Este capítulo possui uma descrição da metodologia empregada nesse trabalho, incluindo a formulação dos modelos matemáticos utilizados, os pós-processamentos para o tratamento de dados adquiridos para a obtenção de grandezas de interesse, os métodos numéricos presentes nas ferramentas computacionais e o código computacional adotado para a realização das simulações.

4.1 Formulação matemática do problema

Nesta seção é descrito a formulação das configurações de escoamento consideradas neste estudo, compostas pelas hipóteses simplificadoras, equações gerais, condições de contorno e condição inicial. Primeiramente é descrito o problema *lock-exchange*, que foi utilizado como base na formulação do modelo proposto para estudar especificamente a cabeça de uma corrente de densidade em estado de equilíbrio. Posteriormente é apresentado o modelo proposto para estudo da cabeça de uma corrente de densidade e finalmente as equações de estabilidade linear, que possuem o objetivo de fornecer informações a respeito da origem das estruturas de lobos e fendas.

Embora cada configuração de escoamento considerada neste estudo tenha suas particularidades, todas compartilham hipóteses simplificadoras de base. De uma maneira geral correntes de densidade, no contexto geofísico, são descritas como um escoamento estratificado em que a diferença de massa específica entre o escoamento e o fluido ambiente é causada por variações de temperatura, concentração salina (salinidade) ou sedimentos em suspensão (MEIBURG; KNELLER, 2010). Em razão destas variações de massa específica não estarem associadas com variações de pressão, correntes de densidade são geralmente tratadas como escoamentos incompressíveis. Normalmente, as diferenças de massa específica são consideradas pequenas permitindo o emprego da aproximação de Boussinesq.

A aproximação de Boussinesq é geralmente assumida no estudo de escoamentos estratificados em meios líquidos e propõe que podemos considerar as variações de massa específica associadas as forças de empuxo e desprezar as demais variações de massa específica (RIEUTORD, 2014). Desta forma quando utilizamos as equações de Navier-Stokes para descrever o movimento dos fluidos, as variações de massa específica ficam associadas apenas ao termo gravitacional.

Em seu estudo, Ruschel (2018) realizou simulações numéricas levando em consideração a variação das propriedades físicas dos fluidos em função da concentração

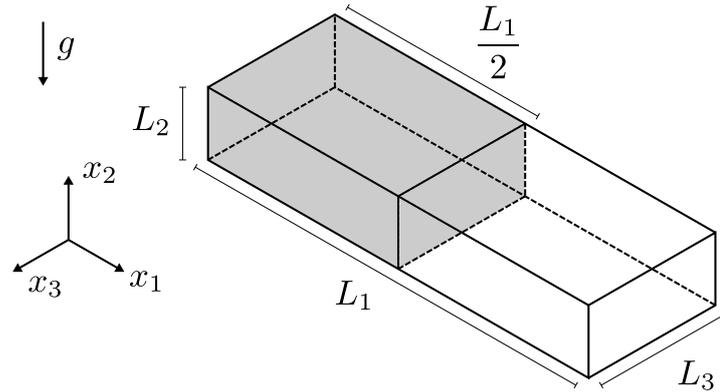


Figura 4.1 – Esquema da configuração inicial de uma corrente de densidade *lock-exchange*.

de uma grandeza escalar e foi constatado que no domínio das pequenas concentrações não há diferença significativa nas características de correntes de densidade. Estes resultados sugerem que o emprego da hipótese de fluido newtoniano e propriedades físicas contantes, além de simplificar o problema matemático, produzem resultados com boa fidelidade.

4.1.1 Formulação da configuração *lock-exchange*

A configuração *lock-exchange* é descrita como um caso específico de configurações *lock-release* canalizadas, onde tanto o fluido mais pesado quanto o fluido mais leve possuem o mesmo volume conforme o esquema apresentado na Figura 4.1. Neste esquema, o volume preenchido pela cor cinza representa o fluido mais pesado, x_2 a direção vertical, g o campo gravitacional, x_1 a direção de propagação da corrente de densidade resultante desta configuração e x_3 é a direção transversal à direção de propagação do escoamento.

Empregando as hipóteses de escoamento incompressível, fluido newtoniano e a aproximação de Boussinesq, uma corrente de densidade *lock-exchange* é matematicamente descrita pelo sistema de equações composto por equação da continuidade, equação da quantidade de movimento e equação de transporte escalar. Este sistema de equações pode ser adimensionalizado com as grandezas características do problema *lock-release* descrito anteriormente (\tilde{u}_b e \tilde{H}), na forma:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \varphi \delta_{2i}, \quad (4.1b)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (4.1c)$$

onde t é o tempo, x_i o sistema de coordenadas (conforme a Figura 4.1), u_i o campo de velocidades, p a pressão, φ uma concentração escalar, δ_{ij} o delta Kronecker, Re o número de Reynolds (Eq. 3.3) e Sc o número de Schmidt. O número de Schmidt relaciona a difusividade de quantidade de movimento (viscosidade cinemática) com a difusividade de massa:

$$Sc = \frac{\nu}{\kappa}, \quad (4.2)$$

onde κ é o coeficiente de difusão mássica que representa a facilidade com que um soluto se move em um solvente. Em problemas em que a quantidade φ representa uma variação de temperatura, o número de Schmidt é substituído pelo número de Prandtl. É importante constatar que o número de Richardson nesta configuração (Eq. 3.3), devido a escolha das escalas características, é reduzido à unidade e em função desta particularidade é omitido do termo gravitacional na equação da quantidade de movimento.

Neste estudo, foi considerado para o campo de velocidades condição de contorno de não-deslizamento nas posições $x_2 = 0$ e $x_2 = L_2$, condição de contorno de deslizamento livre nas posições $x_1 = 0$ e $x_1 = L_1$ e periodicidade na direção x_3 . Enquanto que para o campo escalar foi considerado condição de contorno de fluxo nulo nas posições $x_1 = 0$, $x_1 = L_1$, $x_2 = 0$ e $x_2 = L_2$ e condição de contorno periódica na direção x_3 . É comum, na literatura, o emprego de condição de contorno deslizamento livre para o campo de velocidades no plano de topo do canal (CANTERO et al., 2007). Porém, existem incertezas nesta condição de contorno porque na prática há uma superfície livre (normalmente uma interface água/ar) e não consta na literatura nenhum estudo que procurou estabelecer a condição de contorno mais adequada.

A condição inicial representada na Figura 4.1 é descrita numericamente com a função:

$$\varphi(x_i, t = 0) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{x_1 - x_{f,0}}{\delta} \right) \right], \quad (4.3)$$

onde $x_{f,0}$ é a posição inicial da frente (em casos *lock-exchange* $x_{f,0} = L_1/2$) e δ é a espessura da interface entre o fluido mais denso e o fluido mais leve. Conforme proposto no trabalho Espath et al. (2015), adota-se $\delta = (ReSc)^{-1/2}$ nas simulações desta configuração. O uso de uma função contínua no lugar de uma função degrau é necessário para evitar instabilidades numéricas na vizinhança de $x_1 = x_{f,0}$. Também utiliza-se uma perturbação inicial no campo de velocidades com o objetivo de diminuir o tempo necessário para o escoamento desenvolver estruturas tridimensionais. Em trabalhos anteriores (ES-

PATH et al., 2015), esta perturbação é imposta em todas as componentes do campo de velocidade na forma

$$u_i(x_i, t = 0) = \exp \left[- \left(\frac{x_1 - x_{f,0}}{\delta} \right)^2 \right] X_{\text{rand}}(x_i), \quad (4.4)$$

onde X_{rand} é um número aleatório cuja amplitude varia entre $-0,1$ e $0,1$ (ESPATH et al., 2015).

4.1.2 Modelo da Frente em Equilíbrio (MFE)

O Modelo da Frente em Equilíbrio (MFE) é baseado no acoplamento de um referencial móvel do tipo $x_1 - u_f t$ no escoamento, conforme apresentado na Figura 4.2. A velocidade de movimento do referencial é assumida constante e tem o mesmo valor da velocidade da frente da corrente de densidade. Tal abordagem seria o equivalente numérico dos experimentos de Simpson e Britter (1979) e García e Parsons (1996) em que é utilizado uma esteira no fundo do canal que se move no sentido contrario ao do escoamento. Esta transformação no sistema de coordenadas impacta as equações de quantidade de movimento e de transporte escalar apenas no termo de transporte e, sendo assim, o sistema de equações, que descreve matematicamente o problema, assumi a forma:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.5a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + (u_j - u_f \delta_{1j}) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \varphi \delta_{2i} \quad (4.5b)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + (u_j - u_f \delta_{1j}) \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (4.5c)$$

onde u_f é a velocidade da frente. O sistema de equações (4.5) é normalizado usando as mesmas escalas características do problema *lock-exchange* o que facilita as comparações entre os resultados obtidos usando ambas abordagens. Neste estudo a velocidade da frente é medida em simulações na configuração *lock-exchange* com mesmo número de Reynolds, porém também é possível utilizar dados disponíveis na literatura para atribuir um valor da velocidade frente adequado ao número de Reynolds de interesse.

As condições de contorno nesta configuração são mantidas as mesmas que no caso *lock-exchange* com exceção do plano ($x_1 = 0, x_2, x_3$). A partir de um balanço inte-

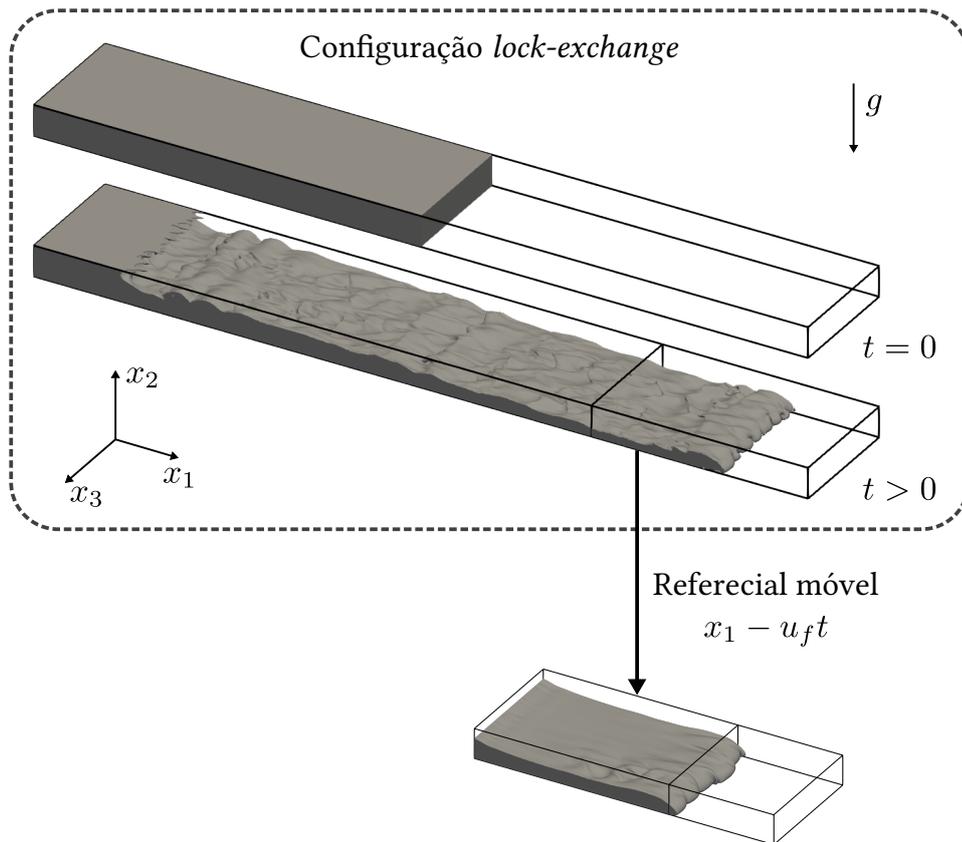


Figura 4.2 – Esquema da configuração de escoamento “Modelo da frente em equilíbrio”, primeiramente é apresentado a o desenvolvimento de uma corrente de densidade na configuração *lock-exchange* e posteriormente o referencial móvel utilizado na obtenção do modelo matemático proposto.

gral da equação da continuidade e aplicando as condições de contorno do problema é concluído que o perfil de velocidades de entrada deve satisfazer a seguinte condição:

$$\int_{\Gamma_{in}} u_{1,in} d\Gamma_{in} = 0, \quad (4.6)$$

onde Γ_{in} é a superfície correspondente ao plano $x_1 = 0$ e $u_{1,in}$ é o perfil de velocidades normal à esta superfície. Uma segunda condição é obtida a partir da integração da Eq. (4.5c) e assumindo que existe um estado de equilíbrio:

$$\int_{\Gamma_{in}} u_{1,in} \varphi_{in} d\Gamma_{in} = \int_{\Gamma_{in}} \left(u_f \varphi_{in} + \frac{1}{ReSc} \frac{\partial \varphi_{in}}{\partial x_1} \right) d\Gamma_{in}, \quad (4.7)$$

onde φ_{in} é o perfil de concentração na superfície Γ_{in} .

A condição descrita por Eq. (4.6) sugere que $u_{1,in}$ deve descrever tanto entrada quanto saída de fluido e satisfazer as condições de contorno nas direções vertical e per-

pendicular ao escoamento. Neste estudo, é adotado um perfil $u_{1,in}$ na forma:

$$u_{1,in}(x_2) = A_{in} \sin(2\pi x_2), \quad (4.8)$$

sendo A_{in} a amplitude do perfil. A distribuição de concentração na entrada é assumida na forma:

$$\varphi_{in}(x_2) = \frac{1}{2} [1 - \tanh(2\pi x_2 - \pi)]. \quad (4.9)$$

Aplicando as funções $u_{1,in}$ e φ_{in} na Eq. (4.7), pode-se calcular a amplitude do perfil de velocidades na entrada:

$$A_{in} = \frac{\int_{\Gamma_{in}} \left(u_f \varphi_{in} + \frac{1}{ReSc} \frac{\partial \varphi_{in}}{\partial x_1} \right) d\Gamma_{in}}{\int_{\Gamma_{in}} \sin(2\pi x_2) \varphi_{in} d\Gamma_{in}}. \quad (4.10)$$

Esta amplitude é calculada em tempo real durante a simulação, uma vez que o gradiente de concentração na direção do escoamento não é conhecido a priori.

A condição inicial para esta configuração de escoamento é assumida na forma:

$$q(x_i, t = 0) = \frac{q_{in}}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{x_1 - x_{f,0}}{4}\right) \right], \quad (4.11)$$

onde q é uma variável qualquer do escoamento, q_{in} a função que descreve uma variável qualquer no plano de entrada, $x_{f,0}$ a posição inicial da frente.

4.1.3 Equações de estabilidade linear

Conforme descrito anteriormente a análise de perturbações em escoamentos, por meio da teoria da estabilidade linear, requer a escolha de um estado de base, modelo de perturbação e equações linearizadas. Nessa análise é assumido que a formação das estruturas de lobos e fendas está associada apenas ao desenvolvimento de instabilidades gravitacionais no nariz da corrente de densidade. Dessa forma, é desconsiderada a influência do campo de velocidades ($\bar{u}_i = 0$) e o estado de base a ser estudado se reduz a perfis de concentração escalar médios no tempo e na direção transversal ao escoamento para cada posição x_1 . A escolha deste tipo de estado de referência resulta em funções que dependem apenas da direção vertical (x_2), configurando uma análise de estabilidade linear local (JUNIPER et al., 2014).

Esta configuração requer um ajuste nos números adimensionais do escoamento, uma vez que não há um campo de velocidades de referência. De maneira similar a ob-

tenção da velocidade característica u_b (Eq. 3.1), é assumido o mesmo comprimento característico das outras configurações tratadas e uma velocidade característica na forma:

$$\frac{u_{\text{LST}}^2}{2} = \int_0^1 x_2 \bar{\varphi}_{\text{MFE}}(x_2) dx_2, \quad (4.12)$$

sendo u_{LST} a velocidade característica desta configuração e $\bar{\varphi}_{\text{MFE}}(x_2)$ um perfil médio de concentração escalar extraído de uma simulação do modelo da frente em equilíbrio para uma posição x_1 dada. Com um novo valor de velocidade característica determinado, os números de Reynolds e de Richardson são ajustados:

$$Re_{\text{LST}} = u_{\text{LST}} Re \quad \text{e} \quad Ri_{\text{LST}} = \frac{1}{u_{\text{LST}}^2}. \quad (4.13)$$

Aplicando a decomposição das variáveis do escoamento, de acordo com a Eq. (3.10), nas equações (4.5a), (4.5b) e (4.5c), e assumindo que a amplitude das perturbações é infinitesimal e que o estado de base considerado é uma solução das equações governantes, obtém-se as equações linearizadas do problema:

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.14a)$$

$$\frac{\partial u'_i}{\partial t} - u_f \frac{\partial u'_i}{\partial x_1} = -\frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{1}{Re_{\text{LST}}} \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_j} - Ri_{\text{LST}} \varphi' \delta_{i2}, \quad (4.14b)$$

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} = \frac{1}{Re_{\text{LST}} Sc} \frac{\partial^2 \varphi'}{\partial x_j \partial x_j} - u'_2 \frac{d\bar{\varphi}_{\text{MFE}}}{dx_2}. \quad (4.14c)$$

É importante constatar que o número de Schmidt depende apenas das propriedades dos fluidos e em razão deste fato permanece inalterado nesta configuração.

Neste estudo, são consideradas perturbações modais (JUNIPER et al., 2014) que se desenvolvem apenas na direção transversal ao escoamento. Tais perturbações para uma variável qualquer do escoamento possuem a forma de ondas planas:

$$q'_i = \hat{q}_i(x_2) \exp(ik_3 x_3 - i\omega t), \quad (4.15)$$

sendo \hat{q}_i funções de amplitude unidimensionais (devido a escolha do estado de referência), k_3 o número de onda na direção transversal ao escoamento e ω é um número complexo cuja parte real (ω_r) representa a frequência angular de oscilação enquanto que sua parte imaginária (ω_i) descreve a taxa de amplificação ou decaimento. Neste contexto uma perturbação com $\omega_i \leq 0$ é estável e $\omega_i > 0$ é instável. Finalmente, substituindo o modelo de perturbação nas equações linearizadas, e realizando o procedimento descrito por Schmid e Brandt (2014) com o objetivo de retirar a pressão das equações, as equações de estabilidade resultantes configuram um problema de autovalores generalizado

do tipo $\mathbf{A}\hat{q} = -i\omega\mathbf{B}\hat{q}$, com autovalores ω e autovetores \hat{q} . Este problema é descrito pelas equações:

$$-i\omega \left(\frac{d^2}{dx_2^2} - k_3^2 \right) \hat{u}_2 = \frac{1}{Re_{LST}} \left(\frac{d^4}{dx_2^4} - 2k_3^2 \frac{d^2}{dx_2^2} + k_3^4 \right) \hat{u}_2 + Ri_{LST} k_3^2 \hat{\varphi}, \quad (4.16a)$$

$$-i\omega \hat{\varphi} = \frac{1}{Re_{LST} Sc} \left(\frac{d^2}{dx_2^2} - k_3^2 \right) \hat{\varphi} - \hat{u}_2 \frac{d\bar{\varphi}_{MFE}}{dx_2}, \quad (4.16b)$$

com condições de contorno para as funções de amplitude na forma:

$$\hat{u}_2 = \frac{d\hat{u}_2}{dx_2} = \frac{d\hat{\varphi}}{dx_2} = 0, \quad \text{em } x_2 = 0, x_2 = 1. \quad (4.17)$$

Tais condições representam perturbações com condição de não-deslizamento, irrotacionais e com fluxo difusivo nulo nos contornos.

O problema de autovalores generalizado descrito pelas equações (4.16a), (4.16b) e (4.17) é resolvido para cada posição x_1 , que é representada pelo parâmetros Re_{LST} , Ri_{LST} e $\bar{\varphi}_{MFE}$ e variando o número de onda k_3 . Neste âmbito, o interesse desta análise é buscar as perturbações mais instáveis (com maior taxa de amplificação) que satisfaçam as equações do problema de estabilidade.

4.2 Pós-processamentos

Nesta seção serão descritos os métodos empregados no pós-processamento dos dados adquiridos pelas simulações. A partir desses dados foram determinados a posição e velocidade da frente da corrente de densidade, o comprimento e altura da cabeça da corrente de densidade, altura do nariz da corrente e comprimento de onda média das estruturas de lobos e fendas. Exclusivamente para a configuração *lock-release* foi realizado a quantificação da eficiência de mistura, baseada no método de partição de energia potencial.

4.2.1 Determinação dos limites da cabeça de uma corrente de densidade

A cabeça de uma corrente de densidade é formalmente descrita na literatura como a região do escoamento limitada entre a posição de frente e uma posição caracterizada pelo desprendimento de vórtices de Kelvin-Helmholtz (SHER; WOODS, 2015). Em geral, os métodos atualmente empregados consistem em usar iso-valores do campo de concentração para a determinação de tais grandezas. Porém não há um consenso sobre um iso-valor exato, transmitindo uma grande incerteza para os resultados adquiridos devido à grande sensibilidade das grandezas com os métodos (CANTERO et al., 2007).

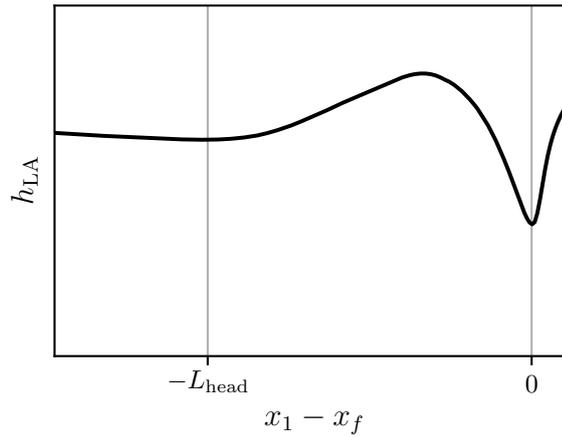


Figura 4.3 – Exemplo do método empregado na definição dos limites da cabeça de uma corrente de densidade baseado na grandeza integral h_{LA} .

Neste estudo é proposto um método para a determinação da posição da frente e do limite entre cabeça e corpo da corrente de densidade que é baseado em buscar pontos de mínimos locais de uma grandeza integral. Este método apresenta vantagens em relação ao que é praticado na literatura por não apresentar nenhuma dependência com a escolha de um iso-valor.

A determinação dos limites da cabeça de uma corrente de densidade é realizada com o auxílio da altura média da corrente de densidade ponderada pela camada, ou *layer averaged thickness* (ELLISON; TURNER, 1959), h_{LA} , que é definida como:

$$h_{LA}(x_1, t) = \frac{\left(\int_{\Gamma_1} u_1 f_{\text{mask}} d\Gamma_1 \right)^2}{L_3 \int_{\Gamma_1} u_1^2 f_{\text{mask}} d\Gamma_1}, \quad (4.18)$$

onde Γ_1 é o plano perpendicular à direção x_1 e f_{mask} é uma função auxiliar que permite levar em consideração apenas os valores positivos de u_1 na integração. Este campo auxiliar é definido por:

$$f_{\text{mask}}(x_i, t) = \begin{cases} u_1(x_i, t) \geq 0 \rightarrow 1 \\ u_1(x_i, t) < 0 \rightarrow 0 \end{cases}. \quad (4.19)$$

Uma vez que h_{LA} é calculado para cada instante de tempo, a posição da frente de uma corrente de densidade é definida como o primeiro ponto de mínimo local de h_{LA} enquanto que a posição limite entre a cabeça e o corpo da corrente é definida pelo ponto de mínimo local de h_{LA} entre o máxima altura h e a posição $x_1 = 0$. Deste forma a cabeça de uma corrente de densidade, com comprimento L_{head} , está limitada entre estes dois pontos de mínimo locais, conforme apresentado na Figura 4.3.

4.2.2 Altura do nariz e altura da cabeça de uma corrente de densidade

Tomando como referência a altura média da corrente de densidade ponderada pela camada h_{LA} contida no intervalo $-L_{\text{head}} \leq x_1 - x_f \leq 0$ para um tempo qualquer, determina-se:

- A altura do nariz da corrente (h_{nose}) como a posição vertical correspondente ao valor máximo da concentração na posição da frente;
- A altura da cabeça da corrente (h_{head}) como a posição vertical a partir da qual $\varphi \leq 10^{-2}$ na posição x_1 correspondente ao valor máximo de h_{LA} no intervalo considerado.

Opta-se por um método baseado em iso-valores de concentração para determinar estes comprimentos porque é a abordagem mais próxima do que [Simpson \(1972\)](#) tinha a sua disposição para obter seus resultados e formular as equações empíricas (3.6) e (3.7).

4.2.3 Velocidade da frente

A velocidade de propagação da frente de uma corrente de densidade é formalmente definida como a variação da posição da frente ao longo do tempo ([CANTERO et al., 2007](#)):

$$u_f = \frac{dx_f}{dt}. \quad (4.20)$$

No entanto, em simulações numéricas, esta forma de determinar a velocidade da frente pode apresentar ruído devido a discretização espacial do domínio, gerando incertezas com ordem de magnitude $\Delta x / (2\Delta t)$ em um instante de tempo dado¹. Este ruído pode ser minimizado através do uso de filtros numéricos, porém o uso de tais filtros pode resultar em perda de informação.

Neste trabalho é proposto um método de determinar a velocidade da frente a partir de um ponto de máximo de uma quantidade integral. Esta quantidade integral é baseada em um balanço da equação de transporte escalar limitada por um volume de controle arbitrário, compreendido entre uma posição na direção x_1 dada e L_1 para todas as posições nas direções vertical e transversal ao escoamento. Desconsiderando as variações temporais da concentração e considerando a existência de um referencial móvel neste

¹ Esta incerteza associada a derivação numérica não é o mesmo que o erro de truncamento associado ao método numérico empregado para realizar a derivação.

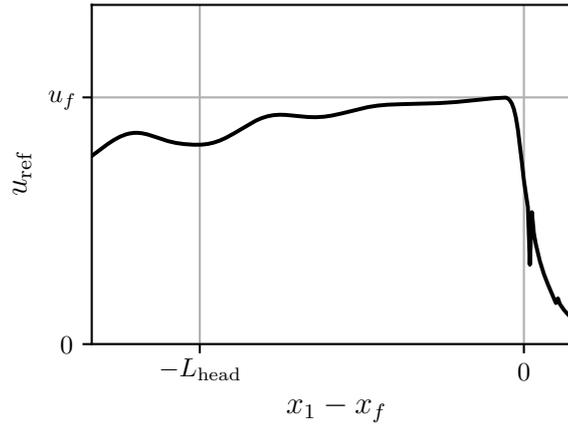


Figura 4.4 – Exemplo do método de definição da velocidade frente baseado no método descrito para um instante de tempo dado.

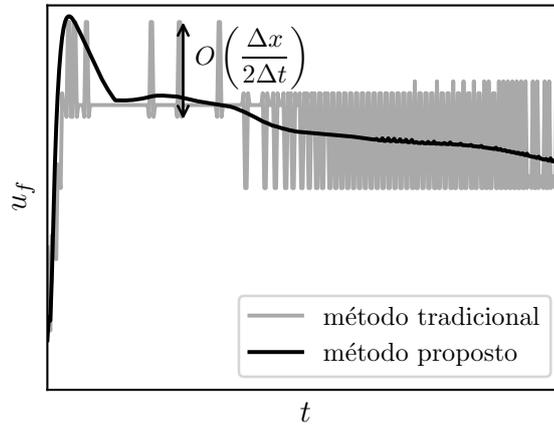


Figura 4.5 – Exemplo de comparação entre os métodos tradicional e proposto para a computação da velocidade da frente.

volume de controle com velocidade u_{ref} , determina-se esta velocidade para cada posição da direção do escoamento e tempo na forma:

$$u_{ref}(x_1, t) = \frac{\int_{\Gamma_1} \left(u_1 \varphi - \frac{1}{ReSc} \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \right) d\Gamma_1}{\int_{\Gamma_1} \varphi d\Gamma_1}. \quad (4.21)$$

Sendo assim, a velocidade da frente de uma corrente de densidade para cada instante de tempo é definida como o valor máximo de u_{ref} no interior da cabeça da corrente:

$$u_f(t) = \text{máximo} [u_{ref}(-L_{head} \leq x_1 - x_f \leq 0, t)]. \quad (4.22)$$

A Figura 4.4 apresenta um exemplo da determinação de u_f , baseado em u_{ref} , para um instante de tempo qualquer.

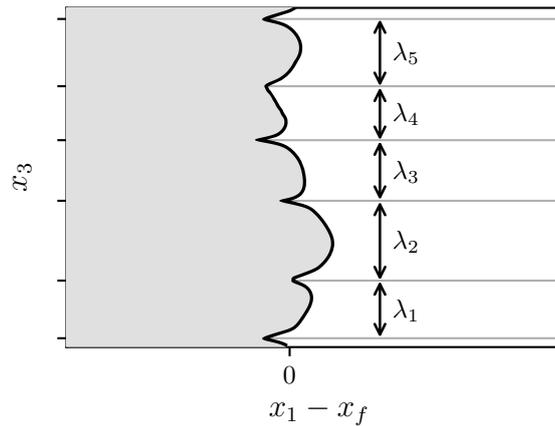


Figura 4.6 – Exemplo da determinação do comprimento de onda de lobos e fendas a partir de uma isolinha de concentração no plano (x_1, x_3) localizado no fundo do canal $(x_2 = 0)$ para um instante de tempo dado.

Quando comparado com o método tradicional de quantificação da velocidade da frente (Eq. 4.20), o método proposto minimiza os ruídos causados pelas incertezas associadas à discretização espacial do problema, conforme mostrado na Figura 4.5.

4.2.4 Determinação da comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas

Objetivando a comparação dos resultados obtidos por meio de simulação numérica, em ambas configurações de escoamento, com a relação empírica descrita pela Eq. (3.7), é necessário medir o comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas nos dados adquiridos. No presente estudo, esta grandeza é medida como distância entre mínimos locais de uma isolinha do campo de concentração escalar no plano (x_1, x_3) localizado no fundo do canal $(x_2 = 0)$ para cada instante de tempo, conforme apresentado na Figura 4.6. Os isocontornos são obtidos usando um valor de referência $\varphi_0 = 0,01^2$ e posteriormente os mínimos locais são localizados³.

Uma vez que os mínimos locais da isolinha de concentração escalar são localizados e as diferenças entre pontos de mínimos vizinhos são quantificadas, calcula-se a média de distância entre todos os intervalos na forma:

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \lambda_i, \quad (4.23)$$

² Isocontornos obtidos por meio da rotina `matplotlib.pyplot.contour` presente na biblioteca `matplotlib` da linguagem de programação python

³ Utilizando a rotina `scipy.signal.argrelextrema` presente na biblioteca `scipy` da linguagem de programação python

onde N é o número de intervalos encontrados e λ_i o comprimento dos intervalos. Este processo é repetido para cada instante de tempo.

4.2.5 Mistura irreversível e balanço de energia em configuração *lock-exchange*

Conforme descrito anteriormente, a quantificação de mistura irreversível é baseada em uma abordagem energética onde é necessário decompor a energia potencial, \mathcal{P} , nas parcelas disponível e *background*, com a forma:

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega} \varphi x_2 d\Omega = \mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b, \quad (4.24)$$

sendo Ω o volume de controle da análise, que neste caso corresponde ao domínio do problema, e \mathcal{P}_a e \mathcal{P}_b são as parcelas de energia potencial disponível e *background* respectivamente. A parcela *background* é matematicamente descrita por um estado redistribuído $\varphi(x_{2,*})$, onde $x_{2,*}$ é um espaço de coordenadas que fornece a posição vertical no estado de referência de uma parcela de fluido na posição x_i e tempo t (TSENG; FERZIGER, 2001). Utilizando esta definição, a energia potencial *background* pode ser escrita como:

$$\mathcal{P}_b = \int_{\Omega} \varphi(x_{2,*}) x_{2,*} d\Omega. \quad (4.25)$$

De acordo com Tseng e Ferziger (2001), as posições descritas pelo espaço redistribuído $x_{2,*}$ podem ser estimadas a partir do complementar da função de distribuição acumulada do campo de concentração escalar $\varphi(x_i, t)$:

$$x_{2,*}(\varphi) = \left[1 - \int_0^{\varphi} P(\varphi^*) d\varphi^* \right], \quad (4.26)$$

sendo $P(\varphi^*)$ a função de densidade de probabilidade e φ^* uma variável auxiliar do espaço de probabilidades. Os autores descrevem esta técnica para o cálculo de $x_{2,*}$ como uma alternativa adequada para grandes volumes de dados por possuir resultados muito próximos dos algoritmos de redistribuição clássicos (PELTIER; CAULFIELD, 2003) porém com um custo computacional reduzido. Uma vez que a energia potencial e sua parcela *background* são conhecidas, a energia potencial disponível é calculada a partir da Eq. (4.24).

As equações que descrevem o comportamento das variações de energia ao longo tempo são deduzidas a partir das equações gerais do problema e suas condições contorno. É importante constatar que no caso especial da configuração *lock-exchange*, as transferências de energia associadas as condições de contorno são nulas uma vez que se trata de um sistema fechado (WINTERS et al., 1995). A equação de energia potencial é obtida multiplicando a equação de transporte escalar (Eq. 4.1c) pela coordenada

vertical x_2 , integrando no volume de controle Ω e aplicando as condições de contorno do problema. A equação resultante deste procedimento é:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P} = \underbrace{\int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega}_{-\mathcal{B}} + \underbrace{\frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} x_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_i} d\Omega}_{\Phi}, \quad (4.27)$$

onde \mathcal{B} é o fluxo de *buoyancy* e Φ é a taxa de difusão de massa. Para a equação da energia potencial *background*, multiplica-se a Eq. (4.1c) pela coordenada do espaço redistribuído $x_{2,*}$, integra-se no volume de controle Ω e aplica-se as condições de contorno do problema. Desta forma, obtém-se:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}_b = \underbrace{\frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} x_{2,*} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega}_{\mathcal{M}}, \quad (4.28)$$

sendo \mathcal{M} conhecido como fluxo diapicnal (WINTERS et al., 1995). Subtraindo Eq. (4.28) da Eq. (4.27), a equação da energia potencial disponível é obtida:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}_a = -\mathcal{B} - (\mathcal{M} - \Phi), \quad (4.29)$$

sendo a diferença entre o fluxo diapicnal e a taxa de difusão de massa a taxa de mistura irreversível. Finalmente, a equação que descreve o comportamento temporal da energia cinética é obtida multiplicando a equação de quantidade de movimento (Eq. 4.1b) pelo campo de velocidades u_i , integrando no volume de controle Ω e aplicando as condições de contorno do problema, resultando em:

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{2} u_i u_i d\Omega}_{\mathcal{K}} = - \underbrace{\frac{1}{Re} \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} d\Omega}_{\varepsilon} + \mathcal{B}, \quad (4.30)$$

onde \mathcal{K} é a energia cinética e ε é a taxa de dissipação viscosa. Mais detalhes a respeito da dedução das equações de energia podem ser encontrados no trabalho de Winters et al. (1995).

A soma das equações (4.28), (4.29) e (4.30) combinadas com a integração no tempo e aplicação da condição inicial do problema, resulta em um balanço de energia que descreve a evolução temporal dos reservatórios de energia:

$$\mathcal{K} + \mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b + \underbrace{\int_0^t (\varepsilon - \Phi) d\tau}_{\mathcal{I}} = \mathcal{P}_0, \quad (4.31)$$

sendo \mathcal{I} a energia interna do escoamento e \mathcal{P}_0 a energia potencial inicial. Todas as possíveis transferências de energia entre os reservatórios, para a configuração *lock-exchange*, são sumarizadas na Figura 4.7.

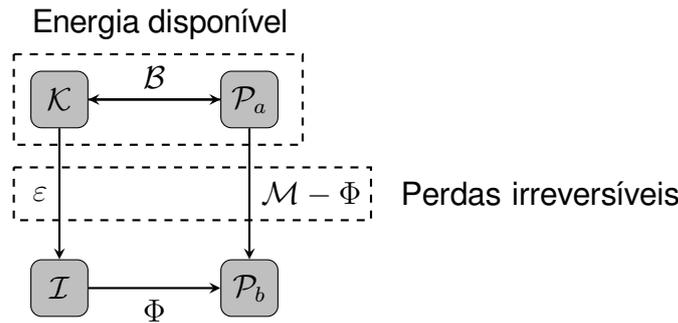


Figura 4.7 – Esquema do balanço de energia, baseado na abordagem da partição de energia potencial (LORENZ, 1955), na configuração *lock-exchange*. Adaptado de Winters et al. (1995).

De acordo com Peltier e Caulfield (2003), a eficiência de mistura η é quantificada pela relação entre as perdas de energia por efeitos de mistura irreversível e todas as perdas irreversíveis de energia disponível, conforme apresentado na Figura 4.7. Na notação adotada no presente estudo, a eficiência de mistura, anteriormente descrita pela Eq. (3.8), tem a forma:

$$\eta = \frac{\int_0^t (\mathcal{M} - \Phi) d\tau}{\int_0^t (\mathcal{M} - \Phi + \varepsilon) d\tau}. \quad (4.32)$$

4.3 Código computacional Incompact3d

A ferramenta utilizada nas simulações numéricas diretas e simulações de grandes escalas foi o código computacional Incompact3d (Laizet; Lamballais, 2009). Este código é *open-source* que está disponível no site web `github` e está preparado para realizar cálculos em paralelo, viabilizando o processamento de simulações de grande porte em tempos mais acessíveis.

Tal ferramenta é baseada em nos métodos de diferenças finitas de alta ordem para a discretização espacial, método de Adams-Bashforth de terceira ordem com auxílio de passo de tempo fracionado para a integração temporal e a resolução da pressão é feita no espaço espectral com auxílio de transformada rápida de Fourier. Além destas características, pode-se destacar que o termo não linear das equações de Navier-Stokes são discretizados na forma antissimétrica com a finalidade de minimizar erros de *aliasing* conforme relatado no trabalho de Kravchenko e Moin (1997).

A Figura 4.8 apresenta um fluxograma simplificado do funcionamento do código computacional Incompact3d, onde as caixas retangulares na cor cinza representam as partes do código em que foi necessário desenvolvimento para viabilizar simulações na configuração de escoamento Modelo da Frente em Equilíbrio. A seguir, um detalhamento

das principais etapas da execução do código:

- Inicialização do código: Nesta etapa é realizado a leitura dos parâmetros numéricos do problema, e são inicializadas todas as variáveis de cálculo e operadores diferenciais. Além disso, são atribuídas as condições iniciais do problema;
- Condições de contorno: Nesta etapa são aplicadas as condições de contorno do problema que esta sendo resolvido a cada passo de tempo. Para o caso do Modelo da Frente em Equilíbrio, esta etapa é responsável pelo calculo da amplitude do perfil de velocidade de entrada de acordo com a Eq. (4.10).
- Convecção/difusão: Nesta etapa, é realizado o calculo e soma dos termos de convecção e difusão para a iteração k , conforme a equação:

$$F_i^k = -\frac{1}{2} \left(u_j^k - \underbrace{u_f \delta_{j1}}_{\text{MFE}} \right) \frac{\partial u_i^k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u_i^k \left(u_j^k - \underbrace{u_f \delta_{j1}}_{\text{MFE}} \right) \right] + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i^k}{\partial x_j \partial x_j} - \phi^k \delta_{i2}. \quad (4.33)$$

Os termos destacados na Eq. (4.33) foram implementados especialmente para as simulações do Modelo da Frente em Equilíbrio.

- Avanço temporal: O avanço temporal é realizado em duas etapas que são baseadas no método do passo de tempo fracionado. Para cada iteração k , primeiramente determina-se o campo de velocidades u_i^* a partir de informações do campo de velocidades no tempo atual e a soma dos termos de convecção e difusão conforme a equação

$$\frac{u_i^* - u_i^k}{\Delta t} = a_k F_i^k + b_k F_i^{k-1} + c_k F_i^{k-2}, \quad (4.34)$$

onde Δt é o incremento temporal, a_k , b_k e c_k são os coeficientes do esquema de integração temporal. Para o esquema Adams-Bashforth de terceira ordem, $a_k = 23/12$, $b_k = -16/12$ e $c_k = 5/12$. Por não levar em consideração os efeitos do gradiente de pressão, o campo de velocidades u_i^* é compressível e não satisfaz a equação da continuidade. Posteriormente, o campo de velocidades na iteração $k + 1$ é determinado a partir do gradiente de pressão e do campo de velocidades compressível

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^*}{\Delta t} = -(a_k + b_k + c_k) \frac{\partial p^{k+1}}{\partial x_i}. \quad (4.35)$$

Esta formulação permite isolar a pressão e garantir a incompressibilidade do campo de velocidades.

- Resolução da equação da pressão: A pressão é resolvida a partir do divergente da Eq. (4.35), resultando em uma equação de Poisson em que a pressão é a incógnita:

$$\frac{\partial^2 p^{k+1}}{\partial x_i \partial x_i} = \frac{1}{\Delta t (a_k + b_k + c_k)} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_i}. \quad (4.36)$$

No Incompact3d, a resolução da Eq. (4.36) é realizada a partir de transformadas rápidas de Fourier. Este método de resolução para a equação da pressão garante uma grande precisão e velocidade na obtenção de soluções.

- Correção da velocidade: Uma vez que a pressão na iteração $k + 1$ é conhecida, o campo de velocidades é determinado com a Eq (4.35).
- Transporte escalar: A equação de transporte escalar é resolvida diretamente pelo esquema de Adams-Bashforth de terceira ordem, sendo assim, o campo de escalar na iteração $k + 1$ é determinado a partir do campo de escalar na iteração k e dos termos de convecção e difusão:

$$\varphi^{k+1} = \varphi^k + \Delta t \left(a_k G^k + b_k G^{k-1} + c_k G^{k-2} \right), \quad (4.37)$$

onde

$$G^k = - \left(u_j^k - \underbrace{u_f \delta_{j1}}_{\text{MFE}} \right) \frac{\partial \varphi^k}{\partial x_j} + \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi^k}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (4.38)$$

Novamente, o termo destacado na Eq. (4.38) foi implementado especialmente para as simulações do Modelo da Frente em Equilíbrio.

- Acumuladores: Os acumuladores foram implementados nas simulações do Modelo da Frente em Equilíbrio e tem como finalidade realizar somas para posteriormente gerar os campos de média temporal das variáveis do escoamento e seus produtos. Na entrada de dados da simulação é necessário atribuir uma iteração k_s a partir da qual esta função do código é ativada.

Sendo ζ e η variáveis quaisquer do escoamento, os acumuladores são calculados na forma:

$$\zeta_{\text{soma}} = \sum_{m=k_s}^k \zeta^m \quad \text{e} \quad (\zeta\eta)_{\text{soma}} = \sum_{m=k_s}^k \zeta^m \eta^m. \quad (4.39)$$

Posteriormente os campos de média temporal são criados:

$$\bar{\zeta} = \frac{\zeta_{\text{soma}}}{k - k_s + 1} \quad \text{e} \quad \overline{\zeta\eta} = \frac{(\zeta\eta)_{\text{soma}}}{k - k_s + 1}. \quad (4.40)$$

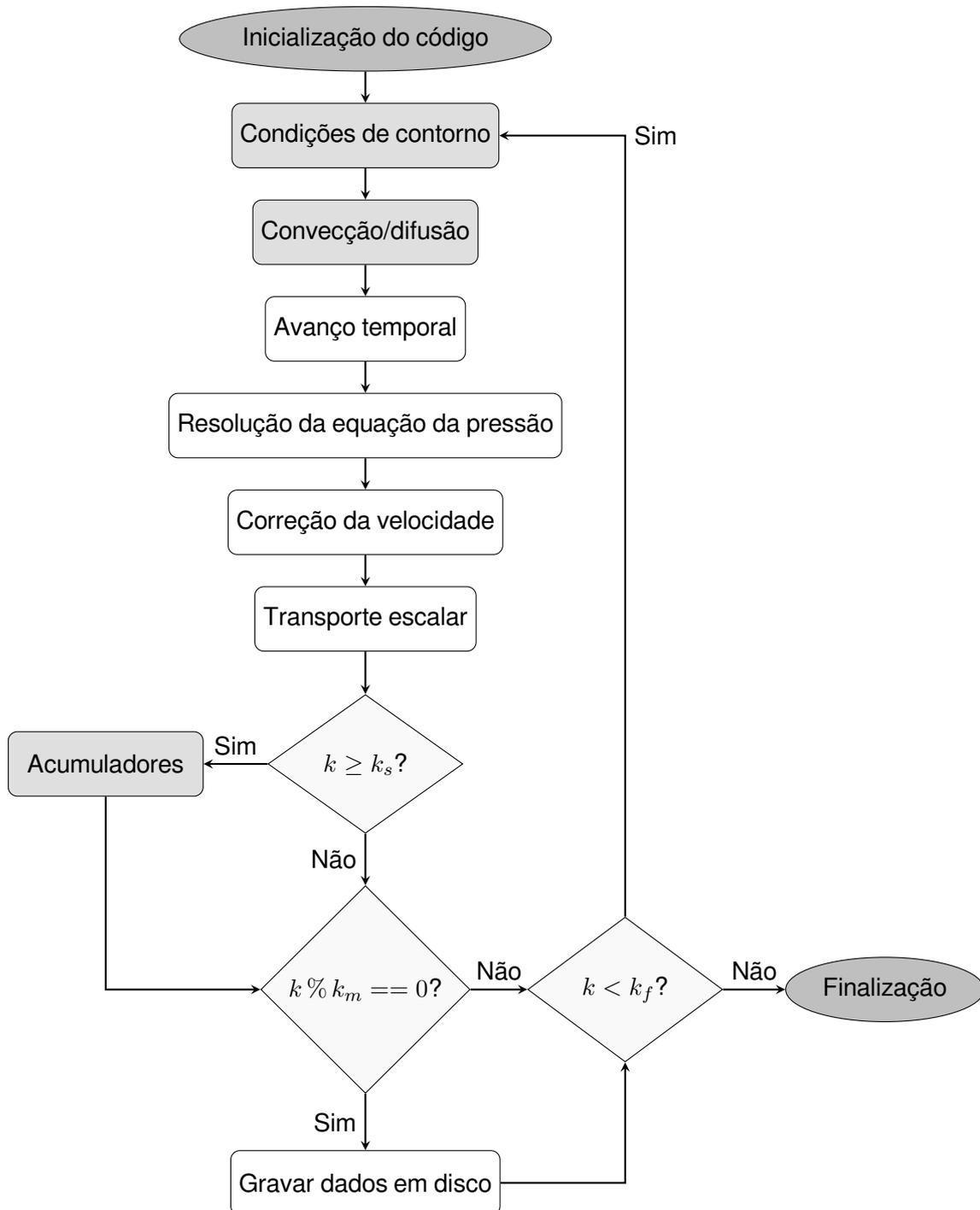


Figura 4.8 – Fluxograma simplificado de funcionamento do código computacional Incompact3d.

Esta abordagem permite a determinação dos campos de produtos de flutuações usando propriedades da média:

$$\overline{\zeta'\eta'} = \overline{\zeta\eta} - \bar{\zeta}\bar{\eta}. \quad (4.41)$$

- Gravar dados em disco: Sempre que a iteração k é um múltiplo de k_m , é realizada a gravação dos dados em disco. Nesta etapa os dados gravados em disco são

campos instantâneos (*snap-shots*) e campos de média temporal são atualizados.

- Finalização: Quando a simulação alcança a iteração k_f a simulação é finalizada.

4.4 Métodos numéricos

Nesta seção são descritos os métodos numéricos empregados para realizar a discretização espacial dos sistemas de equações apresentados anteriormente. Primeiramente é descrito o método das diferenças finitas (implementado no código `Incompact3d`) empregado tanto na configuração `lock-exchange` quanto no modelo da frente em equilíbrio. E posteriormente o método de Chebyshev, utilizado na discretização do problema de estabilidade linear.

Além dos métodos de discretização espacial para o cálculo de derivadas numéricas, também são empregados métodos numéricos para realizar as operações de integral dos pós-processamentos e resolver os problemas de autovalores dos problemas de estabilidade linear. O método de integração numérica adotado para realizar tais operações foi o método de Simpson, implementado computacionalmente na rotina `integrate.simps` da biblioteca `scipy` presente na linguagem de programação `python`. Enquanto que os problemas de autovalores são resolvidos por meio da rotina `linalg.eig`, baseada no algoritmo QZ (ANDERSON et al., 1999), também contida na biblioteca `scipy`.

4.4.1 Método das diferenças finitas de alta ordem

As operações de derivação realizadas no código `Incompact3d` são baseadas na vasta gama de esquemas de diferenças finitas propostos por Lele (1992), mais precisamente o esquema compacto de sexta ordem. Tal esquema de derivação possui uma discretização feita em uma malha de cálculo com nós, aqui identificados pelo sub-índice i , igualmente espaçados por uma distância Δx . Nesta discretização a posição no espaço de cada é dada por $x_i = i\Delta x$ com $i = 0, 1, \dots, n$, sendo n o número de pontos da malha de cálculo.

Assumindo a existência de uma função qualquer avaliada em um ponto com posição x_i , denotada como f_i , de acordo com Lele (1992) podemos aproximar sua derivada de primeira ordem na forma:

$$\beta \left. \frac{df}{dx} \right|_{i-2} + \alpha \left. \frac{df}{dx} \right|_{i-1} + \left. \frac{df}{dx} \right|_i + \alpha \left. \frac{df}{dx} \right|_{i+1} + \beta \left. \frac{df}{dx} \right|_{i+2} = \frac{a}{2\Delta x} (f_{i+1} - f_{i-1}) + \frac{b}{4\Delta x} (f_{i+2} - f_{i-2}) + \frac{c}{6\Delta x} (f_{i+3} - f_{i-3}), \quad (4.42)$$

onde a, b, c, α e β são coeficientes que possuem informações relativo a ordem do erro de truncamento do esquema. No código Incompact3d são utilizadas três diferentes combinações destes coeficientes de acordo com a posição em que um ponto i se encontra, com o objetivo de evitar “pontos fantasmas” (Laizet; Lamballais, 2009). Esta abordagem é necessária uma vez que o esquema geral, definido pela Eq. (4.42), pode requerer informações sobre pontos que estariam fora da malha de cálculo. As três diferentes combinações dos coeficientes são:

- Esquema compacto de sexta ordem, utilizado para os pontos no intervalo $2 \leq i \leq n - 2$. Os coeficientes para este esquema são:

$$a = \frac{14}{9}, \quad b = \frac{1}{9}, \quad c = 0, \quad \alpha = \frac{1}{3}, \quad e \quad \beta = 0; \quad (4.43)$$

- Esquema compacto de quarta ordem para as derivadas nos pontos vizinhos aos contornos, compreendendo os nós $i = 1$ e $i = n - 1$. Este esquema possui os coeficientes:

$$a = \frac{3}{2}, \quad b = 0, \quad c = 0, \quad \alpha = \frac{1}{4}, \quad e \quad \beta = 0; \quad (4.44)$$

- Esquema de terceira ordem descentrado para as derivadas nos contornos do domínio computacional, o que inclui os nós $i = 0$ e $i = n$. Este esquema possui a forma:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_0 + \alpha \left. \frac{df}{dx} \right|_1 = \frac{1}{\Delta x} (af_0 + bf_1 + cf_2), \quad (4.45)$$

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_n + \alpha \left. \frac{df}{dx} \right|_{n-1} = \frac{1}{\Delta x} (af_n + bf_{n-1} + cf_{n-2}), \quad (4.46)$$

com

$$a = -\frac{5}{2}, \quad b = 2, \quad c = \frac{1}{2}, \quad e \quad \alpha = 2. \quad (4.47)$$

De maneira similar à derivada de primeira ordem, a derivada de segunda ordem da função f_i pode ser aproximada na forma:

$$\begin{aligned} \beta \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{i-2} + \alpha \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{i-1} + \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_i + \alpha \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{i+1} + \beta \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{i+2} = \\ + \frac{a}{\Delta x^2} (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) + \frac{b}{4\Delta x^2} (f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}) \\ + \frac{c}{9\Delta x^2} (f_{i+3} - 2f_i + f_{i-3}) + \frac{d}{16\Delta x^2} (f_{i+4} - 2f_i + f_{i-4}). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Conforme observado anteriormente para o caso da derivada de primeira ordem, um esquema compacto de sexta ordem apresenta valores não-nulos apenas para os coeficientes a , b e α . Desta forma, [Lamballais et al. \(2011\)](#), [Dairay et al. \(2017\)](#) propôs modificações do esquema compacto de sexta ordem proposto por [Lele \(1992\)](#). Tais modificações consistem em adicionar mais graus de liberdade no esquema em uma maneira que a ordem de grandeza do erro de truncamento é garantida e permitindo o aporte de uma dissipação artificial nas pequenas escalas do escoamento. Esse aporte de dissipação nas pequenas escalas tem como finalidade imitar o comportamento de modelos sub-malha utilizados em Simulações de Grandes Escalas baseados no conceito de viscosidade espectral ([LAMBALLAIS et al., 2011](#); [DAIRAY et al., 2017](#)). Esta abordagem é referida na literatura como Simulação Implícita de Grandes Escalas, ou na língua inglesa *Implicit Large Eddy Simulation* (ILES). Assumindo $\beta = 0$, os demais coeficientes da Eq. (4.48) baseado nas modificações propostas por [Lamballais et al. \(2011\)](#), [Dairay et al. \(2017\)](#) são determinados a partir da solução do sistemas de equações:

$$a + b + c + d - 2\alpha = 1, \quad (4.49a)$$

$$a + 2^2b + 3^2c + 4^2d - 12\alpha = 0, \quad (4.49b)$$

$$a + 2^4b + 3^4c + 4^4d - 30\alpha = 0, \quad (4.49c)$$

$$36a + 4c + 18k_c''\Delta x^2\alpha = 9k_c''\Delta x^2, \quad (4.49d)$$

$$48a + 12b + 3d + 16k_m''\Delta x^2\alpha = 16k_m''\Delta x^2, \quad (4.49e)$$

sendo k_{cut}'' e k_m'' constantes associadas ao aporte de dissipação artificial. Estas constantes estão relacionadas com modelos de viscosidade espectral ([LAMBALLAIS et al., 2011](#); [DAIRAY et al., 2017](#)) e são determinadas por:

$$k_c''\Delta x^2 = \pi^2 (1 + n_\pi), \quad (4.50)$$

$$k_m''\Delta x^2 = \left(\frac{2\pi}{3}\right)^2 \left[1 + n_\pi \exp\left(-\frac{100}{121}\right)\right], \quad (4.51)$$

onde n_π é uma constante arbitrária que dita a intensidade da dissipação adicionada nas pequenas escalas.

Três diferentes esquemas compactos de sexta ordem podem ser derivados de soluções do sistema de equações (4.49). Primeiramente há o esquema inicialmente proposto por [Lele \(1992\)](#), denominado como esquema otimizado, que considera $c = d = 0$ e a , b e α são definidos pela solução das equações (4.49a), (4.49b) e (4.49c), resultando em:

$$a = \frac{12}{11}, \quad b = \frac{3}{11} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{2}{11}. \quad (4.52)$$

Posteriormente o esquema referido como O6DNS ([FRANTZ, 2018](#)), com $d = 0$ e a , b , c e α determinados pela solução das equações (4.49a), (4.49b), (4.49c) e (4.49d), resultando em:

$$a = \frac{3(45k_c''\Delta x^2 - 16)}{8(45k_c''\Delta x^2 - 208)}, \quad (4.53a)$$

$$b = \frac{3(27k_c''\Delta x^2 - 176)}{45k_c''\Delta x^2 - 208}, \quad (4.53b)$$

$$c = -\frac{63k_c''\Delta x^2 - 432}{360k_c''\Delta x^2 - 1664}, \quad (4.53c)$$

$$\alpha = \frac{45k_c''\Delta x^2 - 272}{2(45k_c''\Delta x^2 - 208)}. \quad (4.53d)$$

No caso de Simulações Numéricas Diretas, emprega-se o esquema O6DNS com $n_\pi = 4$ ([FRANTZ, 2018](#)). E finalmente o esquema referido como O6LES ([FRANTZ, 2018](#)), onde são considerados todos os coeficientes, resultando em:

$$a = \frac{1120k_c''k_m''\Delta x^4 - 4329k_c''\Delta x^2 + 256k_m''\Delta x^2 - 2288}{8(405k_c''\Delta x^2 - 640k_m''\Delta x^2 + 144)}, \quad (4.54a)$$

$$b = \frac{-280k_c''k_m''\Delta x^4 + 2115k_c''\Delta x^2 - 1792k_m''\Delta x^2 + 1328}{405k_c''\Delta x^2 - 640k_m''\Delta x^2 + 144}, \quad (4.54b)$$

$$c = \frac{9(160k_c''k_m''\Delta x^4 - 855k_c''\Delta x^2 - 256k_m''\Delta x^2 + 2288)}{8(405k_c''\Delta x^2 - 640k_m''\Delta x^2 + 144)}, \quad (4.54c)$$

$$d = \frac{-40k_c''k_m''\Delta x^4 + 198k_c''\Delta x^2 + 128k_m''\Delta x^2 - 736}{405k_c''\Delta x^2 - 640k_m''\Delta x^2 + 144}, \quad (4.54d)$$

$$\alpha = \frac{405k_c''\Delta x^2 - 1280k_m''\Delta x^2 + 2736}{2(405k_c''\Delta x^2 - 640k_m''\Delta x^2 + 144)}. \quad (4.54e)$$

O comportamento dos diferentes esquemas de sexta ordem compactos em função do número de pontos podem ser melhor observados através do número de onda modificado (MOIN, 2010) correspondente à Eq. (4.48):

$$\begin{aligned} \frac{d^2 k}{dx^2} \Delta x^2 = & \frac{2a [1 - \cos(k\Delta x)] + \frac{b}{2} [1 - \cos(2k\Delta x)]}{[1 + 2\alpha \cos(k\Delta x)]} \\ & + \frac{\frac{2c}{9} [1 - \cos(3k\Delta x)] + \frac{d}{8} [1 - \cos(4k\Delta x)]}{[1 + 2\alpha \cos(k\Delta x)]}, \end{aligned} \quad (4.55)$$

assumindo $\beta = 0$. A Figura 4.9 mostra o número de onda modificado para os diferentes esquemas de derivada de segunda ordem apresentados com $n_\pi = 4$, onde é tido como solução exata $k'' \Delta x^2 = k^2$. Observa-se que o esquema otimizado apresenta um comportamento sub-dissipativo nas pequenas escalas, assumindo valores menores do que a solução exata. Enquanto que os esquemas O6DNS e O6LES exibem comportamento dissipativo, sendo que o esquema O6LES possui uma dissipação com um alcance maior de escalas.

Assim como na derivação espacial de primeira ordem, é necessário utilizar esquemas diferenciados nos pontos próximos aos contornos com a finalidade de evitar os “pontos fantasmas” (Laizet; Lamballais, 2009). Neste caso emprega-se

- Esquema compacto de quarta ordem, utilizado para nos pontos $i = 1$ e $i = n - 1$. Este esquema possui a forma:

$$\alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_0 + \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_1 + \alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_2 = + \frac{a}{\Delta x^2} (f_0 - 2f_1 + f_2), \quad (4.56)$$

$$\alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{n-2} + \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{n-1} + \alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_n = + \frac{a}{\Delta x^2} (f_{n-2} - 2f_{n-1} + f_n), \quad (4.57)$$

com

$$a = \frac{6}{5} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{1}{10}; \quad (4.58)$$

- Esquema de terceira ordem descentrado para as derivadas nos contornos do domínio, aplicado nos nós $i = 0$ e $i = n$. Tal esquema é escrito na forma:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_0 + \alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_1 = + \frac{1}{\Delta x^2} (af_0 + bf_1 + cf_2 + df_3), \quad (4.59)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_n + \alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{n-1} = + \frac{1}{\Delta x^2} (af_n + bf_{n-1} + cf_{n-2} + df_{n-3}), \quad (4.60)$$

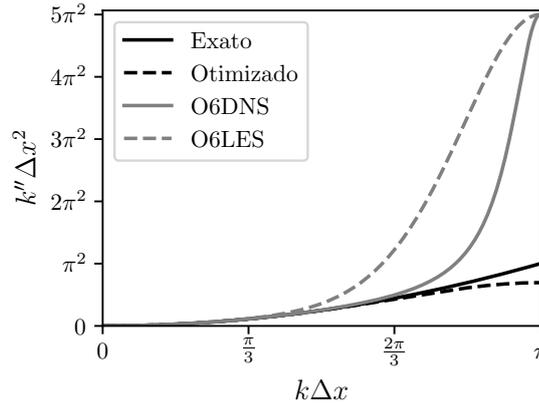


Figura 4.9 – Número de onda modificado para os diferentes esquemas numéricos apresentados com $n_\pi = 4$.

com

$$a = 11, \quad b = -27, \quad c = 15, \quad d = -1, \quad e = \alpha = 13. \quad (4.61)$$

4.4.2 Método de Chebyshev

A resolução do problema de estabilidade linear descrito pelo problema de autovalores generalizado requer métodos numéricos incluindo a discretização espacial da coordenada vertical. Para esta aplicação é empregado o método de Chebyshev baseado na colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto:

$$\hat{y}_i = \cos\left(\frac{\pi i}{N}\right), \quad i = 0, 1, \dots, N. \quad (4.62)$$

Tal método possui a propriedade de *precisão espectral* (CANUTO et al., 1988) que permite minimizar o número de pontos empregados na discretização do problema. Além da precisão espectral, este método é o mais empregado em aplicações de estabilidade linear local e pode ser considerado como *estado da arte* na resolução de problemas similares (JUNIPER et al., 2014).

O algoritmo empregado para definir as matrizes de derivação foi adaptado para a linguagem python a partir do pacote de funções do ambiente computacional Matlab desenvolvido por Weideman e Reddy (2000) e conta com algumas otimizações propostas no trabalho de Baltensperger e Trummer (2003) com a finalidade de diminuir os erros associados à derivação numérica.

Estas matrizes são determinadas em duas etapas: primeiramente são calculados todos os termos que não pertencem à diagonal principal e posteriormente são calculados os termos da diagonal principal. Os termos que não pertencem à diagonal principal de

uma matriz de derivação (no domínio da colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto) de ordem n , denotada por $\hat{\mathcal{D}}^n$, são calculados utilizando a equação

$$\hat{\mathcal{D}}_{ij}^n = n\mathcal{Z}_{ij} \left(\mathcal{C}_{ij} \hat{\mathcal{D}}_{ii}^{n-1} - \hat{\mathcal{D}}_{ij}^{n-1} \right) \quad i \neq j, \quad (4.63)$$

onde $\hat{\mathcal{D}}^0$ é a matriz identidade e o operador \mathcal{Z}_{ij} é definido por:

$$\mathcal{Z}_{ij} = \frac{1}{\hat{x}_i - \hat{x}_j}, \quad i \neq j. \quad (4.64)$$

O operador \mathcal{C}_{ij} relaciona os pesos associados a cada posição \hat{y}_i e \hat{y}_i na forma:

$$\mathcal{C}_{ij} = \frac{w_j}{w_i}. \quad (4.65)$$

No caso especial da colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto, os pesos são obtidos com as relações:

$$w_i = (-1)^i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \quad w_0 = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad w_N = \frac{(-1)^N}{2}. \quad (4.66)$$

Os termos que pertencem à diagonal principal da matriz de derivação são calculados a partir dos termos que não pertencem à ela através da propriedade chamada na literatura de *Negative sum trick* (BALTENSBERGER; TRUMMER, 2003). Esta propriedade diz que em cada linha da matriz o termo da diagonal principal é igual ao oposto da soma dos demais termos, conforme a equação:

$$\hat{\mathcal{D}}_{ii}^n = - \sum_{j=0, j \neq i}^N \hat{\mathcal{D}}_{ij}^n. \quad (4.67)$$

Os pontos de colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto estão contidos no intervalo $-1 \leq \hat{y} \leq 1$ e, sendo assim, torna-se necessário o emprego de uma função de mapeamento com a finalidade de transpor o domínio da colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto para o domínio da aplicação desejada. Neste trabalho é utilizada a função de mapeamento

$$x_2 = \frac{1 + \hat{y}}{6 - 4\hat{y}}, \quad (4.68)$$

que transpõe o domínio da colocação espectral no intervalo $0 \leq x_2 \leq 1$ e distribui metade dos pontos no intervalo $0 \leq x_2 < 1/6$ e o restante dos pontos no intervalo $1/6 \leq x_2 \leq 1$, conforme exemplificado na Figura 4.10. Esta função de mapeamento além de transformar a colocação espectral no domínio desejado, apresenta uma densidade de pontos maior na região próxima ao fundo do domínio real.

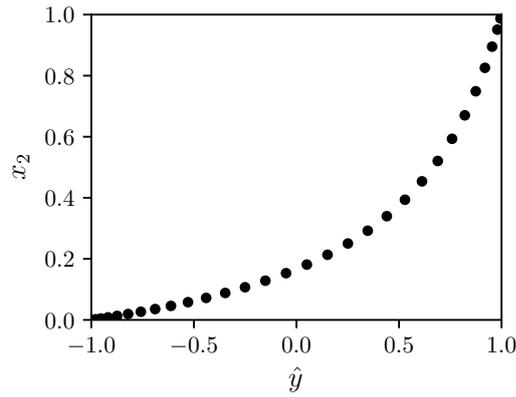


Figura 4.10 – Exemplo do uso da função de mapeamento descrita por Eq. (4.68) usando 32 pontos de colocação Chebyshev-Gauss-Lobatto.

Uma vez que a função de mapeamento é definida, também é necessário transpor os operadores diferenciais descritos anteriormente nas novas coordenadas. Este procedimento é realizado com auxílio da regra da cadeia:

$$\mathcal{D} = \hat{\mathcal{D}} \frac{d\hat{y}}{dx_2}, \tag{4.69a}$$

$$\mathcal{D}^2 = \hat{\mathcal{D}}^2 \left(\frac{d\hat{y}}{dx_2} \right)^2 + \hat{\mathcal{D}} \frac{d^2\hat{y}}{dx_2^2}, \tag{4.69b}$$

$$\mathcal{D}^4 = \hat{\mathcal{D}}^4 \left(\frac{d\hat{y}}{dx_2} \right)^4 + \hat{\mathcal{D}}^3 \left(6 \frac{d^2\hat{y}}{dx_2^2} \frac{d\hat{y}}{dx_2} \right) + \hat{\mathcal{D}}^2 \left[3 \left(\frac{d^2\hat{y}}{dx_2^2} \right)^2 + 4 \frac{d^3\hat{y}}{dx_2^3} \frac{d\hat{y}}{dx_2} \right] + \hat{\mathcal{D}} \frac{d^4\hat{y}}{dx_2^4}, \tag{4.69c}$$

onde \mathcal{D}^n é o operador de derivação de ordem n no domínio da aplicação.

5 Resultados e Discussões

Este capítulo tem como finalidade apresentar os resultados obtidos neste estudo e promover discussões. A apresentação dos resultados é realizada em três partes: primeiramente os resultados das simulações utilizando a configuração *lock-exchange*, posteriormente resultados das simulações realizadas por meio do modelo da frente em equilíbrio e finalmente os resultados relativos ao modelo proposto para a origem das estruturas de lobos e fendas.

5.1 Simulações na configuração *Lock-exchange*

Tomando como referência a configuração de escoamento *lock-exchange*, foram realizadas três simulações numéricas variando o número de Reynolds, mantendo o número de Schmidt e tamanho do domínio computacional constantes. Para todas as simulações foi adotado o valor $Sc = 1$, com o objetivo de minimizar o custo computacional, uma vez que tal parâmetro tem grande impacto no dimensionamento da malha de cálculo. Porém, de acordo com Härtel et al. (2000), esta aproximação é razoável pelo fato de que, em seu trabalho, foi constatado que o número de Schmidt não promove grandes alterações nas características gerais de uma corrente de densidade.

Os parâmetros numéricos das simulações são sumarizados na Tabela 5.1. Foram realizados três casos de simulação variando o número de Reynolds, sendo que os valores desse número adimensional para esse estudo estão na mesma faixa dos valores adotados por Cantero et al. (2007). Todos os casos possuem um domínio computacional $(L_1 \times L_2 \times L_3) = (25 \times 1 \times 4)$ com a interface entre os fluidos posicionada em $x_{f,0} = 12,5$, desta forma todos os casos reproduzem correntes de densidade que se propagam por 12,5 unidades de comprimento. Normalmente a literatura apresenta casos com canais mais estreitos (SIMPSON, 1972; HACKER et al., 1996; CANTERO et al., 2007; HUGHES; LINDEN, 2016), com comprimento longitudinal variando no intervalo $0,5 \leq L_3 \leq 1,5$, porém no presente estudo optou-se por utilizar $L_3 = 4$ com o objetivo de obter uma maior amostragem de estruturas de lobos e fendas. Nos casos LE1e3 e LE2.5e3 foi utilizado a abordagem de Simulação Numérica Direta (DNS), caracterizados pelo emprego do esquema numérico O6DNS com $n_\pi = 4$ (FRANTZ, 2018), enquanto que o caso LE5e3 foi resolvido por meio da abordagem de Simulação Implícita de Grandes Escalas (ILES), baseada no esquema numérico O6LES com $n_\pi = 16$. O dimensionamento da malha de cálculo para os casos simulados com DNS foi baseado na ordem de grandeza da escala de Kolmogorov (MÖLLER; SILVESTRINI, 2004). Já para o caso LE5e3 foi considerado aproximadamente 2% dos pontos necessários para realizar uma DNS com mesmo valor

Tabela 5.1 – Parâmetros das simulações na configuração *Lock-exchange* (LE). Todas os casos de simulação possuem $Sc = 1$.

Caso	LE1e3	LE2.5e3	LE5e3
Re	10^3	2.5×10^3	5×10^3
L_1	25	25	25
L_2	1	1	1
L_3	4	4	4
$x_{f,0}$	12,5	12,5	12,5
n_1	1351	2701	1001
n_2	55	109	91
n_3	216	432	160
$n_1 \times n_2 \times n_3$	$\approx 1,6 \times 10^7$	$\approx 1,3 \times 10^8$	$\approx 1,4 \times 10^7$
Δt	10^{-3}	5×10^{-4}	10^{-3}
t_f	37	35	31
Esquema numérico	O6DNS	O6DNS	O6LES
n_π	4	4	16

do número de Reynolds, tal quantidade de pontos na malha de cálculo é viabilizada pelo uso da abordagem ILES. Foi tomado como tempo total de simulação (t_f) o tempo necessário para a corrente alcançar o final do canal, uma vez que a velocidade da frente de uma corrente de densidade é uma função do número Reynolds o tempo necessário de simulação é inversamente proporcional ao valor de Re .

Os resultados destas simulações estão organizados em duas partes: primeiramente são apresentadas características gerais do escoamento, contendo comparações dos resultados obtidos com as relações empíricas de [Simpson \(1972\)](#) apresentadas anteriormente, e posteriormente os resultados do balanço de energia e eficiência de mistura.

5.1.1 Características gerais

Conforme mencionado, ao longo desta sub-seção serão apresentados resultados das simulações realizadas na configuração de escoamento *lock-exchange*. Contendo um descritivo geral das características de uma corrente de densidade nestas condições e comparações da altura do nariz e comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas com Eq. (3.6) e Eq. (3.7) respectivamente. Para realizar tais comparações, torna-se necessário determinar, para cada caso simulado, as alturas do nariz e da cabeça da corrente, a velocidade da frente, o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e o número de Reynolds da cabeça da corrente conforme a Eq. (3.5). Para tanto, emprega-se os métodos descritos anteriormente.

Na Figura 5.1 é apresentado a evolução temporal de uma corrente de densidade resultante do caso LE2.5e3 com o auxílio de iso-superfícies de concentração em diferentes instantes de tempo. Conforme descrito na literatura ([SIMPSON, 1999](#)), inicialmente

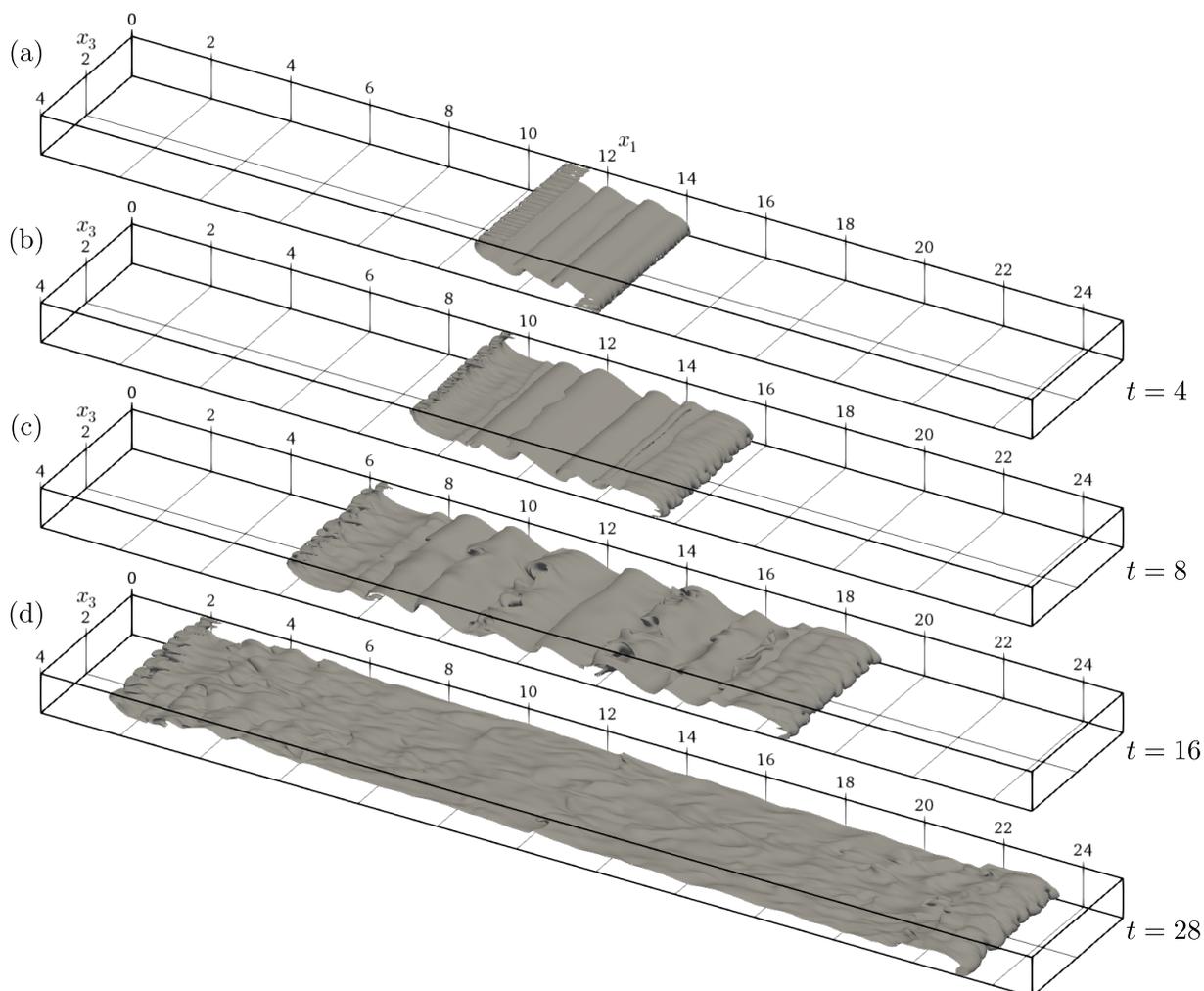


Figura 5.1 – Iso-superfície de concentração do caso LE2.5e3 nos instantes de tempo $t = 4$ (a), $t = 8$ (b), $t = 16$ (c) e $t = 28$ (d). Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.

(Figura 5.1a) existe a formação de vórtices de Kelvin-Helmholtz resultantes do gradiente de pressão imposto pela condição inicial do problema. Nesse estágio inicial do escoamento é caracterizado por escoamento praticamente bidimensional com leves oscilações da região frontal na direção transversal à propagação do escoamento (SIMPSON, 1999). Posteriormente (Figuras 5.1b e 5.1c), o escoamento continua propagando-se simetricamente na direção x_1 e observa-se a formação de novos vórtices de Kelvin-Helmholtz no corpo da corrente e o crescimento das estruturas de lobos e fendas na cabeça da corrente. Uma vez que a formação de vórtices de Kelvin-Helmholtz estão associados ao crescimento de uma instabilidade cisalhante (DRAZIN; REID, 2004) com um comprimento de onda bem definido, quanto maior o comprimento do corpo da corrente mais vórtices são observados. Durante estes instantes de tempo intermediários ocorrem as maiores taxas de entranhamento de fluido ambiente, devido a formação dos vórtices de Kelvin-Helmholtz, conforme descrito por Ottolenghi et al. (2016). Em instantes de tempo mais avançados

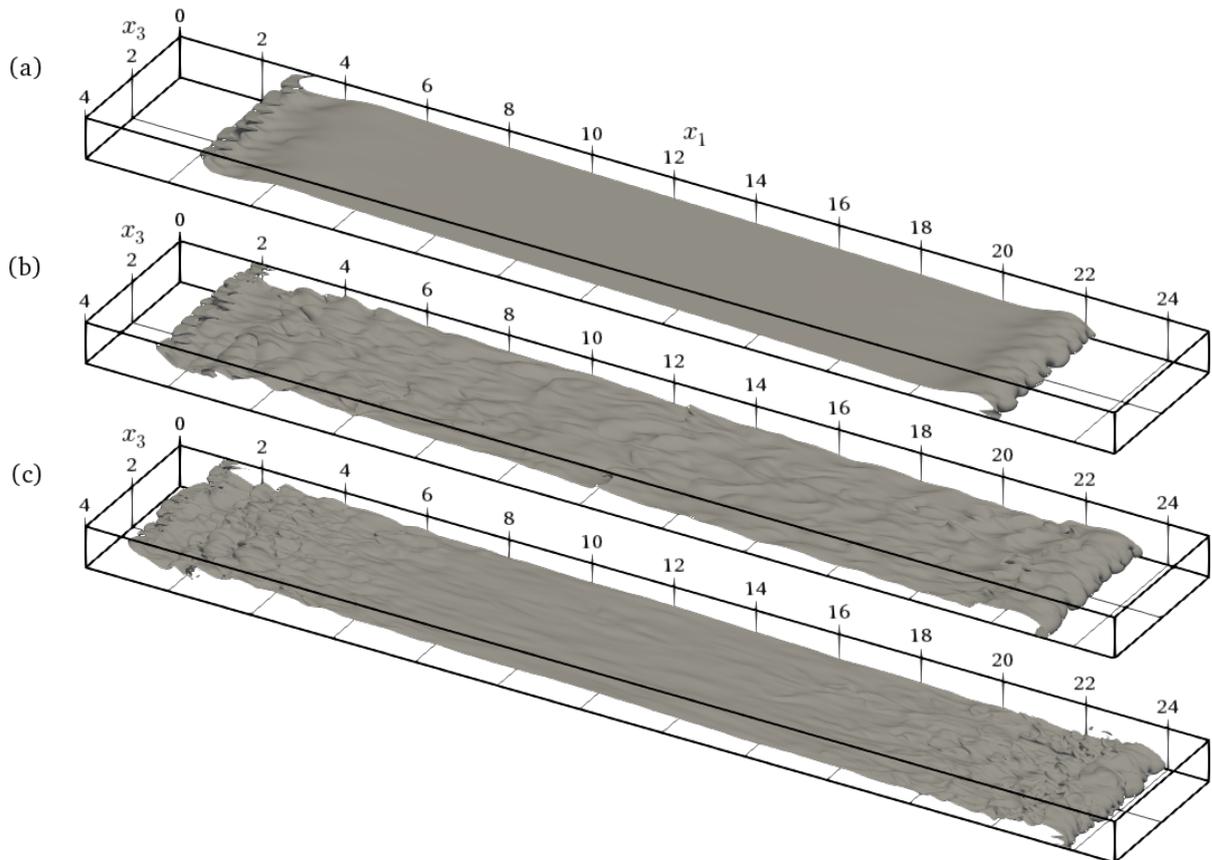


Figura 5.2 – Iso-superfície de concentração para os casos LE1e3 (a), LE2.5e3 (b) e LE5e3 (c) no instante de tempo $t = 28$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.

(Figura 5.1d), os efeitos de dissipação viscosa do escoamento tornam-se mais importantes e não é observado a formação de novos vórtices de Kelvin-Helmholtz.

De uma maneira qualitativa, observa-se a influência do número de Reynolds nesta configuração a partir das iso-superfícies de concentração no instante de tempo $t = 28$, apresentadas na Figura 5.2. Para todos os valores de número de Reynolds foi observado uma evolução temporal do escoamento semelhante ao do caso LE2.5e3, apresentada na Figura 5.1. Todos os casos apresentam as estruturas de lobos e fendas na região frontal do escoamento e conforme esperado na Eq. (3.7), quanto maior o número de Reynolds mais refinadas são estas estruturas. Além disso nota-se que quanto maior o valor de Re , a corrente está mais próxima do final do canal. Este fato justificado pela velocidade da frente ser uma função crescente do número de Reynolds (CANTERO et al., 2007), logo para um mesmo instante de tempo o caso com maior Re deve apresentar posição da frente mais avançada do que os demais. O caso LE5e3 deveria apresentar irregularidades mais intensas na iso-superfície no intervalo $6 \leq x_1 \leq 18$ do que o caso LE2.5e3, porque descreve um escoamento mais turbulento. Esta anomalia é atribuída ao uso da abordagem de Simulação Implícita de Grandes Escalas, assim a dissipação artificial introduzida na derivação de segunda ordem tende a suavizar a iso-superfície no intervalo

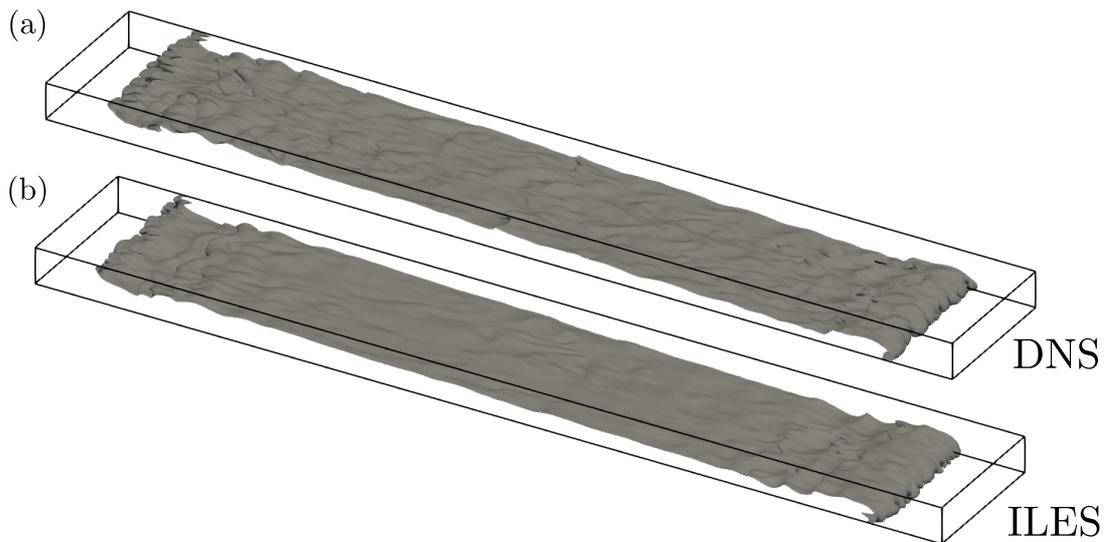


Figura 5.3 – Iso-superfície de concentração para o caso LE2.5e3 utilizando a abordagem DNS (a) e a abordagem ILES (b) no instante de tempo $t = 28$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.

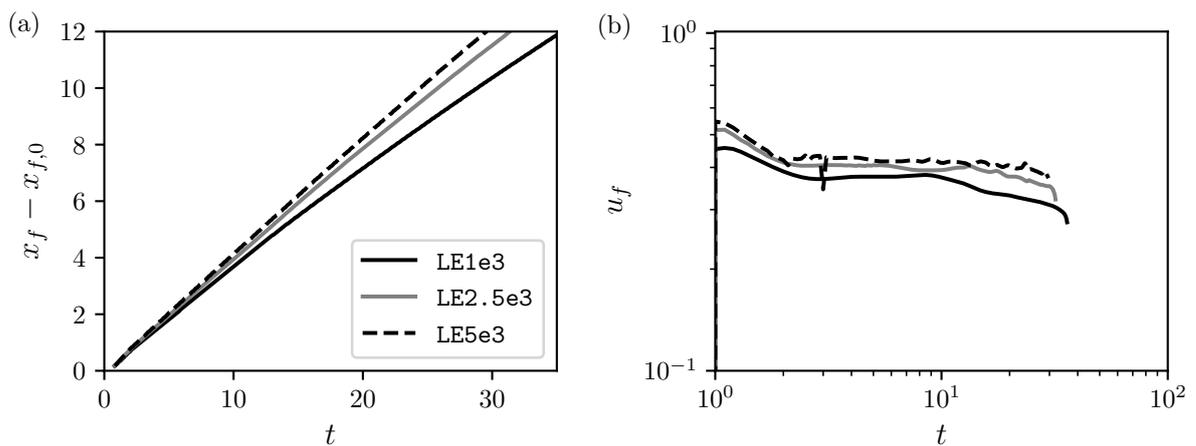


Figura 5.4 – Evolução temporal da posição da frente (a) e velocidade da frente (b) dos caso *lock-exchange*. Na posição da frente foi subtraído a posição inicial $x_{f,0}$.

descrito. Este efeito causado pela dissipação artificial pode ser mais facilmente observado na [Figure 5.3](#), onde é apresentado o caso LE2.5e3 no mesmo instante de tempo utilizando as abordagens de Simulação Numérica Direta [Figure 5.3a](#) e Simulação Implícita de Grandes Escalas [Figure 5.3b](#) e nota-se o mesmo efeito na iso-superfície.

A posição e velocidade da frente de cada caso de simulação são apresentados nas Figuras [5.4a](#) e [5.4b](#) respectivamente. Conforme descrito na literatura ([CANTERO et al., 2007](#)), esta configuração de escoamento é caracterizada por uma aceleração nos tempos iniciais seguida por um regime de velocidade constante ao longo do tempo e posteriormente uma desaceleração quando a corrente se aproxima do final do canal. A aceleração inicial do escoamento pode ser observada nos picos de velocidade da frente

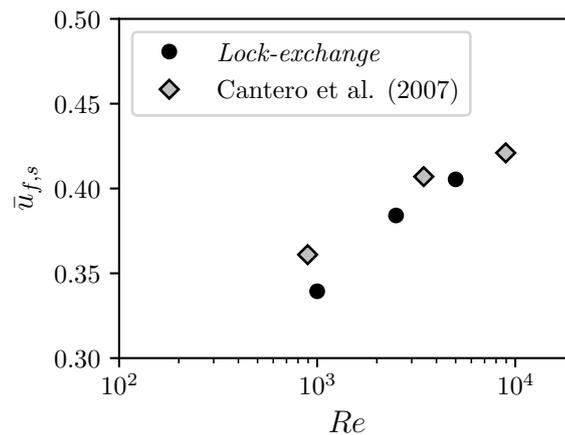


Figura 5.5 – Velocidade média da frente durante a fase de *slumping* em função do número de Reynolds.

para $t = 1$, apresentados na Figura 5.4b. Os resultados de Marino et al. (2005) sugerem que uma corrente de densidade na configuração *lock-exchange* devem apresentar uma velocidade da frente aproximadamente constante entre o final da fase aceleração inicial e a desaceleração final da corrente. Porém no caso LE1e3 observa-se que u_f começa a decair no instante de tempo $t \approx 10$, o que corresponde a uma corrente que se propagou com velocidade constante por aproximadamente 32% do comprimento do canal, ao contrário do que sugere a Figura 3.5. Este comportamento anômalo, em relação as observações de Marino et al. (2005), pode ser atribuído a uma maior relevância de efeitos dissipativos característicos de baixos números de Reynolds, que não foram previstos pela Eq. (3.4).

Com base nas medições de velocidade da frente ao longo do tempo de cada caso, foram calculados valores médios durante o intervalo de velocidade aproximadamente constante para posteriormente determinar o número de Reynolds da cabeça (Re_{head}) e a entrada de dados das simulações com o modelo da frente em equilíbrio. Para os casos LE1e3, LE2.5e3 e LE5e3 foram determinadas velocidades médias da frente de 0,3394, 0,3841 e 0,4054 respectivamente. Quando comparado com valores médios de u_f calculados por Cantero et al. (2007) em condições semelhantes, os resultados obtidos são, em média, 6% menores conforme apresentado na Figura 5.5. Esta diferença com os resultados de referência está de acordo com o esperado, uma vez que no presente estudo é empregado condição de contorno de não-deslizamento no plano de topo enquanto que Cantero et al. (2007) utiliza condição de contorno de deslizamento livre no mesmo plano. O emprego da condição de contorno de não-deslizamento no plano de topo tende a diminuir a velocidade da frente da corrente de densidade, uma vez que tal condição impõe uma resistência de propagação do escoamento. O número de Reynolds da cabeça da corrente dos casos LE1e3, LE2.5e3 e LE5e3 correspondem à $2,54 \times 10^2$, $6,72 \times 10^2$ e $1,49 \times 10^3$ respectivamente.

A relação de alturas do nariz e da cabeça da corrente de densidade em função

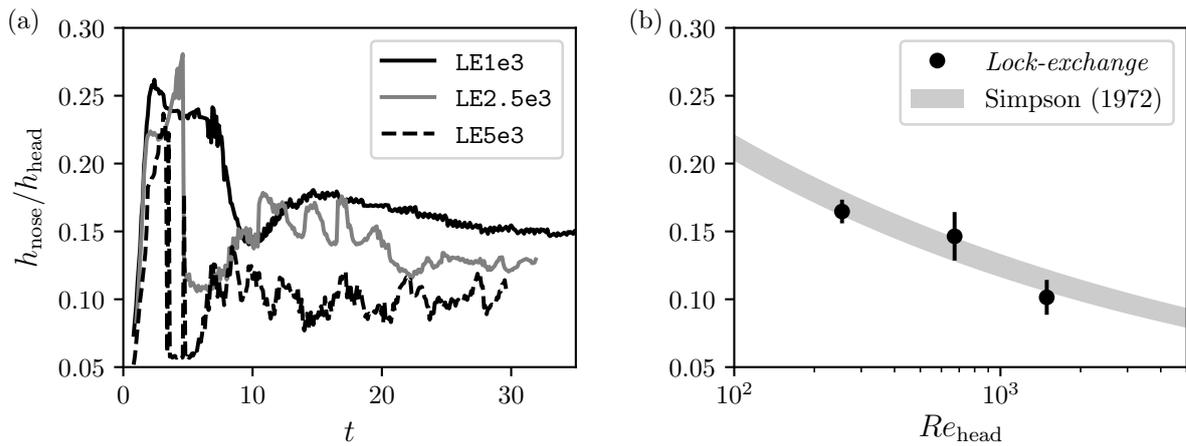


Figura 5.6 – Relação entre altura do nariz e altura da cabeça da corrente de densidade em função do tempo para cada caso *lock-exchange* (a) e comparação dos valores médios desta relação de alturas em função do número de Reynolds da cabeça com a relação empírica proposta por [Simpson \(1972\)](#) (b). As linhas verticais em (b) indicam o desvio padrão associado às médias de (a).

do tempo e do número de Reynolds da cabeça são apresentados nas figuras 5.6a e 5.6b, respectivamente. Inicialmente, observado-se grandes variações no comportamento temporal desta relação de alturas, que podem ser atribuídas a aceleração inicial do escoamento e posteriormente tende a flutuar em torno de uma média. Quando é tomada a média dessa grandeza em tempos mais avançados e comparado com a relação empírica correspondente (Eq. 3.6), nota-se que os resultados obtidos nesta configuração apresentam uma concordância razoável com o comportamento previsto na literatura ([SIMPSON, 1972](#)). Devido ao expoente da Eq. (3.6) ser apresentado em função de um valor médio com uma incerteza associada, a relação empírica de $h_{\text{nose}}/h_{\text{head}}$ é apresentada na Figura 5.6b com uma faixa dos possíveis valores desta grandeza para cada valor do número de Reynolds da cabeça da corrente.

Objetivando a determinação do comprimento médio das estruturas de lobos e fendas, foram retiradas, dos dados obtidos com as simulações, iso-linhas de concentração no leito do canal para diferentes instantes de tempo conforme apresentado na Figura 5.7. Nesta figura a direção de propagação do escoamento é da esquerda para a direita, nota-se que inicialmente são formadas estruturas mais refinadas que ao longo do tempo se combinam para formar estruturas com maior comprimento de onda. Posteriormente quando alcançam um determinado comprimento de onda, há uma bifurcação que forma duas novas estruturas. A evolução temporal do comprimento de onda destas estruturas podem ser visualizadas com maior facilidade com auxílio da Figura 5.8, onde é apresentado iso-linhas de concentração no fundo do canal para três diferentes instantes de tempo característicos (Figura 5.8a) e a distribuição de comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas em cada um destes instantes de tempo (Figuras 5.8b, 5.8c e 5.8d) para o caso LE2.5e3. Inicialmente (Figura 5.8b) é observado que a distribuição é dominada

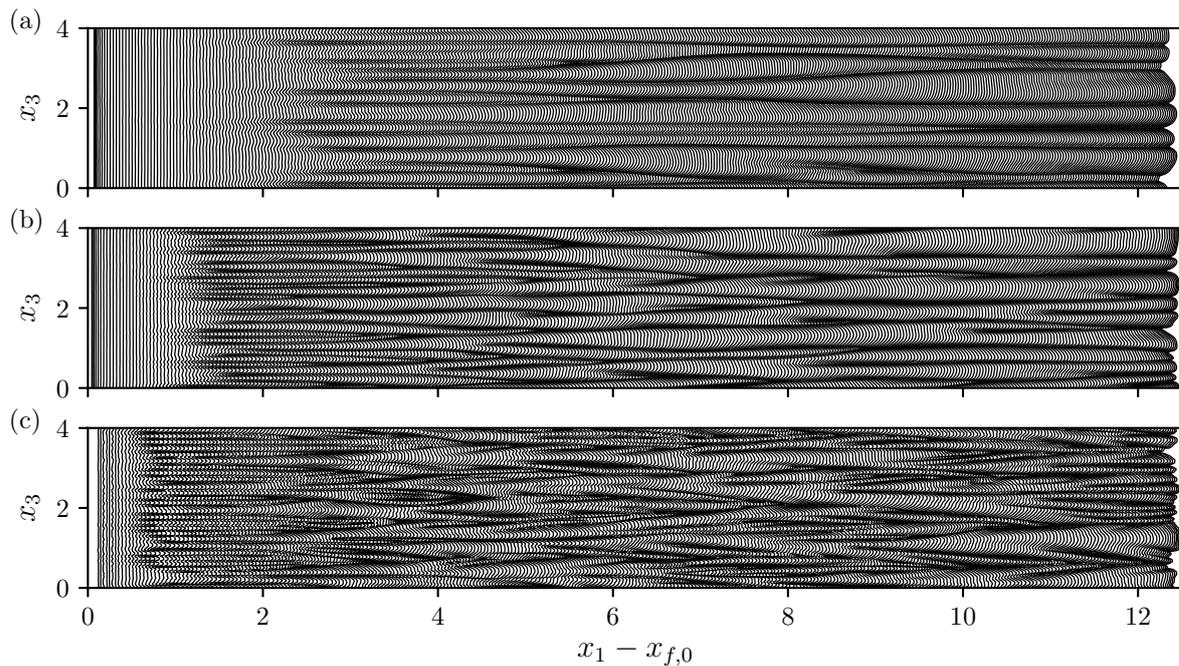


Figura 5.7 – Evolução temporal de iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para cada caso de simulação *lock-exchange*: (a) LE1e3, (b) LE2.5e3 e (c) LE5e3. Em todas as figuras foi adotado um incremento de tempo de 0,1 tempos adimensionais e um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas.

por valores de comprimentos de onda menores, quando comparados aos demais instantes de tempo, que correspondem as estruturas mais refinadas para este valor do número de Reynolds. Posteriormente (Figura 5.8c), a distribuição é ocupada por uma maior variedade no comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas. Esta maior riqueza de escalas está associada a um estágio intermediário em que o escoamento ainda está em desenvolvimento. Finalmente (Figura 5.8d), o escoamento reproduz estruturas mais largas que correspondem as maiores estruturas possíveis nas condições impostas por este caso de simulação. De acordo com trabalhos anteriores (HÄRTEL et al., 2000; XIE et al., 2019), as estruturas mais refinadas que ocorrem nos tempos iniciais (por exemplo na Figura 5.8b) estão associadas a uma dinâmica linear, sugerindo a existência de uma instabilidade hidrodinâmica com um comprimento de onda bem definido que é uma função do número de Reynolds. Enquanto que os fenômenos de mescla e bifurcação de estruturas são não-lineares.

A comparação entre os resultados de comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas com a relação empírica correspondente é realizada tomando uma média temporal a partir do tempo em que inicia a ocorrência de mescla a bifurcação das estruturas, uma vez que os desenvolvimento inicial dos lobos e fendas não foi contemplado no estudo de Simpson (1972). A Figura 5.9 expõe tal comparação, onde observa-se que casos LE2.5e3 e LE5e3 apresentam concordância com a Eq. (3.7), enquanto que o

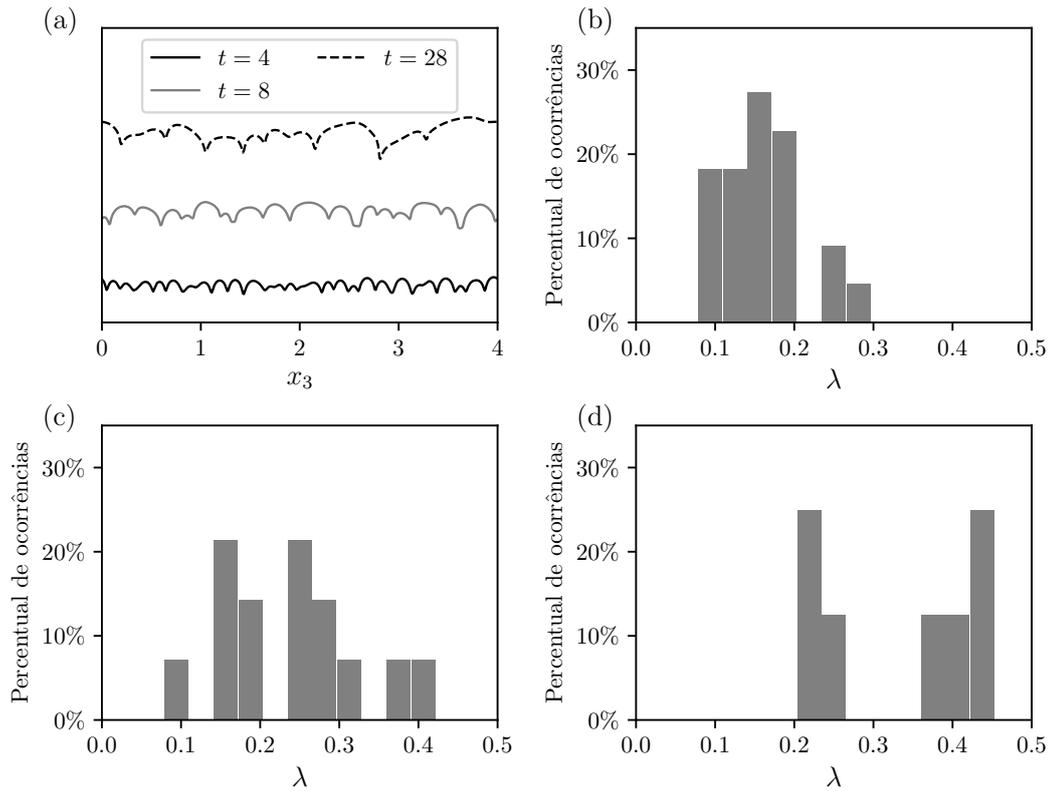


Figura 5.8 – Iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para o caso de simulação LE2.5e3 para diferentes instantes de tempo e o histograma de comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas para $t = 4$ (b), $t = 8$ (c) e $t = 28$ (d). Foi adotado um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas da sub-figura (a).

caso LE1e3 apresenta um valor de $\bar{\lambda}/h_{\text{head}}$ que corresponde a estruturas mais refinadas do que as previstas por Simpson (1972). Esta discordância, indicada por uma diferença de aproximadamente 20%, pode ser atribuída ao comprimento de canal empregado no caso LE1e3 não ser longo o suficiente para permitir o crescimento das estruturas de lobos e fendas. De maneira similar à Figura 5.6, a Eq. (3.7) é apresentada na Figura 5.9 com uma faixa que leva em consideração a incerteza associada a relação de comprimentos proposta por Simpson (1972).

5.1.2 Balanço de energia e eficiência de mistura

Os resultados dos balanços de energia apresentados nesta sub-seção foram calculados de acordo com a formulação descrita anteriormente, com exceção do caso LE5e3 que necessita de um ajuste para levar em consideração a dissipação aportada pelo esquema numérico O6LES. Esta formulação alternativa tem como objetivo determinar a dissipação do escoamento em termos da derivada de segunda ordem, assumindo que existe um resíduo numérico, aqui denominado como ε_{num} . Integrando no volume de controle o produto entre o campo de velocidades e o termo viscoso das equações de Navier-

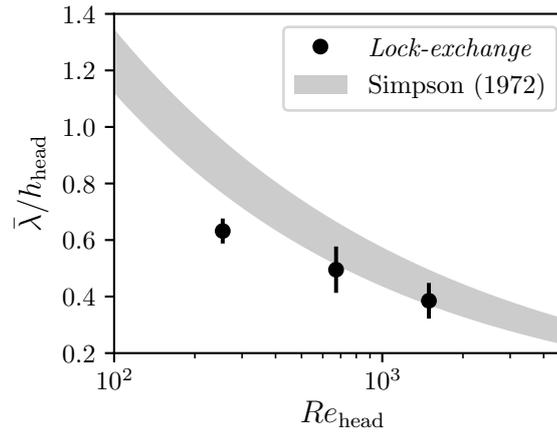


Figura 5.9 – Comparação da relação entre o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça da corrente de densidade em função do número de Reynolds da cabeça com a relação empírica proposta por [Simpson \(1972\)](#). As linhas verticais indicam o desvio padrão associado aos valores médios.

Stokes e posteriormente aplicando as condições de contorno, chega-se a uma relação entre a dissipação total ε_T ([DAIRAY et al., 2017](#)) e a dissipação viscosa do escoamento, definida na Eq. (4.30):

$$\underbrace{-\frac{1}{Re} \int_{\Omega} u_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega}_{\varepsilon_T} = \underbrace{\frac{1}{Re} \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} d\Omega}_{\varepsilon} + \varepsilon_{\text{num}}, \quad (5.1)$$

sendo ε_{num} a dissipação artificial aportada pelo esquema numérico. Sendo assim, o cálculo das grandezas dependentes da dissipação viscosa, tais como a energia interna \mathcal{I} e a eficiência de mistura η , no caso LE5e3 é realizado com a Eq. (5.1). No caso particular de Simulação Numérica Direta, $\varepsilon_{\text{num}} \rightarrow 0$ devido a escolha de esquema numérico e da malha da cálculo, e tanto ε_T quanto ε são equivalentes.

As distribuições de cada parcela de energia em função do tempo em todos os casos são apresentadas na Figura 5.10. Em um primeiro momento nota-se que há conservação da energia no volume de controle em todos os casos, indicado pela linha denominada como “Total”. Por ser uma configuração de escoamento em que o sistema é fechado e é permitido apenas a transformação da energia, a conservação da energia é um bom indicativo de que os parâmetros relativos aos métodos numéricos empregados na solução do problema foram propriamente dimensionados. Também observa-se para todos os casos que a energia potencial *background* quando $t = 0$ equivale a 50% da energia potencial inicial, o que seria uma característica da condição inicial. De acordo com [Hughes e Linden \(2016\)](#), a relação entre energia potencial *background* e energia potencial na condição inicial em configuração *lock-release* é função apenas de parâmetros

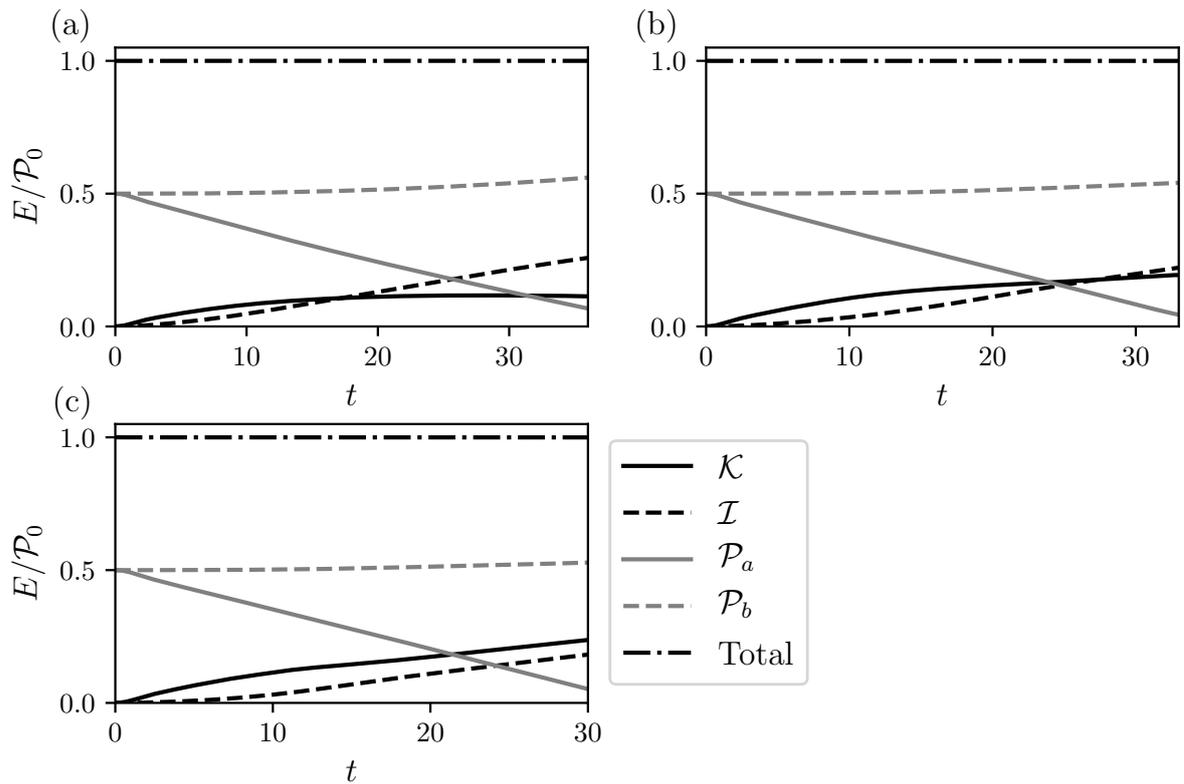


Figura 5.10 – Balanço de energia em função do tempo para os casos de simulação LE1e3 (a), LE2.5e3 (b) e LE5e3 (c), sendo E uma parcela qualquer de energia.

geométricos do problema:

$$\frac{\mathcal{P}_{b,0}}{\mathcal{P}_0} = \frac{x_{f,0}}{L_1}. \quad (5.2)$$

Quando assumimos configuração *lock-exchange*, esta relação assumiu o valor constante de 0,5 correspondendo ao mesmo valor encontrado em todos os casos de simulação (Figura 5.10).

Conforme reportado em trabalhos anteriores (ESPATH et al., 2015; FRANCISCO et al., 2018), observa-se um decaimento da energia potencial acompanhado de um crescimento de energia cinética. Uma vez que a energia potencial *background* continua praticamente constante até $t \approx 15$, pode-se atribuir o decaimento inicial da energia potencial disponível apenas a sua transformação em energia cinética por meio do fluxo de *buoyancy*. Em instantes de tempo posteriores o crescimento da energia interna e da energia potencial *background* tornam-se mais importantes, impactando diretamente no crescimento da energia cinética que pode ser associado decaimento da velocidade da frente observado na Figura 5.4b. Quando estas variações de energia interna e energia potencial *background* tornam-se mais importantes, é um indício de que os efeitos de dissipação viscosa e mistura irreversível exercem uma maior influência na dinâmica do escoamento.

Posteriormente foi determinado a eficiência de mistura de cada caso e comparado

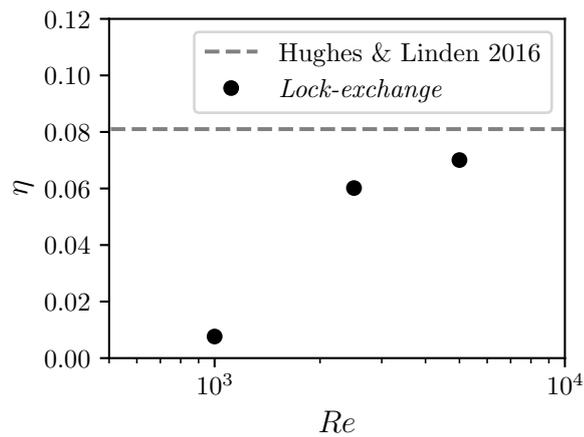


Figura 5.11 – Eficiência de mistura em função do número de Reynolds.

com o valor de base previsto por Hughes e Linden (2016) a partir da Eq. (3.9) usando $\delta_{ML} = 0.33$, conforme apresentado na Figura 5.11. De acordo com investigações anteriores (ILICAK, 2014; HUGHES; LINDEN, 2016), a eficiência de mistura tende a ter comportamento assintótico em função do número de Reynolds. Tal comportamento é observado na Figura 5.11 onde a eficiência de mistura do caso LE5e3 se aproxima de valor teórico $\eta = 0,081$, podendo ser interpretado como uma boa concordância dos resultados obtidos com a literatura. Conforme reportado na literatura (HUGHES; LINDEN, 2016), estes resultados fornecem indícios de que o valor da eficiência de mistura em uma corrente de densidade na configuração *lock-exchange* é descrito, em sua maior parte, pelos efeitos do corpo da corrente e, desta forma, os fenômenos de mistura irreversível presentes na cabeça da corrente podem ser negligenciados.

É importante constatar que em nenhum trabalho encontrado na literatura a respeito deste assunto emprega a abordagem de Simulação de Grandes Escalas na determinação da eficiência de mistura com a metodologia utilizada neste estudo. Os resultados adquiridos com o caso LE5e3 sugerem que o emprego do esquema numérico O6LES pode ser uma alternativa na quantificação da eficiência de mistura para números de Reynolds elevados.

5.2 Simulações do Modelo da Frente em Equilíbrio (MFE)

Nesta seção serão apresentados os resultados relativos as simulações na configuração de modelo da frente em equilíbrio. Assim como nas simulações na configuração *lock-exchange*, foram realizadas três simulações numéricas variando o número de Reynolds e mantendo o número Schmidt constante com um valor $Sc = 1$, onde os demais parâmetros estão sumarizados na Tabela 5.2. O parâmetro extra desta configuração, a velocidade da frente (u_f), foi tomado das simulações *lock-exchange* correspondente a cada caso de modelo da frente em equilíbrio. Nos casos MFE1e3 e MFE2.5e3 considerado

Tabela 5.2 – Parâmetros das simulações na configuração *Modelo da frente em equilíbrio* (MFE).

Caso	MFE1e3	MFE2.5e3	MFE5e3
Re	10^3	$2,5 \times 10^3$	5×10^3
u_f	0,3394	0,3841	0,4054
L_1	10	10	12
L_2	1	1	1
L_3	4	4	12
$x_{f,0}$	5	5	5
n_1	541	1081	481
n_2	55	109	91
n_3	216	432	480
$n_1 \times n_2 \times n_3$	$\approx 6,4 \times 10^6$	$\approx 5 \times 10^7$	$\approx 2,1 \times 10^7$
Δt	10^{-3}	5×10^{-4}	10^{-3}
t_f	500	580	600
Esquema numérico	O6DNS	O6DNS	O6LES
n_π	4	4	16

um domínio computacional $(L_1 \times L_2 \times L_3) = (10 \times 1 \times 4)$ e mantendo a abordagem de Simulação Numérica Direta, enquanto que na simulação MFE5e3 utiliza-se um domínio $(L_1 \times L_2 \times L_3) = (12 \times 1 \times 12)$ e a abordagem de Simulação Implícita de Grandes Escalas. Também foi arbitrado uma posição inicial da frente $x_{f,0} = 5$ para todos os casos. Os valores dos parâmetros L_1 e $x_{f,0}$ devem ser arbitrados de uma forma em que o escoamento tenha espaço para se desenvolver e reproduzir um comprimento da cabeça da corrente de densidade (L_{head}) equivalente ao dos casos *lock-exchange*, e também que a posição da frente no tempo final da simulação esteja suficientemente distante da fronteira $x_1 = L_1$. A escolha de um domínio mais largo especialmente para o caso MFE5e3 foi motivada por observações em testes preliminares com mesmo número de Reynolds. Nestes testes notou-se que o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas possui uma dependência com a largura do domínio computacional durante o estado de equilíbrio do escoamento, sugerindo a possibilidade de um confinamento de tais estruturas. Todos casos nesta configuração de escoamento respeitam a mesma densidade de pontos da malha de cálculo por unidade de comprimento, incremento temporal e dissipação artificial (n_π) dos casos *lock-exchange* com mesmo número de Reynolds. Uma vez que esta configuração de escoamento permite realizar simulações em períodos de tempo arbitrários, nota-se que os tempos finais de simulação (t_f) são substancialmente maiores quando comparados com as simulações na configuração *lock-exchange*.

Os resultados das simulações referidas nesta seção serão apresentados em duas partes: primeiramente são exibidas características gerais desta configuração de escoamento, juntamente com comparações com as relações empíricas de Simpson (1972), e posteriormente resultados referentes às observações do estado de equilíbrio de casa

caso.

5.2.1 Características gerais

Ao longo desta sub-seção são apresentados resultados referentes as características das simulações do modelo da frente em equilíbrio. Incluindo um descritivo dos diferentes regimes de escoamento encontrados, as limitações de equivalência com as simulações na configuração *lock-exchange* e comparação da altura do nariz e comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas com Eq. (3.6) e Eq. (3.7) respectivamente.

De uma maneira qualitativa, foi observado que todas as simulações nesta configuração de escoamento possuem duas etapas: primeiramente uma etapa transiente e posteriormente um estado de equilíbrio em relação à posição da frente. Os tempos iniciais das simulações nesta configuração correspondem a um período de tempo em que o escoamento, partindo da condição inicial, se adapta até alcançar um estado de equilíbrio. Neste período transiente, foi observado a formação de vórtices de Kelvin-Helmholtz e estruturas de lobos e fendas com uma região frontal que, em média, é orientada perpendicular a direção de propagação do escoamento, conforme apresentado na Figura 5.12. De maneira similar aos casos na configuração *lock-exchange*, é verificado que quanto maior o número de Reynolds mais refinadas são as estruturas coerentes do escoamento. Também notou-se flutuações na posição da frente durante este período de tempo, porém tal fato é esperado uma vez que o escoamento partiu de uma condição inicial arbitrária e se adaptou à um estado de equilíbrio. Após um período de tempo suficientemente longo o escoamento entra em estado de equilíbrio, onde são observadas estruturas de lobos e fendas e mais largas quando comparadas ao período transiente e nota-se que não há o desenvolvimento de novos vórtices Kelvin-Helmholtz, conforme mostrado na Figura 5.13. Nos casos MFE2.5e3 e MFE5e3 observado-se que a posição da frente da corrente torna-se uma função da coordenada perpendicular à direção do escoamento, conforme apresentado nas Figuras 5.13b e 5.13c. Este efeito do comprimento lateral na região frontal da corrente, foi constatado em observações de estuários (HORNER-DEVINE; CHICKADEL, 2017) onde não há o confinamento lateral da corrente imposto pelas paredes do canal em abordagens experimentais.

A Figura 5.14 apresenta o comprimento da cabeça da corrente calculados tanto para as simulações na configuração *lock-exchange* quanto nas simulações com 15ma boa concordância quando comparados com os casos *lock-exchange* de mesmo número de Reynolds. O erro relativo deste comprimento entre o Modelo da Frente em Equilíbrio e a configuração *lock-exchange* foi estimado em 4,8% para $Re = 10^3$ e erros inferiores à 1,5% para os demais valores de Re . Estes resultados sugerem que o comprimento do domínio computacional (L_1) e a posição inicial da frente ($x_{f,0}$) utilizados para as simulações do Modelo da Frente em Equilíbrio foram propriamente dimensionados, uma vez que há

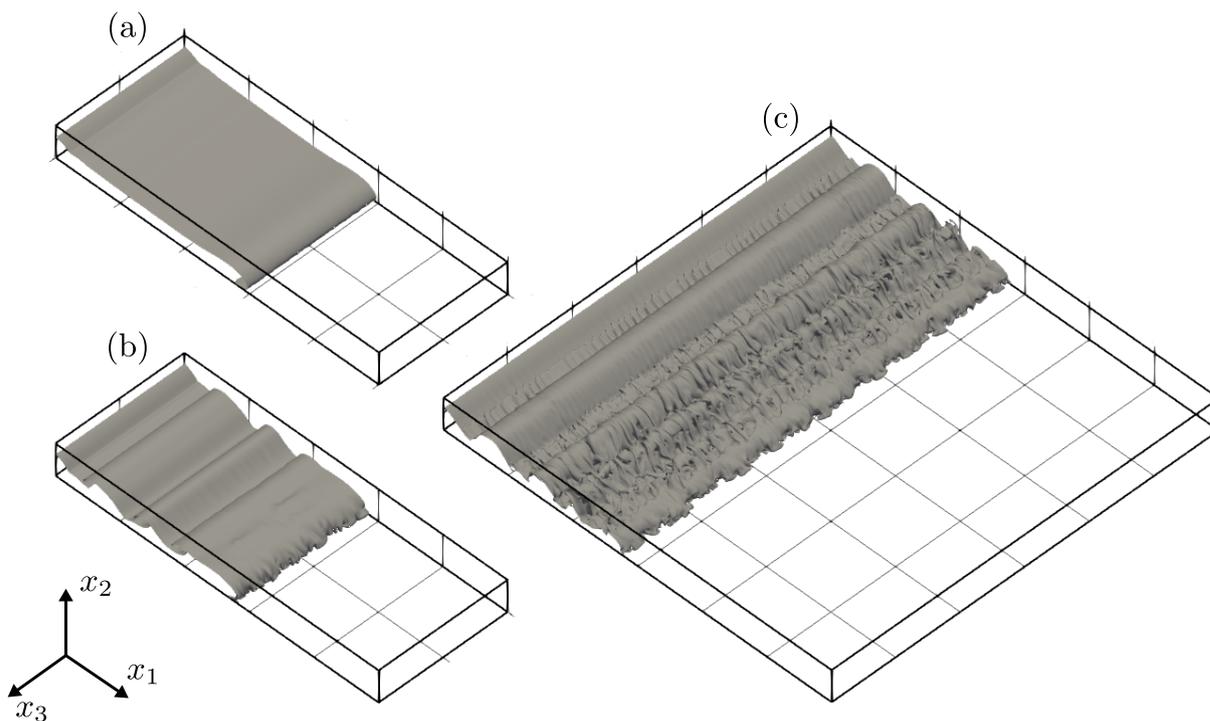


Figura 5.12 – Iso-superfície de concentração para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c) no instante de tempo $t = 20$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.

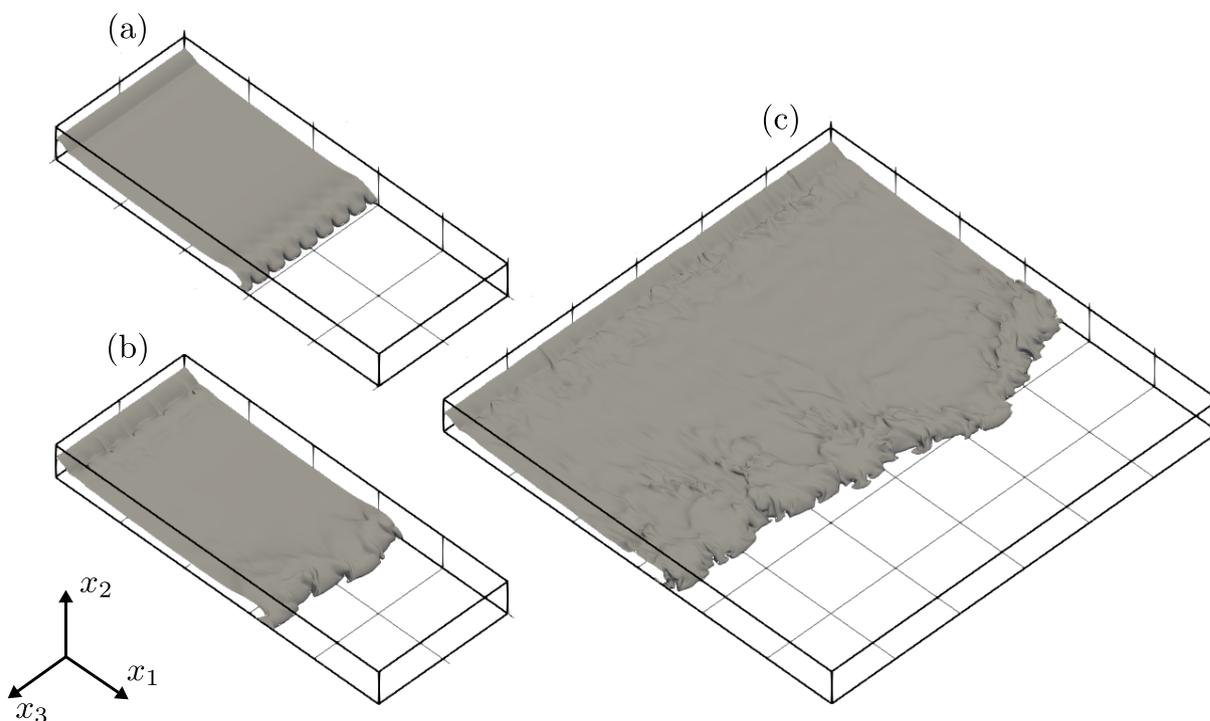


Figura 5.13 – Iso-superfície de concentração para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c) no instante de tempo $t = 500$. Foi adotado um iso-valor de concentração $\varphi = 0,5$ para renderizar as visualizações.

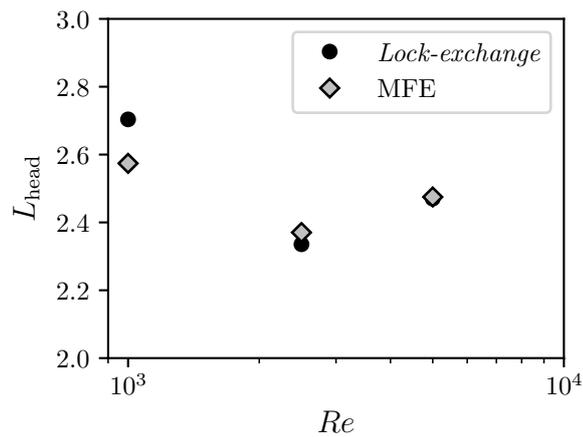


Figura 5.14 – Comprimento da cabeça da corrente de densidade em função do número de Reynolds.

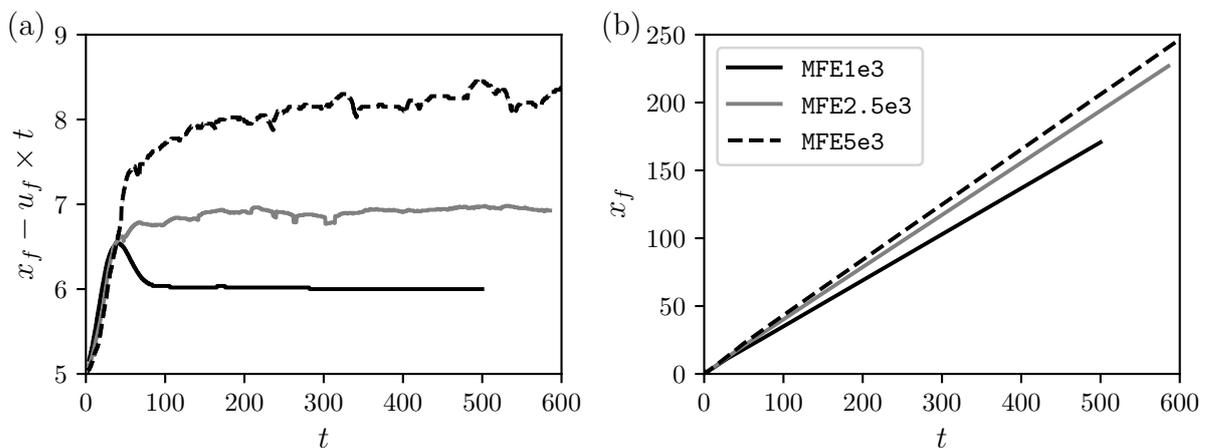


Figura 5.15 – Posição da frente no referencial móvel (a) e posição da frente global (b) para todos os casos de simulação no Modelo da Frente em Equilíbrio.

espaço o suficiente para o desenvolvimento do escoamento.

O estado de equilíbrio alcançado nos casos MFE pode ser melhor observado com auxílio da Figura 5.15a, onde é apresentado a posição da frente em função do tempo considerando o referencial móvel para cada caso de simulação. Inicialmente o escoamento exibe variações na posição da frente e posteriormente tende a alcançar um posição de equilíbrio. Estas variações da posição da frente são esperadas, uma vez que a condição inicial empregada na resolução do problema é arbitrária e não foi otimizada. Porém, quando a posição de equilíbrio é alcançada as variações desta grandeza tendem a ser pequenas, alcançando no máximo 3% do valor médio no caso MFE5e3 para $t > 300$. Quando é estimada a posição da frente global, ou seja sem o referencial móvel, as flutuações locais desta grandeza observadas na Figura 5.15a podem ser desprezadas, conforme apresentado na Figura 5.15b.

Revertendo a troca de coordenadas imposta pelo uso do referencial móvel, torna-

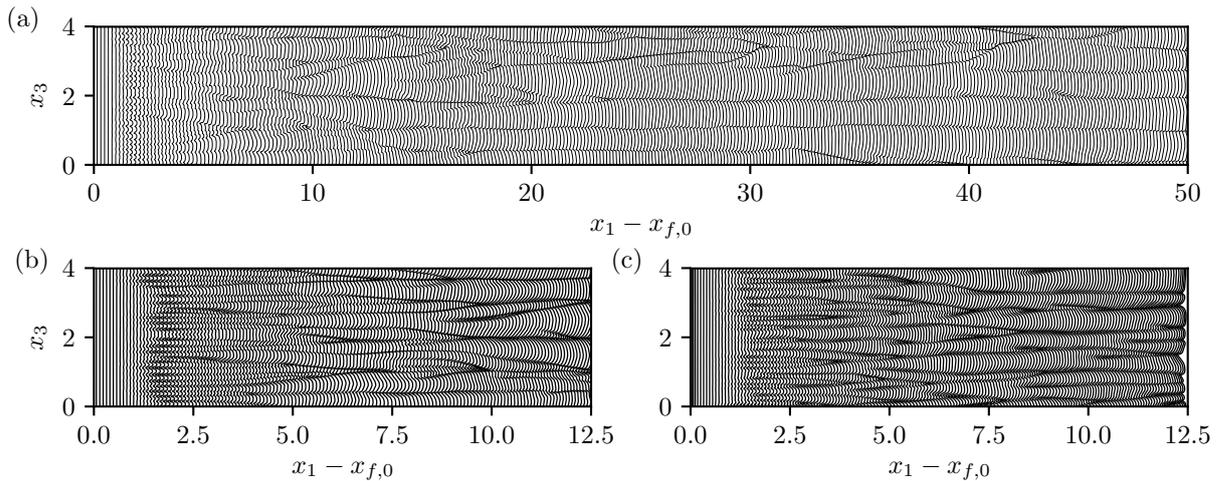


Figura 5.16 – Evolução temporal de iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para o caso de simulação MFE2.5e3 (a-b) e LE2.5e3 (c). A sub-figura (b) é uma ampliação da sub-figura (a) no intervalo $0 \leq x_1 - x_{f,0} \leq 12,5$. Em todas as figuras foi adotado um incremento de tempo de 0,2 tempos adimensionais e um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas.

se possível expor a evolução temporal das iso-linhas de concentração no fundo canal, conforme apresentado na Figura 5.16 para o caso MFE2.5e3 e Figura 5.17 para o caso MFE5e3. Nota-se na Figura 5.16a que a partir de $x_1 - x_{f,0} \approx 40$ (ou de acordo com a Figura 5.15b, no instante de tempo $t \approx 100$) o comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas torna-se praticamente uma constante. A verificação da equivalência entre o modelo da frente em equilíbrio e a configuração *lock-exchange* pode ser feita tomando parte do período transiente, equivalente ao comprimento do canal dos casos *lock-exchange*, como referência (Figura 5.16b). Observa-se que, assim como no caso LE2.5e3 (Figura 5.16c), primeiramente há um desenvolvimento de estruturas mais refinadas que ao longo do tempo se combinam para formar estruturas maiores, de maneira semelhante à Figura 5.1, e o mesmo pode ser observado na Figura 5.17. Porém devido a vantagem do MFE de realizar simulações com tempos suficiente longos, existe a possibilidade do escoamento desenvolver estruturas de lobos e fendas mais largas do que o observado na configuração *lock-exchange*, de acordo com o que observa-se nas Figuras 5.16a, 5.17b e 5.17c.

Com a finalidade de estabelecer uma comparação dos resultados obtidos com esta configuração de escoamento e as relações empíricas de Simpson (1972) citadas anteriormente, foi determinado o número de Reynolds da cabeça da corrente para cada caso. Este número adimensional resultante para os casos MFE1e3, MFE2.5e3 e MFE5e3 é de $2,1227 \times 10^2$, $5,8684 \times 10^2$ e $1,2193 \times 10^3$ respectivamente. Nota-se que os valores de Re_{head} encontrados nesta configuração são, em média, 15% menores quando comparados com as simulações *lock-exchange* correspondentes. Esta diferença está diretamente relacionada com a altura da cabeça (h_{head}), uma vez que a velocidade da frente

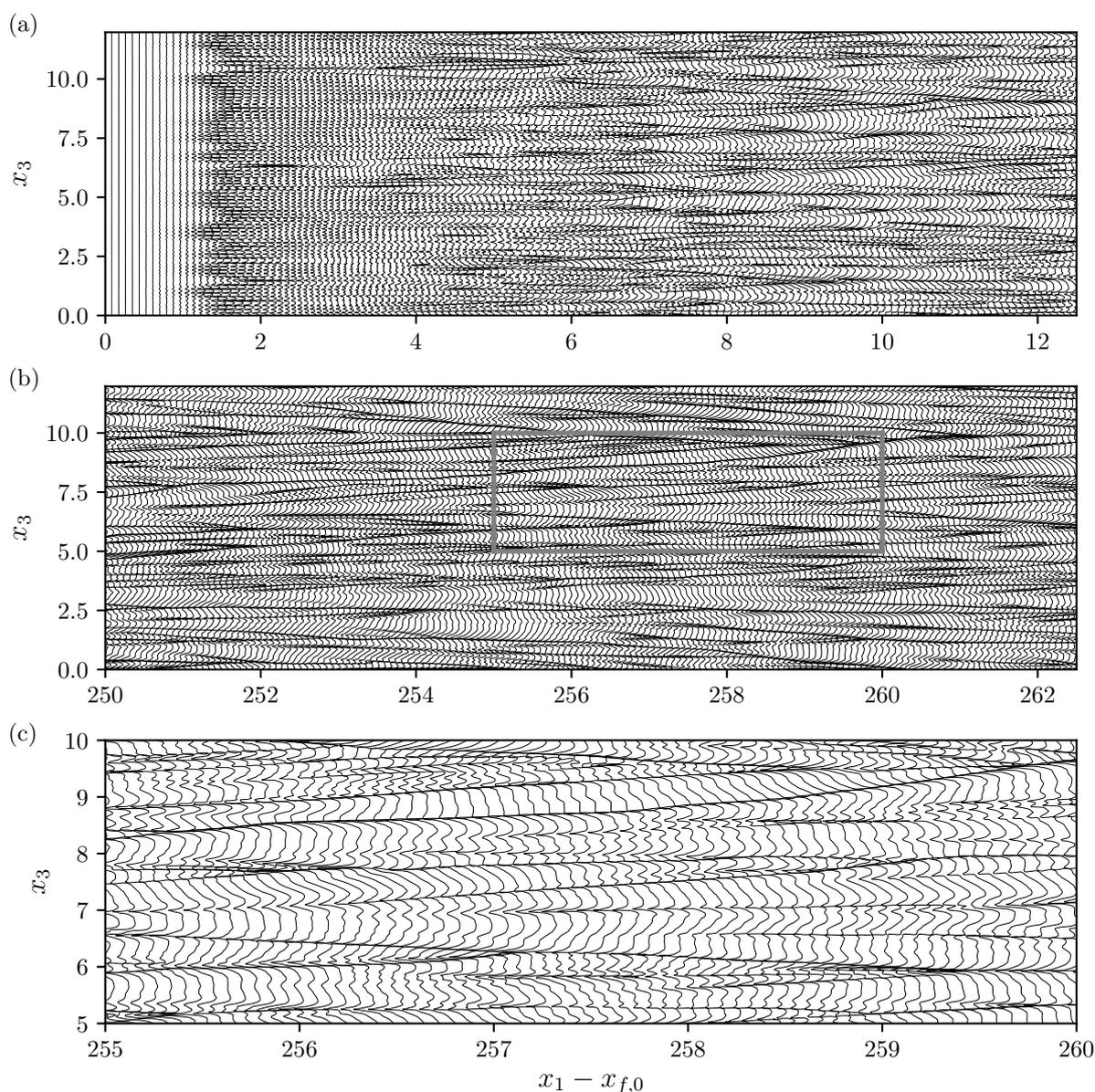


Figura 5.17 – Evolução temporal de iso-linhas de concentração no fundo do canal ($x_2 = 0$) para o caso de simulação MFE5e3, onde a sub-figura (a) representa o estado transiente, (b) o estado de equilíbrio e (c) é uma ampliação de (b) no retângulo cinza. Em todas as figuras foi adotado um incremento de tempo de 0,2 tempos adimensionais e um iso-valor de concentração de 10^{-2} para desenhar as linhas.

e a viscosidade cinemática seguem inalterados quando passamos da configuração *lock-exchange* para o Modelo da Frente em Equilíbrio. Devido a transformação na configuração de escoamento imposta pelo acoplamento do referencial móvel e as novas condições de contorno com perfis de velocidade e concentração arbitrários na fronteira $x_1 = 0$, o modelo proposto na presente formulação possui limitações em reproduzir o mesmo valor de altura da cabeça da corrente que os valores obtidos na configuração *lock-exchange*. Esta limitação fornece indícios de que há espaço para melhorias na formulação matemá-

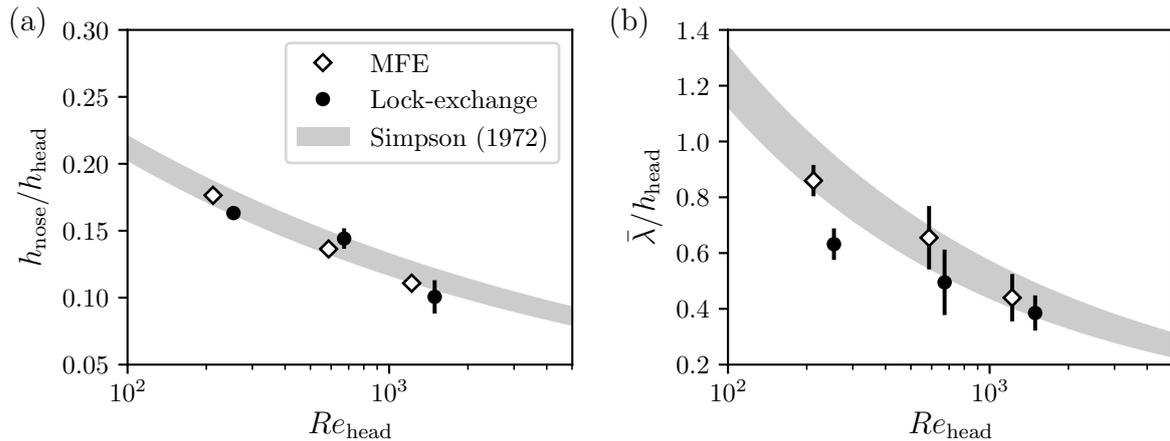


Figura 5.18 – Altura do nariz (a) e comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas (b), normalizados pela altura da cabeça, em função do número de Reynolds da cabeça. As linhas verticais indicam o desvio padrão associado aos valores médios.

tica desse modelo, tais como o uso de perfis de entrada alternativos. Porém, mesmo com esta divergência no valor de Re_{head} ambas configurações de escoamento possuem uma boa concordância com a Eq. (3.6), conforme apresentado na Figura 5.18a. Estes resultados sugerem que mesmo com um erro de aproximadamente 15% na altura da cabeça da corrente, o Modelo da Frente em Equilíbrio reproduz a cabeça de uma corrente de densidade que satisfaz a relação de alturas proposta por Simpson (1972).

Posteriormente foi medido o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas no período de tempo correspondente ao intervalo $0 \leq x_1 - x_f \leq 12,5$, com exceção do caso MFE1e3 que devido ao baixo número de Reynolds necessitou um período de tempo maior para realizar esta medida, conforme havia sido identificado no caso LE1e3. A comparação dos resultados obtidos com a relação empírica descrita pela Eq. (3.7) é apresentada na Figura 5.18b, onde observa-se uma boa concordância com a literatura. Assim como na medida da altura do nariz da corrente o erro encontrado na altura da cabeça, quando comparado as simulações *lock-exchange*, não influencia na comparação com as relações empíricas propostas por Simpson (1972).

5.2.2 O estado de equilíbrio

Conforme descrito anteriormente, as simulações na configuração de escoamento do MFE tendem a alcançar um estado de equilíbrio a partir de períodos de tempo suficientemente longos. Este estado é caracterizado por pequenas variações locais da posição da frente (Figura 5.15a), por um número constante de estruturas de lobos e fendas (Figuras 5.16a, 5.17b e 5.17c) e também pela ausência na formação de novos vórtices de Kelvin-Helmholtz. Neste estado, o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas atinge um valor constante, não satisfaz a Eq. (3.7) e apresenta um comportamento cres-

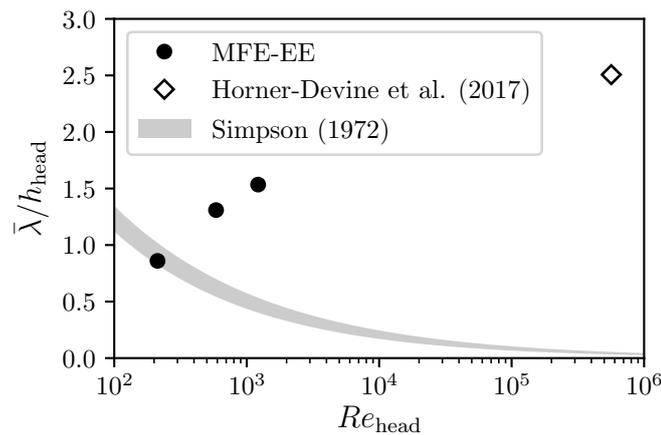


Figura 5.19 – Relação entre o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça da corrente em função do número de Reynolds da cabeça, onde MFE-EE representa resultados obtidos com Modelo da Frente em Equilíbrio no estado de equilíbrio.

cente em função de Re_{head} , conforme apresentado na Figura 5.19. Porém este fato pode ser esperado uma vez que, em suas experiências, Simpson (1972) tinha a disposição um canal com comprimento e largura limitados e suas relações empíricas não contemplam o comportamento da cabeça corrente em tempos suficientemente longos. Além deste fato, quando tais escoamentos são observados na natureza as relações de comprimento são maiores, não existindo o confinamento lateral das estruturas, que são esperados em experimentos. Esta tendência de comportamento em relação o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas é evidenciada quando observamos a medição de Horner-Devine e Chickadel (2017) de plumas hipopícnais em estuários, onde praticamente não há limitações laterais na propagação do escoamento. Em seu estudo de caso, Horner-Devine e Chickadel (2017) constatou que a relação $\bar{\lambda}/h_{\text{head}}$ possui um valor de 2,5 para $Re_{\text{head}} \approx 5,6 \times 10^5$ (Figura 5.19), o que possui uma grande discordância com o valor de 0,04 previsto com a Eq. (3.7) para o mesmo número de Reynolds da cabeça da corrente. Desta forma, é razoável que uma corrente de densidade tenha a capacidade de produzir estruturas de lobos e fendas com largura que não satisfazem a relação empírica proposta por Simpson (1972), conforme foi observado com o MFE e reportado por Horner-Devine e Chickadel (2017).

A ausência de vórtices de Kelvin-Helmholtz no estado de equilíbrio pode ser atribuída aos efeitos descritos anteriormente para os casos *lock-exchange* e também as condições de estratificação do escoamento neste período de tempo. A verificação das condições de estratificação do escoamento foi realizada determinando o número de Richardson localmente, em cada posição x_1 e na posição vertical correspondente ao ponto

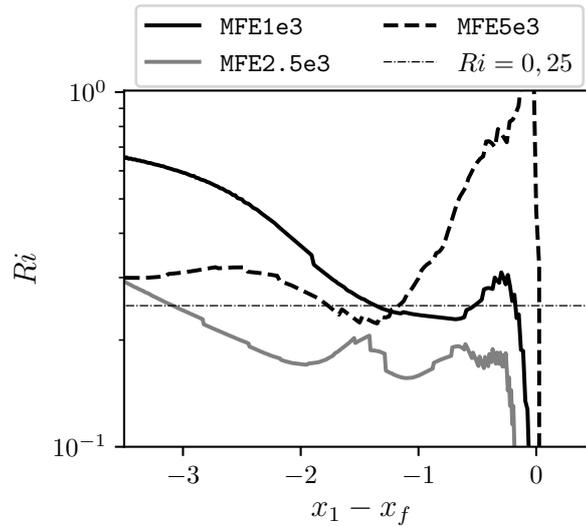


Figura 5.20 – Número de Richardson local em função de $x_1 - x_f$. Resultados obtidos no estado de equilíbrio.

de inflexão do campo u_1 , na forma:

$$Ri = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_2} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} \right)^{-2}. \quad (5.3)$$

Conforme apresentado na Figura 5.20, nota-se que embora o valor deste número adimensional assuma valores inferiores à 0,25 em algumas regiões, há uma tendência de crescimento no sentido do corpo corrente onde os valores são superiores à 0,25. De acordo com Hazel (1972), $Ri = 0,25$ é um valor crítico que dita a estabilidade do escoamento, onde valores superiores descrevem um escoamento estável e valores inferiores um escoamento instável. Os resultados apresentados na Figura 5.20 sugerem que qualquer perturbação causada pelos efeitos de entranhamento de fluido ambiente no nariz da corrente são posteriormente amortecidas devido aos níveis de estratificação do escoamento. Desta forma, a formação dos vórtices de Kelvin-Helmholtz observados nos tempos iniciais pode ser atribuída à um estado transiente imposto pela condição inicial do problema.

5.3 A origem das estruturas de lobos e fendas

O modelo proposto na definição da origem das estruturas de lobos e fendas é baseado na resolução das equações de estabilidade linear, cuja formulação foi mencionada anteriormente na metodologia empregada neste estudo. Esta análise possui o objetivo de relacionar a formação das estruturas de lobos e fendas com instabilidades gravitacionais associadas a região de estratificação instável no nariz da corrente. Para tanto, toma-se como estado de base o campo φ médio no tempo e na direção perpendicular a propa-

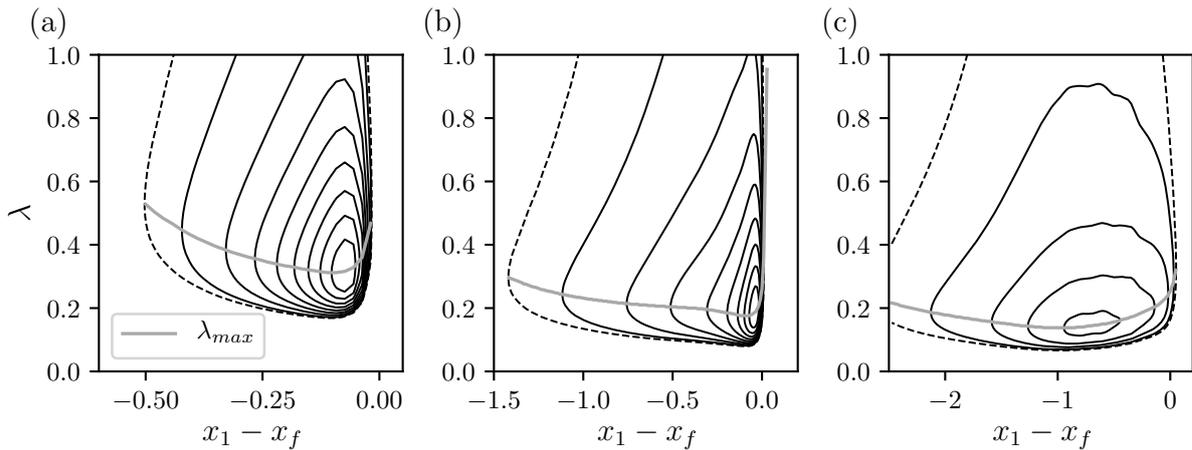


Figura 5.21 – Iso-linhas de taxa de amplificação em função da coordenada $x_1 - x_f$ e do comprimento de onda para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c). Nesta figura, a linha tracejada representa a fronteira de estabilidade, as demais isolinhas são desenhadas com um incremento de taxa de amplificação de 0,4 e a linha cinza representa o comprimento de onda mais amplificado para cada posição $x_1 - x_f$.

gação do escoamento e resolve-se o problema de autovalores/autovetores generalizado, formulado pelas Eqs. (4.16a) e (4.16b), localmente em cada posição x_1 . A discretização das Eqs. (4.16a) e (4.16b) é realizada por meio do método Chebyshev combinado com a função de mapeamento descrita pela Eq. (4.68), onde foi empregado 96 pontos de colocação para todos os casos. Devido a escolha do estado de base, é esperado que a amplificação de qualquer perturbação esteja associado apenas à instabilidades de Rayleigh-Taylor (DRAZIN; REID, 2004). Uma vez que a taxa de amplificação é determinada para cada combinação de x_1 e k_3 nos casos MFE1e3, MFE2.5e3 e MFE5e3, busca-se qual seria o comprimento de onda associado a máxima taxa amplificação para comparação com a Eq. (3.11), proposta por Xie et al. (2019). Neste caso, o comprimento de onda de uma perturbação é relacionado com seu correspondente número de onda na forma:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_3}. \quad (5.4)$$

O comportamento da taxa de amplificação em função da direção de propagação do escoamento e do comprimento de onda para cada caso de modelo da frente em equilíbrio é apresentado na Figura 5.21. Na apresentação destes resultados opta-se por subtrair a coordenada x_1 da posição da frente associada ao campo de concentração médio. Desta forma é claramente observado que todas as perturbações são amortecidas para $x_1 - x_f > 0$, uma vez que as variações de concentração além da região frontal da corrente de densidade podem ser desprezadas. Nos casos MFE1e3 e MFE2.5e3 a máxima taxa de amplificação em todo o intervalo $-L_{\text{head}} \leq x_1 - x_f \leq 0$ assumiu um valor de aproximadamente 3,5 com ocorrência próxima à posição da frente. Enquanto que no caso MFE5e3

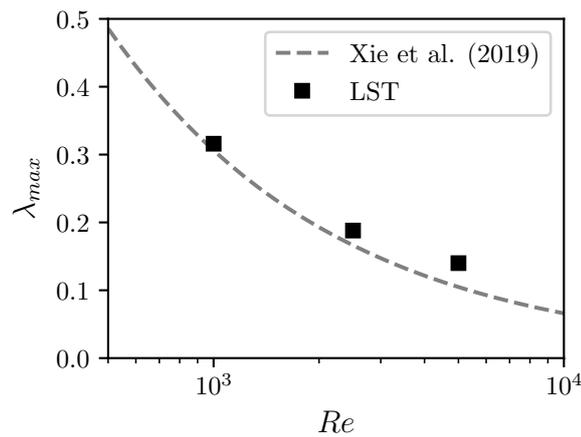


Figura 5.22 – Comprimento de onda mais amplificado em função número de Reynolds.

(Figura 5.21c), a mesma medida resultou em um valor de taxa de amplificação de 1,8 cuja ocorrência é mais afastada da posição da frente. Esta anomalia no comportamento da máxima taxa de amplificação da simulação MFE5e3, quando comparado com os demais casos, pode ser atribuída às grandes oscilações laterais que podem ser observadas na Figura 5.13c. Tais oscilações tendem a poluir a média lateral dos dados, impactando diretamente nos números adimensionais empregados para reescalar o problema para esta formulação simplificada. Como consequência há uma variação na taxa de amplificação e a região instável do escoamento torna-se mais abrangente. Porém mesmo com este comportamento anômalo na taxa de amplificação quando $Re = 5 \times 10^3$, nota-se que o comprimento de onda mais amplificado apresenta um tendência decrescente em função do número de Reynolds conforme apresentado na Figura 5.22, estando de acordo com os resultados analíticos presentes no estudo de Xie et al. (2019). Além destas observações também foi verificado que todas as regiões instáveis contidas na Figura 5.21 correspondem a modos não-oscilatórios, ou seja, com frequência angular nula.

De acordo com Härtel et al. (2000), Xie et al. (2019), os comprimentos de onda mais amplificados encontrados por meio de estudos de estabilidade linear correspondem ao comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas observadas nos tempos iniciais da propagação da corrente, sugerindo a existência de um comprimento de onda elementar. A verificação deste comprimento de onda elementar pode ser observada na Figura 5.23, onde foi construído um histograma do comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas utilizando dados correspondente à tempos iniciais da simulação juntamente com os resultados obtidos a partir de análise de estabilidade linear (apresentados na Figura 5.22). Na Figura 5.23 nota-se que mesmo um escoamento médio temporal possui a capacidade de guardar a informação do comprimento de onda elementar quando sujeito à metodologia empregada. Assumindo que, de fato, as estruturas de lobos são originadas por um mecanismo linear, a riqueza de escalas de comprimento observadas nas Figuras 5.7 e 5.16 é gerada por múltiplos deste comprimento de onda elementar.

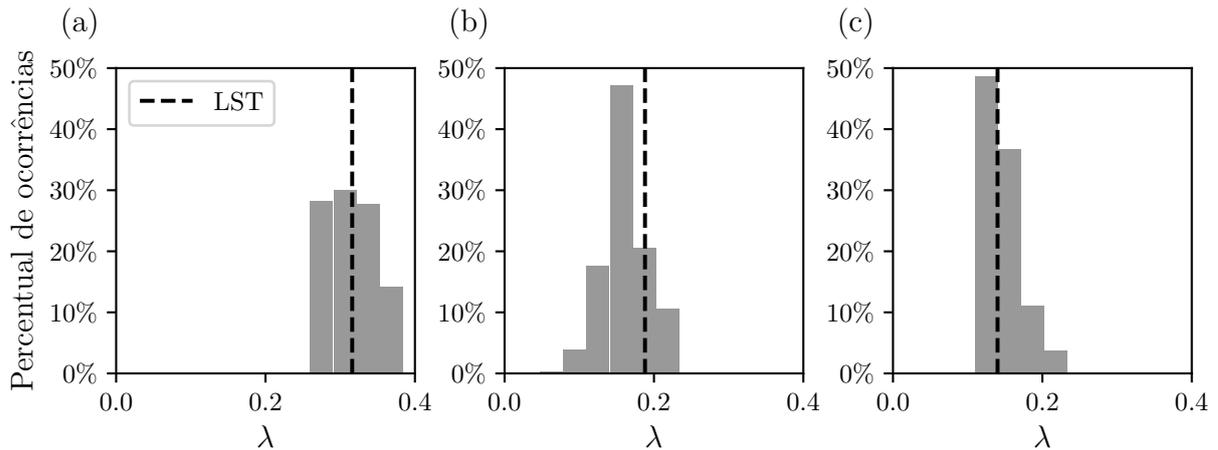


Figura 5.23 – Histograma do comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas nos tempos iniciais para os casos MFE1e3 (a), MFE2.5e3 (b) e MFE5e3 (c), onde a linha tracejada representa os resultados obtidos pelo estudo de estabilidade linear.

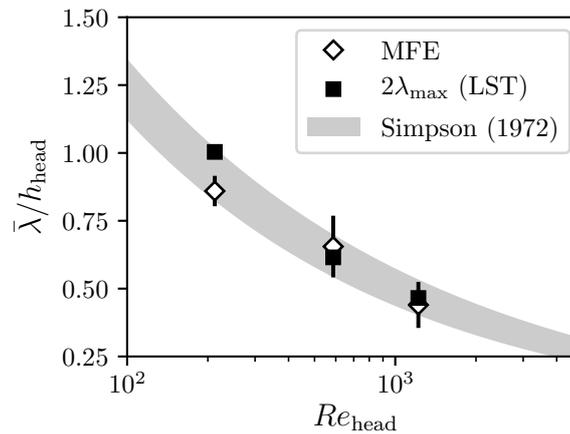


Figura 5.24 – Relação entre o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas e a altura da cabeça da corrente em função do número de Reynolds da cabeça para o Modelo da Frente em Equilíbrio, um múltiplo do comprimento de onda mais amplificado e a Eq. (3.7).

Tomando como exemplo a Figura 5.24, podemos observar que a Eq. (3.7) sugere que o comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas medidas por Simpson (1972) representa em média dois comprimentos de onda elementar. Desta forma, pode-se entender que o sistema realiza a escolha do comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas baseado em comprimento de onda característico consequente do crescimento de instabilidades gravitacionais.

A forma do modo instável mais amplificado é apresentada na Figura 5.25 juntamente com os dados do escoamento médio da Simulação Numérica Direta realizada no caso MFE1e3 e o perfil médio de concentração correspondente. As estruturas apresentadas na Figura 5.25a estão confinadas na região de estratificação instável ($0 \leq x_2/h_{\text{nose}} \leq 1$), uma vez que o modelo proposto considera que as perturbações podem crescer apenas

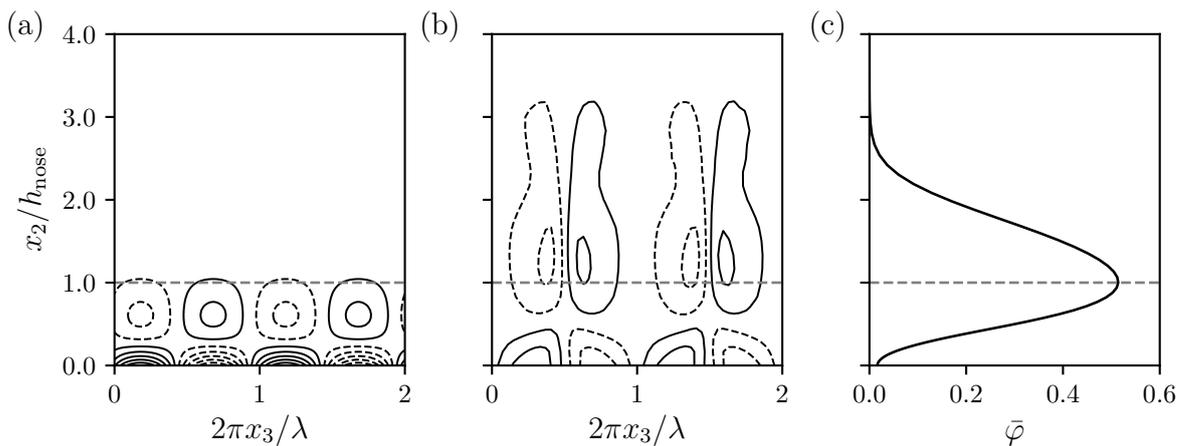


Figura 5.25 – Iso-linhas de vorticidade no plano (x_2, x_3) na posição x_1 correspondente à máxima taxa de amplificação com o estudo de estabilidade linear (a) e simulação numérica (b) e a concentração em função da coordenada vertical (c). Nas figuras (a) e (b) as linhas pretas e sólidas representam valores positivos enquanto que as linhas pretas e tracejadas correspondem à valores negativos. A linha cinza tracejada representa a localização do nariz da corrente. Resultados para o caso MFE1e3.

por efeitos de estratificação instável. Observa-se, qualitativamente, que os resultados tanto de estabilidade linear quanto de Simulação Numérica Direta possuem uma certa semelhança, porém as estruturas resultantes da DNS apresentam uma deformação na direção vertical causados por efeitos não-lineares e variações de velocidade vertical não previstos pelo modelo simplificado.

Finalmente, os dados adquiridos a partir da teoria da estabilidade linear nesta configuração de escoamento fornecem fortes indícios de que a formação de estruturas de lobos e fendas tem suas origens no crescimento de instabilidades gravitacionais do tipo Rayleigh-Taylor (DRAZIN; REID, 2004). Porém, a instabilidade gravitacional encontrada nesta análise difere da instabilidade Rayleigh-Taylor documentada na literatura por possuir um confinamento com a fronteira inferior do domínio.

6 Conclusão

Utilizando as abordagens de Simulação Numérica Direta, Simulação de Grandes Escalas e Teoria de Estabilidade Linear, este trabalho estudou correntes de densidade através de configurações canalizadas. Primeiramente, foi empregado uma configuração de escoamento conhecida na literatura e referida como *lock-exchange*, com a finalidade de obter resultados de base. Posteriormente, foi formulado um modelo matemático, aqui chamado de Modelo da Frente em Equilíbrio, que possibilitou o estudo das características da cabeça de uma corrente de densidade de maneira simplificada. Ao longo deste estudo as perguntas inicialmente propostas foram respondidas:

“Existe a possibilidade de formular um modelo matemático reduzido que reproduz a dinâmica da cabeça de uma corrente de densidade e permita realizar simulações em períodos de tempo arbitrários?”

De acordo com a metodologia proposta no Modelo da Frente em Equilíbrio, é possível formular um modelo matemático com tais características. Conforme apresentado na Figura 5.14, o Modelo da Frente em Equilíbrio reproduz o comprimento da cabeça da corrente de densidade com um erro em relação a simulações na configuração *lock-exchange* de no máximo 4,8%, porém conforme o número de Reynolds aumenta este erro relativo tende a diminuir, alcançando valores em torno de 1,5%. De uma maneira qualitativa, o modelo proposto consegue replicar o comportamento de evolução temporal das estruturas de lobos e fendas, apresentado nas Figuras 5.16b e 5.16c. Enquanto que quantitativamente, foi verificada a limitação do MFE em descrever a altura da cabeça da corrente (h_{head}) das simulações *lock-exchange*, com erros relativos de aproximadamente 15%. Porém quando os resultados obtidos com o Modelo da Frente em Equilíbrio são comparados com as relações empíricas propostas por Simpson (1972), é observado uma boa concordância conforme exibido na Figura 5.18. Desta maneira pode-se afirmar que embora existam melhorias a serem feitas no modelo matemático desenvolvido com a finalidade de minimizar o erro associado a altura da cabeça corrente, a metodologia apresentada fornece resultados que satisfazem as relações propostas na literatura.

“Como se comporta a cabeça de uma corrente de densidade em tempos suficientemente longos?”

Devido as características do Modelo da Frente em Equilíbrio, é possível adotar domínios de cálculo reduzidos que viabilizam a realização de simulações numéricas em longos períodos de tempo que, normalmente, seriam muito custosas na configuração *lock-*

exchange. Neste novo cenário, a cabeça da corrente de densidade experimenta um estado de equilíbrio, evidenciado pelas Figuras 5.15a e 5.16a, que possui como principais características pequenas flutuações na posição da frente, comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas constante ao longo do tempo e a ausência de novos vórtices de Kelvin-Helmholtz. Os valores de comprimento de onda médio das estruturas de lobos e fendas encontrados no estado de equilíbrio não satisfazem a relação empírica proposta por Simpson (1972) e possuem um comportamento crescente em função do número de Reynolds da cabeça da corrente (Re_{head}). Este comportamento diferenciado no estado de equilíbrio não foi observado em abordagens experimentais devido as limitações de comprimento e largura dos canais necessários. Porém observações de campo realizadas por Horner-Devine e Chickadel (2017) sugerem que os resultados obtidos possuem uma tendência de reproduzir o comportamento observado na natureza, conforme apresentado na Figura 5.19.

As condições de estratificação do escoamento, mostrada na Figura 5.20, sugerem que o escoamento tende a ser estável para instabilidades cisalhantes em tempos suficientemente longos. Desta forma, pode-se concluir que a formação dos vórtices de Kelvin-Helmholtz, nas condições estudadas, estão associados a um estado transiente do escoamento que depende da condição inicial do problema.

“Quais são os mecanismos associados a origem das estruturas de lobos e fendas?”

Com base em um estudo de estabilidade linear simplificado, foi constatado que as estruturas de lobos e fendas são originadas pelo crescimento de instabilidades gravitacionais associadas à estratificação instável característica do nariz da corrente de densidade. Os modos instáveis encontrados nesta análise podem ser caracterizados como uma instabilidade de Rayleigh-Taylor modificada pelo confinamento entre o nariz da corrente e o leito do canal, possuindo um comprimento de onda elementar que seria a estrutura de lobos e fendas com menor comprimento de onda possível para uma combinação de parâmetros dada. A existência de um comprimento de onda elementar sugere que, em média, o comprimento de onda das estruturas de lobos e fendas observadas no desenvolvimento do escoamento são múltiplos deste comprimento de onda, conforme exibido na Figura 5.24. Sendo assim, podemos assumir que a escolha destes comprimentos característicos do escoamento estão associados a um mecanismo linear de seleção de escalas.

“Qual é a eficiência de mistura global de correntes de densidade na configuração de escoamento referida como *lock-exchange*?”

A partir do método de partição da energia potencial (LORENZ, 1955), foi desenvolvido ferramentas computacionais para quantificar os diferentes reservatórios de energia e

suas correspondentes taxas de transferência de energia (Figura 4.7). Posteriormente foi quantificado a eficiência de mistura baseado na definição de [Peltier e Caulfield \(2003\)](#) que diz que esta grandeza pode ser determinada como “relação entre as perdas de energia por efeitos de mistura irreversível e todas as perdas irreversíveis de energia disponível”. Em todos os casos de simulação na configuração *lock-exchange* foi observado a conservação da energia, sugerindo uma boa escolha dos parâmetros de discretização numérica e condições de contorno propriamente implementadas. Também foi constatado que a eficiência de mistura tende a crescer com o aumento do número de Reynolds tendendo a um valor assintótico de 0,081, previsto pelo estudo teórico de [Hughes e Linden \(2016\)](#). Estas observações insinuam que o valor da eficiência de mistura é dominado pelos efeitos do corpo da corrente de densidade e, desta forma, os efeitos de mistura irreversível na cabeça da corrente de densidade podem ser desprezados.

7 Proposta para Trabalhos Futuros

Após este estudo, ainda seguem alguns pontos em aberto que podem ser trabalhados futuramente, tais como:

- **Investigar as distribuições e transferências de energia turbulenta e suas possíveis relações com os fenômenos observados neste estudo;**

Este tipo de investigação é baseada na equação da energia cinética turbulenta (TENNEKES; LUMLEY, 1989), onde as variáveis do escoamento são decompostas em média e flutuação e obtem-se uma relação entre todas as taxas de transferência de energia turbulenta. No caso especial do Modelo da Frente em Equilíbrio em estado estacionário, este balanço de energia possui a forma:

$$S + B' - \varepsilon' - T' = 0, \quad (7.1)$$

sendo S a taxa de produção de cisalhamento, B' o fluxo turbulento de *buoyancy*, ε' a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta e T' a taxa de transporte de energia turbulenta. A relação destas taxas de transferência de energia com os demais reservatórios de energia é representado pela Figura 7.1a, onde \mathcal{K}' é a energia cinética turbulenta, $\bar{\mathcal{K}}$ a energia cinética do escoamento médio, \mathcal{P} a energia potencial e \mathcal{I} a energia interna. A Figura 7.1b apresenta como seria a distribuição de cada termo da Eq. (7.1) em função da direção x_1 para o caso MFE2.5e3.

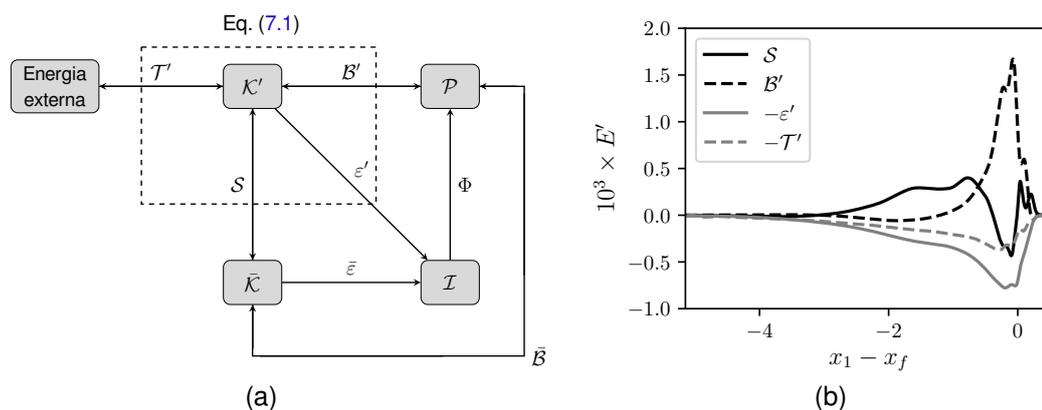


Figura 7.1 – Esquema da relação das taxas de transferência de energia turbulenta com os reservatórios de energia do escoamento (a) e distribuição das taxas de transferência de energia turbulenta em função da direção x_1 para o caso MFE2.5e3 (b).

Com base nas distribuições de transferência de energia turbulenta, por exemplo Figura 7.1b, pode-se buscar mais informações a respeito da dinâmica da cabeça

de uma corrente de densidade e propor possíveis relações com os fenômenos observados ao longo deste estudo. No caso do uso da abordagem de Simulação Implícita de Grandes Escalas, torna-se necessário a formulação de uma metodologia para quantificar a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta aportada pelos esquemas numéricos implementados no código computacional Incompact3d, de forma similar à Eq. (5.1).

- **Investigar o mecanismo que promove a saturação da largura média das estruturas de lobos e fendas em tempos suficientemente longos;**

Conforme foi observado nas Figuras 5.16a, 5.17b e 5.17c, a partir de um determinado instante de tempo a largura média das estruturas de lobos e fendas tende a ser constante, porém ainda está em aberto qual seria o mecanismo que governa este fenômeno.

- **Buscar uma metodologia para definir um escoamento de base característico das configurações de escoamento aqui trabalhadas;**

Nos trabalhos que empregam abordagens baseadas na teoria da estabilidade linear para estudar as estruturas de lobos e fendas (HÄRTEL et al., 2000; XIE et al., 2019), incluindo o presente estudo, não existe um consenso em relação ao escoamento de base. Além deste fato, nenhum dos escoamentos de base empregados nestes estudos satisfaz as condições descritas por Sipp e Lebedev (2007), Loiseau et al. (2019). Uma vez que o Modelo da Frente em Equilíbrio permite realizar simulações da cabeça de uma corrente de densidade em períodos de tempo arbitrários, pode-se buscar o desenvolvimento de uma ferramenta computacional para a obtenção de escoamento de base, baseada na abordagem de amortecimento seletivo (LOISEAU et al., 2019) por exemplo.

- **Investigar a origem das estruturas de lobos e fendas por meio de ferramentas baseadas na teoria da estabilidade linear mais refinadas;**

Uma vez que torna-se possível obter um escoamento de base que satisfaz as condições descritas por Sipp e Lebedev (2007), Loiseau et al. (2019), é viável o uso de ferramentas baseadas na teoria da estabilidade linear mais refinadas no estudo da origem das estruturas de lobos e fendas, por exemplo análises de estabilidade bi-global e tri-global.

- **Aumentar a amostragem de número de Reynolds em ordens de magnitude mais elevadas.**

O aumento da amostragem de número de Reynolds em ordens de magnitude mais elevadas pode fornecer mais informações a respeito da largura média das estruturas de lobos e fendas em tempos suficientemente longos e prover mais argumentos que justifiquem a tendência observada na Figura 5.19.

Referências

- ALLEN, J. R. L. Mixing at turbidity current heads, and its geological implications. *Journal of Sedimentary Research*, v. 41, n. 1, p. 97–113, 03 1971. ISSN 1527-1404. Citado na página 30.
- ANDERSON, E.; BAI, Z.; BISCHOF, C.; BLACKFORD, S.; DEMMEL, J.; DONGARRA, J.; CROZ, J. D.; GREENBAUM, A.; HAMMARLING, S.; MCKENNEY, A.; SORENSEN, D. *LAPACK Users' Guide*. Third. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999. ISBN 0-89871-447-8 (paperback). Citado na página 57.
- BALTENSPERGER, R.; TRUMMER, M. R. Spectral differencing with a twist. *SIAM J. Sci. Comp.*, SIAM, v. 24, n. 5, p. 1465–1487, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 62 e 63.
- BENJAMIN, T. B. Gravity currents and related phenomena. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, v. 31, n. 2, p. 209–248, 03 1968. Citado na página 19.
- BRITTER, R. E.; SIMPSON, J. E. Experiments on the dynamics of a gravity current head. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 88, n. 2, p. 223–240, 1978. Citado na página 31.
- CANTERO, M. I.; LEE, J. R.; BALANCHANDAR, S.; GARCÍA, M. H. On the front velocity of gravity currents. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 586, p. 1–39, 2007. Citado 12 vezes nas páginas 7, 27, 28, 29, 30, 41, 46, 48, 65, 68, 69 e 70.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG, T. A. *Spectral methods in fluid dynamics*. [S.l.]: Springer-Verlag, 1988. (Springer series in computational physics). ISBN 9783540522058. Citado na página 62.
- CHEONG, H.-B.; KUENEN, J. J. P.; LINDEN, P. F. The front speed of intrusive gravity currents. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 552, p. 1–11, 2006. Citado na página 27.
- DAIRAY, T.; LAMBALLAIS, E.; LAIZET, S.; VASSILICOS, J. C. Numerical dissipation vs. subgrid-scale modelling for large eddy simulation. *Journal of Computational Physics*, v. 337, p. 252 – 274, 2017. ISSN 0021-9991. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 74.
- DRAZIN, P.; REID, W. *Hydrodynamic Stability*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004. (Cambridge Mathematical Library). ISBN 9780521525411. Citado 4 vezes nas páginas 36, 67, 86 e 89.
- ELLISON, T. H.; TURNER, J. S. Turbulent entrainment in stratified flows. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 6, n. 3, p. 423–448, 1959. Citado na página 47.
- ESPATH, L. F. R.; PINTO, L. C.; LAIZET, S.; SILVESTRINI, J. H. High-fidelity simulations of the lobe-and-cleft structures and the deposition map in particle-driven gravity currents. *Physics of Fluids*, v. 27, n. 5, p. 056604, 2015. Citado 4 vezes nas páginas 31, 41, 42 e 75.

- FRANCISCO, E.; ESPATH, L.; LAIZET, S.; SILVESTRINI, J. Reynolds number and settling velocity influence for finite-release particle-laden gravity currents in a basin. *Computers & Geosciences*, v. 110, p. 1 – 9, 2018. ISSN 0098-3004. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 75.
- FRANCISCO, E. P. *Modelagem matemática e simulação numérica de correntes de gravidade em uma configuração canal-bacia*. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, 2018. Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul. Tese de doutorado. Citado 3 vezes nas páginas 7, 20 e 26.
- FRANTZ, R. A. S. *Simulações numéricas de correntes gravitacionais com elevado número de Reynolds*. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 38, 60 e 65.
- GARCÍA, M. H.; PARSONS, J. D. Mixing at the front of gravity currents. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, v. 24, n. 1, p. 197 – 205, 1996. ISSN 0377-0265. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 42.
- GENNARO, E. M.; RODRÍGUEZ, D. Ferramentas avançadas para a análise de instabilidade global de escoamentos complexos. In: MENDONÇA, M. T. d.; AVELAR, A. C. (Ed.). *Turbulência, Volume 10, Tomo 1*. São José dos Campos: ABCM/DCTA, 2016. cap. 1, p. 1–100. Citado na página 35.
- HACKER, J.; LINDEN, P.; DALZIEL, S. Mixing in lock-release gravity currents. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, v. 24, n. 1, p. 183 – 195, 1996. ISSN 0377-0265. Citado 5 vezes nas páginas 19, 20, 27, 30 e 65.
- HÄRTEL, C.; CARLSSON, F.; THUNBLOM, M. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. part 2. the lobe-and-cleft instability. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 418, p. 213–229, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 30, 36, 72 e 94.
- HÄRTEL, C.; CARLSSON, F.; THUNBLOM, M. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. part 2. the lobe-and-cleft instability. Cambridge University Press, v. 418, p. 213–229, 09 2000. Citado 2 vezes nas páginas 65 e 87.
- HAZEL, P. Numerical studies of the stability of inviscid stratified shear flows. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 51, n. 1, p. 39–61, 1972. Citado na página 85.
- HORNER-DEVINE, A. R.; CHICKADEL, C. C. Lobe-cleft instability in the buoyant gravity current generated by estuarine outflow. *Geophysical Research Letters*, v. 44, n. 10, p. 5001–5007, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 78, 84 e 91.
- HORNER-DEVINE, A. R.; HETLAND, R. D.; MACDONALD, D. G. Mixing and transport in coastal river plumes. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 47, n. 1, p. 569–594, 2015. Citado na página 19.
- HUGHES, G. O. Inside the head and tail of a turbulent gravity current. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 790, p. 1–4, 2016. Citado na página 31.
- HUGHES, G. O.; LINDEN, P. F. Mixing efficiency in run-down gravity currents. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 809, 2016. Citado 5 vezes nas páginas 34, 65, 74, 76 e 92.

- HUPPERT, H. E. Gravity currents: a personal perspective. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 554, p. 299–322, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- ILICAK, M. Energetics and mixing efficiency of lock-exchange flow. *Ocean Modelling*, v. 83, p. 1 – 10, 2014. ISSN 1463-5003. Citado na página 76.
- JUNIPER, M. P.; HANIFI, A.; THEOFILIS, V. Modal stability theory : Lecture notes from the flow-nordita summer school on advanced instability methods for complex flows, stockholm, sweden, 2013. *Applied Mechanics Review*, v. 66, n. 2, p. 024804–, 2014. QC 20140613. QC 20160211. Citado 4 vezes nas páginas 36, 44, 45 e 62.
- KÁRMÁN, T. von. The engineer grapples with non-linear problems. *Bulletin of the American Mathematical Society*, v. 46, p. 615–683, 1940. ISSN 0002-9904. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- KRAVCHENKO, A.; MOIN, P. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 131, n. 2, p. 310–322, 1997. Citado na página 53.
- Laizet, S.; Lamballais, E. High-order compact schemes for incompressible flows: A simple and efficient method with the quasi-spectral accuracy. *Journal of Computational Physics*, v. 228, p. 5989–6015, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 53, 58 e 61.
- LAMBALLAIS, E.; FORTUNÉ, V.; LAIZET, S. Straightforward high-order numerical dissipation via the viscous term for direct and large eddy simulation. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 230, n. 9, p. 3270–3275, 2011. Citado na página 59.
- LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 103, n. 1, p. 16–42, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 57, 59 e 60.
- LESIEUR, M. *Turbulence in Fluids*. [S.l.]: Springer Netherlands, 2008. (Fluid Mechanics and Its Applications). ISBN 9781402064357. Citado na página 37.
- LOISEAU, J.-C.; BRUNTON, S.; NOACK, B. From the POD-Galerkin Method to Sparse Manifold Models. In: BENNER, P. (Ed.). *Handbook of Model Order Reduction, Volume II: Applications*. De Gruyter GmbH, 2019. p. 1–47. Disponível em: <<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02398729>>. Citado 3 vezes nas páginas 35, 36 e 94.
- LORENZ, E. N. Available potential energy and the maintenance of the general circulation. *Tellus*, Blackwell Publishing Ltd, v. 7, n. 2, p. 157–167, 1955. ISSN 2153-3490. Citado 5 vezes nas páginas 8, 22, 33, 53 e 91.
- MARINO, B. M.; THOMAS, L. P.; LINDEN, P. F. The front condition for gravity currents. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 536, p. 49–78, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 70.
- MEIBURG, E.; KNELLER, B. Turbidity currents and their deposits. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 42, n. 1, p. 135–156, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 39.

- MOIN, P. *Fundamentals of Engineering Numerical Analysis*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. Citado na página 61.
- MÖLLER, S. V.; SILVESTRINI, J. H. Turbulência: Fundamentos. In: MÖLLER, S. V.; SILVESTRINI, J. H. (Ed.). *Turbulência, Volume 4*. Rio de Janeiro: ABCM/DCTA, 2004. cap. 1, p. 1–30. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 65.
- MULDER, T.; ALEXANDER, J. The physical character of subaqueous sedimentary density flows and their deposits. *Sedimentology*, v. 48, n. 2, p. 269–299, 2001. Citado 4 vezes nas páginas 7, 24, 25 e 26.
- NOGUEIRA, H. I. S.; ADDUCE, C.; ALVES, E.; FRANCA, M. J. Dynamics of the head of gravity currents. *Environmental Fluid Mechanics*, v. 14, n. 2, p. 519–540, 2014. ISSN 1573-1510. Citado na página 30.
- OSBORN, T. R. Estimates of the local rate of vertical diffusion from dissipation measurements. *Journal of Physical Oceanography*, v. 10, n. 1, p. 83–89, 1980. Citado na página 32.
- OTTOLENGHI, L.; ADDUCE, C.; INGHILESI, R.; ROMAN, F.; ARMENIO, V. Mixing in lock-release gravity currents propagating up a slope. *Physics of Fluids*, v. 28, n. 5, p. 056604, 2016. Citado na página 67.
- PARSONS, J. D.; BUSH, J. W.; SYVITSKI, J. P. Hyperpycnal plume formation from riverine outflows with small sediment concentrations. *Sedimentology*, Wiley Online Library, v. 48, n. 2, p. 465–478, 2001. Citado na página 27.
- PELTIER, W. R.; CAULFIELD, C. P. Mixing efficiency in stratified shear flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 35, n. 1, p. 135–167, 2003. Citado 6 vezes nas páginas 32, 33, 34, 51, 53 e 92.
- RIEUTORD, M. *Fluid Dynamics: An Introduction*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2014. (Graduate Texts in Physics). ISBN 9783319093512. Citado na página 39.
- RUSCHEL, K. *Análise de uma corrente de turbidez com variação das propriedades físicas*. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, 2018. Citado na página 39.
- SCHMID, P. J. Nonmodal stability theory. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 39, n. 1, p. 129–162, 2007. Citado na página 35.
- SCHMID, P. J.; BRANDT, L. Analysis of fluid systems: Stability, receptivity, sensitivity. *Applied Mechanics Reviews*, v. 66, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 45.
- SHER, D.; WOODS, A. W. Gravity currents: entrainment, stratification and self-similarity. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 784, p. 130–162, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 46.
- SIMPSON, J. *Gravity Currents: In the Environment and the Laboratory*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999. (In the Environment and the Lab). ISBN 9780521664011. Citado 4 vezes nas páginas 19, 31, 66 e 67.

SIMPSON, J. E. Effects of the lower boundary on the head of a gravity current. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 53, n. 4, p. 759–768, 1972. Citado 22 vezes nas páginas [7](#), [9](#), [19](#), [27](#), [30](#), [31](#), [32](#), [36](#), [48](#), [65](#), [66](#), [71](#), [72](#), [73](#), [74](#), [77](#), [81](#), [83](#), [84](#), [88](#), [90](#) e [91](#).

SIMPSON, J. E.; BRITTER, R. E. The dynamics of the head of a gravity current advancing over a horizontal surface. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 94, n. 3, p. 477–495, 1979. Citado 3 vezes nas páginas [30](#), [31](#) e [42](#).

SIPP, D.; LEBEDEV, A. Global stability of base and mean flows: a general approach and its applications to cylinder and open cavity flows. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 593, p. 333–358, 2007. Citado 2 vezes nas páginas [36](#) e [94](#).

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. *A First Course in Turbulence*. [S.l.]: Butterworth, 1989. Citado na página [93](#).

TSENG, Y.; FERZIGER, J. H. Mixing and available potential energy in stratified flows. *Physics of Fluids*, v. 13, n. 5, p. 1281–1293, 2001. Citado na página [51](#).

UNGARISH, M. *An Introduction to Gravity Currents and Intrusions*. [S.l.]: CRC Press, 2009. ISBN 9781584889045. Citado na página [19](#).

WEIDEMAN, J. A.; REDDY, S. C. A matlab differentiation matrix suite. *ACM Trans. Math. Softw.*, ACM, New York, NY, USA, v. 26, n. 4, p. 465–519, dez. 2000. ISSN 0098-3500. Citado na página [62](#).

WINTERS, K. B.; LOMBARD, P. N.; RILEY, J. J.; D'ASARO, E. A. Available potential energy and mixing in density-stratified fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 289, p. 115–128, 1995. Citado 8 vezes nas páginas [7](#), [8](#), [32](#), [33](#), [51](#), [52](#), [53](#) e [102](#).

XIE, C. Y.; TAO, J. J.; ZHANG, L. S. Origin of lobe and cleft at the gravity current front. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 100, p. 031103, Sep 2019. Citado 5 vezes nas páginas [36](#), [72](#), [86](#), [87](#) e [94](#).

ZGHEIB, N.; BONOMETTI, T.; BALACHANDAR, S. Direct numerical simulation of cylindrical particle-laden gravity currents. *Computers & Fluids*, v. 123, p. 23 – 31, 2015. ISSN 0045-7930. Citado na página [27](#).

Apêndices

APÊNDICE A – Equações de energia para a configuração *lock-exchange*

Este apêndice tem como finalidade apresentar a dedução das equações de energia correspondentes à configuração *lock-exchange*, apresentadas na metodologia deste estudo, partindo das equações gerais. Primeiramente é apresentada a equação da energia potencial, posteriormente a equação da energia potencial *background* e finalmente a equação da energia cinética.

A.1 Energia potencial

Conforme mencionado durante este estudo a evolução da energia potencial esta associada a equação de transporte escalar:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (\text{A.1})$$

Partindo desta equação são necessários três passos para encontrar a Equação (4.27):

1. Multiplicar todos os termos pela coordenada vertical (x_2):

$$x_2 \frac{\partial \varphi}{\partial t} + x_2 u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = \frac{x_2}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (\text{A.2})$$

O termo de transporte pode ser reescrito de maneira alternativa por meio da regra da cadeia, resultando em:

$$\frac{\partial}{\partial t} (x_2 \varphi) - u_2 \varphi + \frac{\partial}{\partial x_j} (x_2 u_j \varphi) = \frac{x_2}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (\text{A.3})$$

2. Integrar a equação resultante no domínio Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (x_2 \varphi) d\Omega - \int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} (x_2 u_j \varphi) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{x_2}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega. \quad (\text{A.4})$$

Neste caso o termo de transporte pode ser reescrito com uma forma alternativa por meio do teorema da divergência, resultando em:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} x_2 \varphi d\Omega \right) - \int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega + \oint_{\Gamma} (x_2 u_j \varphi) n_j d\Gamma = \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} x_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega, \quad (\text{A.5})$$

sendo Γ a superfície do domínio.

3. Aplicando as condições de contorno do problema na integral da superfície Γ , obtém-se a equação que descreve a evolução temporal da energia potencial do escoamento:

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\left(\int_{\Omega} x_2 \varphi d\Omega \right)}_{\mathcal{P}} = \underbrace{\int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega}_{-\mathcal{B}} + \underbrace{\frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} x_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega}_{\Phi} \quad (\text{A.6})$$

A.2 Energia potencial *background*

De maneira similar ao caso da energia potencial, a equação da energia potencial *background* também tem como ponto de partida a equação de transporte escalar:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (\text{A.7})$$

E também pode ser deduzida com três passos, mas difere do caso anterior pelo uso do espaço redistribuído ($x_{2,*}$) no lugar da coordenada vertical e o uso de propriedades destas coordenadas alternativas.

1. Multiplicar todos os termos pela coordenada $x_{2,*}$:

$$x_{2,*} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + x_{2,*} u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} = \frac{x_{2,*}}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (\text{A.8})$$

Aplicando a regra da cadeia e assumindo uma troca de variáveis $\partial \psi / \partial x_j = x_{2,*} \partial \varphi / \partial x_j$ (WINTERS et al., 1995), pode-se reescrever a equação na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (x_{2,*} \varphi) - \varphi \frac{\partial x_{2,*}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j \psi) = \frac{x_{2,*}}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (\text{A.9})$$

2. Integrar a equação resultante no domínio Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (x_{2,*} \varphi) d\Omega - \int_{\Omega} \varphi \frac{\partial x_{2,*}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j \psi) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{x_{2,*}}{ReSc} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega. \quad (\text{A.10})$$

Por definição, o segundo termo da equação acima é nulo (WINTERS et al., 1995) e assim como no caso da energia potencial o termo de transporte pode ser reescrito em termos de integral de superfície por meio do teorema da divergência. A equação resultante possui a forma:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} x_{2,*} \varphi d\Omega \right) + \oint_{\Gamma} (u_j \psi) n_j d\Gamma = \frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} x_{2,*} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega. \quad (\text{A.11})$$

3. Aplicando as condições de contorno do problema na integral da superfície Γ , obtém-se a equação que descreve a evolução temporal da energia potencial *background* no escoamento:

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\left(\int_{\Omega} x_{2,*} \varphi d\Omega \right)}_{\mathcal{P}_b} = \underbrace{\frac{1}{ReSc} \int_{\Omega} x_{2,*} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} d\Omega}_{\mathcal{M}}. \quad (\text{A.12})$$

A.3 Energia cinética

Finalmente, a equação que descreve a evolução da energia cinética ao longo do tempo pode ser obtida partindo da equação de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \varphi \delta_{2i}. \quad (\text{A.13})$$

Assim como nos casos anteriores, a Equação 4.30 é obtida em três etapas:

1. Multiplicar todos os termos por u_i :

$$u_i \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{u_i}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - u_i \varphi \delta_{2i}. \quad (\text{A.14})$$

Aplicando a regra da cadeia, podemos reescrever a equação acima na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} u_i u_i u_j \right) = -\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i p) + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) - \frac{1}{Re} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - u_2 \varphi, \quad (\text{A.15})$$

onde os termos de transporte podem ser agrupados, resultando em:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[u_j p + \frac{1}{2} u_i u_i u_j - \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] - \frac{1}{Re} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - u_2 \varphi \quad (\text{A.16})$$

2. Integrar a equação resultante no domínio Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) d\Omega = - \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u_j p + \frac{1}{2} u_i u_i u_j - \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] d\Omega - \int_{\Omega} \frac{1}{Re} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega \quad (\text{A.17})$$

Assim como nos casos anteriores, o termo de transporte é reescrito com o emprego do teorema da divergência:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \frac{1}{2} u_i u_i d\Omega \right) = - \oint_{\Gamma} \left[u_j p + \frac{1}{2} u_i u_i u_j - \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} u_i u_i \right) \right] n_j d\Gamma - \int_{\Omega} \frac{1}{Re} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} d\Omega - \int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega. \quad (\text{A.18})$$

3. Aplicando as condições de contorno do problema na integral da superfície Γ , chega-se na equação de energia cinética do escoamento:

$$\frac{d}{dt} \underbrace{\left(\int_{\Omega} \frac{1}{2} u_i u_i d\Omega \right)}_{\mathcal{K}} = - \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{Re} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} d\Omega}_{\varepsilon} - \underbrace{\int_{\Omega} u_2 \varphi d\Omega}_{-\mathcal{B}}. \quad (\text{A.19})$$

APÊNDICE B – Recursos computacionais utilizados

As simulações numéricas nas configurações de escoamento *lock-exchange* e Modelo da Frente em Equilíbrio foram realizadas no centro de computação do Laboratório de Alto Desempenho (LAD) na Escola Politécnica da PUCRS. Cada máquina do centro computação é composta por dois processadores Intel Xeon Six-Core E5645 2.4GHz Hyper-Threading e 24GB de memória RAM. O número de processadores empregados, espaço ocupado em disco e tempo aproximado de cálculo de cada simulação são apresentados na Tabela B.1. O tratamento dos dados das simulações e as análises de estabilidade linear foram realizadas localmente em um computador desktop Dell XPS com processador Intel Core i7-8700 3.20GHz Hyper-Threading com 6 processadores e 16GB de memória RAM.

Tabela B.1 – Número de processadores empregados, espaço ocupado em disco e tempo aproximado de cálculo de cada simulação no centro de computação do Laboratório de Alto Desempenho (LAD) na Escola Politécnica da PUCRS.

Caso	Número de processadores	Espaço em disco	Tempo de cálculo
LE1e3	72	74 GB	7 horas
LE2.5e3	144	473 GB	126 horas
LE5e3	72	57 GB	6 horas
MFE1e3	168	7 GB	23 horas
MFE2.5e3	96	40 GB	890 horas
MFE5e3	96	18 GB	100 horas



Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul
Pró-Reitoria de Graduação
Av. Ipiranga, 6681 - Prédio 1 - 3º. andar
Porto Alegre - RS - Brasil
Fone: (51) 3320-3500 - Fax: (51) 3339-1564
E-mail: prograd@pucrs.br
Site: www.pucrs.br