

## **Apêndice D**

### **Simulação de Grandes Escalas - Modelos Submalha**

#### **D.1.**

##### **Equações e Funções Filtro para LES**

Os termos convectivos das equações de governo produzem um intervalo de escalas limitado pela difusão molecular. Para número de Reynolds suficientemente baixo, o intervalo total de escalas pode ser resolvido numericamente e nenhuma modificação das equações de governo é necessária. Se a capacidade computacional não permitir a resolução completa e as equações de governo não forem modificadas para considerar isto, os valores calculados podem não ter qualquer relação com a física do movimento do fluido.

Quando o número de Reynolds torna-se muito alto, impedindo a simulação numérica direta, o intervalo de escalas deve ser limitado, por um processo de filtragem das equações de Navier-Stokes. Este procedimento formalmente define o processo de separação das escalas resolvidas em relação as escalas submalha e tensões SGS, que devem ser modeladas.

Em alguns casos toma-se a função filtro com um suporte compacto, isto é, assumindo valores finitos em um domínio finito e anulando-se fora dessa região. As dimensões do domínio suporte compacto são assumidas ser muito menores que as escalas características espacial e temporal dos grandes turbilhões e muito maiores que aquelas referente aos menores turbilhões. Há, contudo, funções filtro em uso, tais como o filtro gaussiano e o filtro frequência de corte no espaço Fourier, que não tem suporte compacto (Hussain, 1998).

Em princípio, as equações LES e a sua discretização devem ser consistentes com as equações de Navier-Stokes, obedecendo, conseqüentemente, as mesmas propriedades de invariância. Obviamente a solução das equações de governo dos grandes turbilhões depende da função filtro. Deste modo, estas funções devem preservar as propriedades de invariância das equações de Navier-Stokes. Outra importante exigência é que as equações do movimento das grandes escalas não sejam mais complexas que as próprias equações de Navier-Stokes.

Para uma dada função filtro, auto consistência requer que os resultados filtrados sejam independentes do suporte compacto ou o que se pode chamar, do subintervalo de filtragem (Hussain, 1998). Por exemplo, no caso de um filtro espacial, as estatísticas dos resultados LES, com duas bandas de filtro diferentes, seriam aproximadamente as mesmas. Esta verificação de consistência, embora possível em alguns casos, raramente é realizada na prática (Hussain, 1998). A premissa fundamental é que há uma grande extensão para a banda do filtro ( $\Delta$ ), no intervalo ( $l_d, L$ ), onde os resultados são estatisticamente independentes da banda do filtro (Rogallo & Moin, 1984; Hussain, 1998). Está hipótese é a base do procedimento conhecido na literatura como modelagem dinâmica de escalas submalha.

O subintervalo de filtragem ou a banda de filtro,  $\Delta$ , deve estar entre a escala de comprimento integral ( $L$ ) e a escala de dissipação de Kolmogorov ( $l_d$ ). A condição de auto consistência requer que  $\Delta$  seja muito maior que a largura da malha,  $h$  (Hussain, 1998). Quando as menores escalas permitidas pelo filtro e modelo SGS,  $O(\Delta)$ , forem suficientemente maiores que as menores escalas resolvidas da malha,  $O(h)$ , os resultados da computação serão independentes da escolha do algoritmo numérico e dependerão somente do filtro e do modelo SGS (Hussain, 1998). Deste modo, a dissipação numérica, inerente ao processo de solução, não contamina o efeito das pequenas escalas, que está sendo modelado. Completa separação da física do problema da parte numérica é muito cara em simulação de grandes escalas, onde dobrar a malha em três direções, aumenta o custo de uma ou mais ordens de magnitude (Rogallo & Moin, 1984). Na prática tem-se feito  $\Delta \approx O(h)$  em cada direção coordenada. Consequentemente, de modo diferente à simulação numérica direta, as menores escalas resolvidas do movimento turbulento na simulação de grandes escalas (LES) ainda têm significativo nível de energia e sua resolução é freqüentemente pobre, sendo exigidos cuidados, para garantir que o erro numérico seja menor que os efeitos físicos do modelo submalha.

Entre os filtros mais comumente usados em simulação de grandes escalas estão os filtros gaussianos, o filtro ‘*top-hat*’ e o filtro de frequência de corte no espaço de Fourier (Hussain, 1998). No espaço físico, o filtro ‘*top-hat*’ é também

conhecido como filtro por volume, enquanto o filtro de frequência de corte no espaço de Fourier é também chamado filtro ‘*top-hat*’ no espaço de Fourier. Recentemente, filtros mais exóticos foram propostos. Alguns destes consideram a anisotropia e diminuem erros de comutação dos operadores diferenciais e de filtragem (Ghosal & Moin, 1995).

As operações de diferenciação e filtragem comutam se o filtro tem largura uniforme. O uso de filtros com largura variável introduz erros de comutação de segunda ordem na largura do filtro (Ghosal & Moin, 1995), o que limita o seu uso à precisão de segunda ordem. Algumas correções foram propostas por Ghosal & Moin (1995), para o uso de filtros de banda variável, a fim de que os erros de comutação fossem, neste caso, de quarta ordem.

O método numérico usado na resolução das equações de governo, na maioria das vezes, define o tipo de filtro utilizado na operação de filtragem. Se, por exemplo, o método de diferenças finitas ou volumes finitos forem utilizados, o filtro ‘*top hat*’ é sem dúvida a opção mais natural. Já em métodos espectrais, o filtro de corte no espaço de Fourier é o mais utilizado.

As funções filtro, mais usadas em simulação de escoamentos turbulentos, são listados a seguir (Hussain, 1998; Piomelle, 1999; Meneveau & Katz, 2000):

- *Filtro Gaussiano isentrópico no espaço físico*

$$\bar{G}(\vec{x}, \Delta) = \left( \frac{6}{\pi \Delta^2} \right)^{3/2} \exp\left( -6 \frac{x_i x_i}{\Delta^2} \right) \quad (\text{D.1})$$

Este filtro é principalmente usado em simulação de escoamento turbulento homogêneo e tem a vantagem de poder ser diferenciado quantas vezes se desejar. Sua transformada de Fourier é também gaussiana. É positivo definido tanto no espaço físico como no espaço de Fourier. Satisfaz a condição de invariância no tempo, a invariância galileana, invariância rotacional e realizabilidade (Hussain, 1998).

- *Filtro de frequência de corte no espaço de Fourier:*

É um filtro normalmente utilizado em conjunto com métodos espectrais em escoamentos turbulentos incompressíveis homogêneos. Na sua forma isotrópica, modos de Fourier, com número de onda maior que  $(\pi/\Delta)$ , são tomados como

sendo zero. No espaço de Fourier é definido por:

$$\hat{G}(k) = \begin{cases} 1 & \text{se } |k| \leq \frac{\pi}{\Delta} \\ 0 & \text{se } |k| > \frac{\pi}{\Delta} \end{cases} \quad (D.2)$$

É também conhecido como filtro ‘*top-hat*’ no espaço de Fourier. No espaço físico, é definido na sua forma isotrópica por:

$$\bar{G}\left(\vec{x}, \frac{\pi}{\Delta}\right) = \left(\frac{\text{sen}(\pi x/\Delta)}{\pi x}\right) \left(\frac{\text{sen}(\pi y/\Delta)}{\pi y}\right) \left(\frac{\text{sen}(\pi z/\Delta)}{\pi z}\right) \quad (D.3)$$

Sua grande desvantagem está no fato de apresentar, no espaço físico, regiões negativas. Satisfaz a condição de invariância no tempo e a invariância galileana, mas viola a condição de realizabilidade no espaço físico (Hussain, 1998; Meneveau & Katz, 2000).

- *Filtro de corte no espaço físico:*

É também conhecido como ‘*top-hat*’ no espaço físico ou filtro por volume ou, ainda, por filtro ‘*box*’. A maioria dos métodos de diferenças finitas e volumes finitos utiliza este filtro implicitamente. A função filtro somente é não nula, na região onde se realiza o processo de média. Sobre qualquer tipo de malha, o operador reduz-se a uma integral da variável sobre uma extensão espacial finita. Por exemplo, para uma malha uniforme, define-se a função filtro (o operador média) como:

$$G(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3} & \text{se } |x_i| \leq \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{se } |x_i| > \frac{\Delta}{2} \end{cases} \quad (D.4)$$

O filtro ‘*top-hat*’ tem sido empregado em diversos escoamentos, particularmente em geometrias complexas. Ele satisfaz a condição de invariância no tempo e a realizabilidade. Seu suporte compacto é uma função da geometria da malha. Em particular, se  $\Delta$  for tomado como o tamanho da malha, o processo de filtragem se confunde com a própria filtragem imposta pela discretização, desde que, no interior do volume de discretização, as variáveis sejam supostas constantes.

- *Filtros temporais:*

Recentemente, tem sido considerado o filtro temporal como uma alternativa aos mais comuns filtros espaciais. Seu apelo repousa na facilidade de sua aplicação a malhas estruturadas complexas. Um exemplo é o filtro euleriano (Hussain, 1998):

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int_{t-\tau}^t G(\vec{x}, t-t') f(\vec{x}, t') dt' \quad (D.5)$$

Da definição do operador de filtragem e da propriedade de conservação, (eq. 4.4), verifica-se que são válidas, para filtros com banda uniforme, as seguintes propriedades:

$$\overline{a(u+v)} = a(\bar{u} + \bar{v}) \quad (D.6)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = \overline{\frac{\partial u}{\partial t}} \quad (D.7)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = \overline{\frac{\partial u}{\partial x}} \quad (\text{comutatividade}) \quad (D.8)$$

Mas, de uma maneira geral, não são verdadeiras as propriedades clássicas da decomposição de Reynolds, ou seja:

$$\overline{(u_i u'_j)} \neq 0 \quad (D.9)$$

$$\overline{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)} \neq \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}\right) \quad (D.10)$$

Ao aplicar-se então o filtro as equações de Navier-Stokes (eq. 4.1) e a equação da continuidade (eq. 4.2), obtém-se as equações de governo das escalas resolvidas:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j u_i})}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (D.11)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (D.12)$$

A dificuldade destas equações se origina nos termos não lineares. Estes se apresentam na forma de produtos filtrados, não permitindo a solução imediata deste sistema de equações. No passado, a forma de abordar este problema, a fim de expressar os produtos em termo das variáveis filtradas, utilizava o conceito de decomposição:

$$u_i = \overline{u_i} + u'_i \tag{D.13}$$

Introduzindo o referido conceito nos termos não lineares, estes assumem a seguinte forma:

$$\overline{u_i u_j} = \overline{\overline{u_i} \overline{u_j}} + \overline{u'_i u'_j} + \overline{u'_i \overline{u_j}} + \overline{\overline{u_i} u'_j} \tag{D.14}$$

Ao se levar a decomposição às equações filtradas (eq. D.11), estas tomam a forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j \overline{u_i}})}{\partial x_j} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right) - \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_j} + \overline{u'_i \overline{u_j}} + \overline{\overline{u_i} u'_j}) \end{aligned} \tag{D.15}$$

O termo,  $\overline{\overline{u_i} \overline{u_j}}$ , é totalmente dependente das grandes escalas e em tese é calculável. Os componentes de pequenas escalas do campo de velocidade,  $u'_i$ , não são calculados. Assim os termos que os contém precisam ser modelados. O componente  $u'_i$  é o chamado componente de escala submalha do campo de velocidade. Esta designação não é de todo correta, pois, como já foi afirmado, a largura do filtro ( $\Delta$ ) não necessita ser obrigatoriamente relacionada ao tamanho da malha ( $h$ ).

A nível de engenharia, foi Deardorff (1970) o primeiro a realizar simulações de escoamento turbulento com a metodologia das grandes escalas. Ele estabeleceu muitos dos fundamentos desta nova técnica de simulação, ao simular o escoamento turbulento em um canal. Melhoramentos nestes procedimentos foram introduzidos por Schumann (1973) e Grotzbach (1976). A abordagem, então em

voga, utilizava explicitamente o termo  $\overline{\overline{u_i u_j}}$ , resultante do processo de decomposição, isto é, utilizava a eq. (D.15). Embora possa ser diretamente calculado das escalas resolvidas, este termo é a filtragem de um produto de duas variáveis. Objetivando atender a exigência de tornar as equações do movimento das grandes escalas não mais complexas que as próprias equações de Navier-Stokes e eliminar o inconveniente de se ter a filtragem de um produto no termo convectivo, foi utilizado o tensor adicional  $(\overline{u_i u_j})$ . Este novo tensor foi somado a ambos os lados da equação do movimento das grandes escalas (eq. D.11), a qual toma a forma:

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j u_i})}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}) \tag{D.16}$$

Utilizando-se novamente o conceito de decomposição, os termos a serem modelados foram então escritos como:

$$\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} = \overline{\overline{u_i u_j}} + \overline{u_i u'_j} + \overline{u'_i u_j} + \overline{u'_i u'_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} \tag{D.17}$$

Definindo-se os tensores:

$$L_{ij} = \left( \overline{\overline{u_i u_j}} - \overline{u_i} \overline{u_j} \right) \quad \text{Tensor de Leonard} \tag{D.18}$$

$$C_{ij} = \left( \overline{u_i u'_j} + \overline{u'_i u_j} \right) \quad \text{Tensor Cruzado} \tag{D.19}$$

$$Q_{ij} = - \left( \overline{u'_i u'_j} \right) \quad \text{Tensor Reynolds} \tag{D.20}$$

Pode-se reescrever os termos referentes as escalas submalha como:

$$\tau_{ij} = \left( \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} \right) = L_{ij} + C_{ij} + Q_{ij} \tag{D.21}$$

O tensor  $L_{ij}$ , chamado tensor de Leonard, é calculável a partir do campo

filtrado. Este tensor representa as interações entre as escalas resolvidas, as quais levam as contribuições de escala submalha (Piomelle, 1999). Foi Leonard, em 1974 (Rogallo & Moin, 1984), o primeiro a sugerir que estes termos fossem tratados separadamente. Como o cálculo direto do termo é difícil, ele propôs, para tratá-lo, um modelo simples, baseado na sua expansão em série de Taylor. Quando o filtro de corte no espaço de Fourier é utilizado, o tensor de Leonard é o próprio erro de ‘aliasing’ (Rogallo & Moin, 1984). Já o tensor  $C_{ij}$ , conhecido na literatura como tensor Cruzado, representa as interações entre escalas filtradas e não filtradas, enquanto o tensor  $Q_{ij}$ , denominado de tensor de Reynolds, relaciona as interações entre as escalas não filtradas (Piomelle, 1999; Silvestrini, 2000). Alguns trabalhos definiram o tensor  $M_{ij}$ , o qual engloba os termos de pequenas escalas de velocidade,

$$M_{ij} = \left( \overline{\overline{u_i u'_j}} + \overline{\overline{u'_i u_j}} + \overline{u'_i u'_j} \right) = C_{ij} + Q_{ij} \quad (\text{D.22})$$

denominando-o tensão de Reynolds de escala submalha.

Leonard mostrou que o tensor  $L_{ij}$  remove energia das escalas resolvidas e sugeriu que ele não fosse tratado juntamente com os outros tensores (Rogallo & Moin, 1984). Seu maior efeito parece ser a redistribuição de energia entre as várias escalas resolvidas. Clark et al. (1979) sugeriram expressar a soma dos tensores de Leonard e cruzado ( $L_{ij} + C_{ij}$ ) como uma expansão de Taylor do campo de velocidade filtrado. Aproveitando esta idéia, Findikakes & Street (1979) mostraram que:

$$L_{ij} + C_{ij} \cong \frac{\Delta_k}{12} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} \quad (\text{D.23})$$

Shaanam et al. (1975) haviam estimado que, quando um esquema de transporte convectivo de até segunda ordem fosse empregado, os tensores  $L_{ij}$  e  $C_{ij}$  poderiam ser desprezados. Silveira Neto et al., (1993), mostraram que, mesmo para esquemas de terceira ordem, estes dois tensores podem ser desprezados, face ao tensor de Reynolds ( $Q_{ij}$ ).

Contudo, o conceito de decomposição do campo em escalas filtradas e não filtradas hoje praticamente não é mais utilizado. As tensões submalha

( $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}$ ) são invariantes com respeito a transformação de Galilean, enquanto  $L_{ij}$  e  $C_{ij}$  não o são. Por esta e outras razões, a decomposição de escalas foi abandonada (Silvestrini, 2000; Piomelle, 1999; Lesieur & Metais, 1996), preferindo-se modelar a própria tensão submalha.

Deste modo, para escoamento incompressível de fluido Newtoniano, as equações de governo do movimento filtrado podem ser finalmente colocadas na forma:

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j u_i})}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}) \quad (D.24)$$

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} = 0 \quad (D.25)$$

onde:

$$\tau_{ij} = (\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j}) \quad (D.26)$$

Essencialmente as equações de simulação das grandes escalas são as equações de Navier-Stokes escritas para as variáveis filtradas, com o termo de fluxo adicional, para modelar os efeitos das escalas não resolvidas. É um sistema de equações aberto, com mais incógnitas que equações. As equações devem ser fechadas pela especificação do fluxo como função do campo resolvido. A seguir são discutidos alguns modelos de submalha de fechamento de turbulência, entre os quais os mais populares são o modelo de Smagorinsky, já apresentado no capítulo 4, o modelo dinâmico e o modelo de combinação linear (Hussain, 1998).

## D.2. Modelos de Escalas Submalha

Ao se obter as equações de governo do movimento das grandes estruturas, verificou-se que o efeito das menores escalas é representado através da tensão submalha  $\tau_{ij} = (\overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j})$ , a qual deve ser modelada. O fechamento do sistema deve ser realizado em termos do campo resolvido.

Inicialmente é proveitoso examinar qual o significado físico dos termos submalha. As eq. D.24, D.25 e D.26 descrevem o movimento das grandes estruturas turbilhonares. Nestas equações, os termos submalha representam a interação entre os grandes e pequenos turbilhões. De um modo geral, energia cinética é transferida dos grandes turbilhões para os pequenos turbilhões. Há, porém, um fluxo de energia em ambas as direções, embora o fluxo líquido seja usualmente na direção das pequenas escalas. Na verdade, neste processo interativo, parte da energia transferida as pequenas escalas retorna aos grandes turbilhões. Sabe-se que, em alguns casos, o fluxo líquido pode até ser na direção das grandes escalas (Lesieur & Metais, 1996). Consequentemente, os termos de escalas submalha nas equações de governo devem representar este efeito de transferência de energia sobre as grandes escalas. Por exemplo, a inversão no sentido natural do fluxo de energia ocorre nas regiões próximas as fronteiras sólidas, onde os pequenos turbilhões, que produzem turbulência, não são resolvidos, cabendo então ao modelo SGS considerar a menor produção imposta pelo truncamento. Na situação mais comum, a transferência líquida de energia, para os pequenos turbilhões, funciona como uma dissipação para as grandes estruturas. A energia líquida consumida não retornará e, em consequência, o modelo submalha deve ser normalmente dissipativo.

A simulação numérica de escoamentos turbulentos é mais complexa em LES que em DNS. Na simulação numérica direta, o espectro de energia, embora contínuo, decai para zero em altos números de onda. Deste modo, simplesmente a malha deve ser capaz de resolver as menores escalas do movimento que tem uma energia significativa. Já na simulação de grandes escalas, considera-se somente as escalas do movimento maiores que alguma banda de filtro  $\Delta_{\text{filtro}}$ , as quais deverão estar representadas numericamente sobre alguma malha, tal que  $\Delta_{\text{malha}} \leq \Delta_{\text{filtro}}$ . Consequentemente, de modo diferente da simulação direta, as menores escalas resolvidas do movimento, em simulação de grandes escalas, ainda têm uma quantidade de energia significativa.

Como, em simulação de grandes escalas, as escalas dissipativas do movimento são resolvidas de modo pobre ou nem todas são resolvidas, o principal papel do modelo submalha é remover energia das escalas resolvidas, representando o fluxo de energia associado a chamada cascata de energia.

A função do modelo submalha não é dar as estatísticas das escalas não resolvidas diretamente, mas evitar que as escalas descartadas da simulação estraguem a determinação das estruturas de interesse. A mais importante contribuição do modelo é produzir, ou ao menos permitir, transferência de energia entre escalas resolvidas e as escalas submalha em uma magnitude aproximadamente correta. Como já foi dito, esta transferência é usualmente do campo resolvido para as escalas submalha, mas pode ocorrer em sentido inverso, especialmente próximo as fronteiras sólidas. Enfim, a filosofia da simulação das grandes escalas não quer que o modelo submalha forneça informações detalhadas sobre as escalas não resolvidas, mas reproduza os efeitos destas escalas sobre o campo resolvido.

A maioria dos modelos submalha são modelos de viscosidade turbulenta, sendo os modelos de Smagorinsky, combinação linear e o modelo dinâmico de Germano et al. (1991) os mais populares (Hussain, 1998; Piomelli, 1999). Na verdade este último é um procedimento dinâmico de calcular o parâmetro do modelo base. No restante deste item, são apresentados alguns modelos de escala submalha (SGS) usados na simulação de grandes escalas.

### **D.2.1. Modelo de Similaridade de Escala**

Todos os modelos, por definição, relacionam a tensão de escala submalha ao campo de escoamento de escalas resolvidas. Os modelos de viscosidade turbulenta assumem uma correlação local do tensor de tensão de escala submalha com o tensor de tensão da taxa de deformação das escalas de malha. Estes modelos extraem energia do campo das grandes escalas, isto é, são dissipativos. É difícil construir outros modelos com esta propriedade, embora ela nem sempre seja desejável, como se viu anteriormente.

A análise dos dados experimentais e de simulação direta dos campos de escoamentos turbulentos tem mostrado que não há forte correlação entre o tensor de tensão submalha e o tensor de tensão da taxa de deformação da escala de malha (Lesieur & Metais, 1996; Piomelle, 1999). A falta de correlação entre os dois tensores levou a busca de novos modelos de escala submalha.

O modelo de similaridade nasceu exatamente da constatação da pobre correlação do tensor de tensão submalha com o tensor de tensão da taxa de deformação das escalas resolvidas (Lesieur & Metais, 1996). Foram Bardina et al. (1980) que primeiro introduziram a noção de similaridade, ao suporem que a interação entre os componentes de grandes e pequenas escalas do campo de escoamento toma lugar principalmente entre o segmento de cada grupo, que é mais similar ao outro. Deste modo, a maior interação acontece entre as menores escalas do campo de escalas resolvidas e as maiores escalas do campo de escalas submalha. É esta interação que os termos de escala submalha, nas equações filtradas, deveriam representar preferencialmente. Uma vez que os componentes de interação são supostos muito mais semelhantes, é natural que o modelo reflita isso. Para tornar isto possível, é necessário achar algum modo de definir os componentes de pequenas escala do campo resolvido  $\overline{u_i}$ . Uma vez que  $\overline{u_i}$  representa o componente das escalas resolvidas, Bardina et al. (1980) propõem filtrar novamente o campo resolvido (Piomelle, 1999), gerando um novo campo  $\overline{\overline{u_i}}$ , cujo conteúdo é ainda rico nas grandes escalas. Assim,

$$\tilde{u}_i = \overline{u_i} - \overline{\overline{u_i}} \quad (D.27)$$

conteria as menores escalas do campo resolvido. Isto sugere, pelo princípio da similaridade, que um razoável modelo seria dado por:

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}} \cong C_{sim} \left( \overline{\overline{u_i u_j}} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}} \right) \quad (D.28)$$

A tensão de submalha é portanto determinada, filtrando-se novamente o campo resolvido. Vale mencionar, que ao postulado das maiores escalas submalha serem similares as menores escalas resolvidas, tem sido dado somente uma base empírica. A análise de sucessivas bandas de escalas tem mostrado que certas estruturas ocorrem simultaneamente para diferentes escalas, aproximadamente na mesma localização (Meneveau & Katz, 2000).

Atualmente há muitas formas diferentes de modelos de similaridade, embora suas características básicas e tendências sejam comuns. As principais diferenças repousam sobre o tipo e a banda do segundo filtro e como determinar o

valor do coeficiente  $C_{sim}$ . O modelo original de Bardina et al. (1980) propunha que a banda do segundo filtro fosse igual a do primeiro (Meneveau & Katz, 2000). Como reportado por Meneveau & Katz (2000), Lui et al. (1999) utilizaram o segundo filtro com uma banda duas vezes maior ( $2\Delta$ ) que a do filtro original, enquanto Akhavan et al. (2000) usaram  $(4/3)\Delta$ . Outra diferença é se o traço do tensor é subtraído ou não. Já o valor de  $C_{sim}$ , quando tomado constante, tem sido na sua maioria adotado como 1.

O teste a “priori” do modelo de Bardina et al. (1980) tem sido realizado com filtros gaussianos ou “box”, mostrando alta correlação (cerca de 80%) (Meneveau & Katz, 2000). O modelo de similaridade também tem sido capaz de representar a transferência de energia das pequenas para as grandes escalas. Contudo, quando implementado em simulações numéricas, o modelo de similaridade tem se mostrado ser insuficientemente dissipativo, isto é, não dissipando energia suficiente e, conseqüentemente, levando a resultados imprecisos.

### D.2.2. Modelo de Combinação Linear

Uma vez que o modelo de similaridade de escala proposto por Bandina et al. (1980) não dissipa muita energia e o modelo de viscosidade turbulenta, formulado por Smagorinsky, é muito dissipativo, é natural combiná-los, na esperança de corrigir suas deficiências individuais. A soma linear do modelo de Smagorinsky e do modelo de similaridade de escala produz o que na literatura se conhece como modelo de combinação linear ou modelo misto:

$$\tau_{ij} = \left( \overline{\overline{u_i u_j}} - \overline{u_i u_j} \right) - 2 \nu_t S_{ij} \quad (D.29)$$

Este modelo tem sido largamente usado e obtido considerável sucesso (Rodi et al., 1997; Piomelle, 1999). O modelo misto combina a força de ambos os modelos de Smagorinsky e similaridade. Tipicamente a magnitude do termo de similaridade é significativamente maior que aquela do termo de Smagorinsky. Deste modo, o termo de viscosidade turbulenta agregado ao modelo de

similaridade não degrada a boa correlação do modelo com o campo exato (Meneveau & Katz, 2000).

### D.2.3 Modelo Gradiente ou Não Linear

A implementação dos modelos de similaridade ou misto exige um esforço computacional adicional devido ao segundo processo de filtragem. Em consequência, alguns autores propuseram evitar a filtragem secundária, expandindo-se  $\overline{u_i}$  em uma série de Taylor e realizando esta filtragem analiticamente. Deste modo, o esforço computacional seria reduzido, sem comprometer as vantagens do conceito de similaridade (Meneveau & Katz, 2000). Este procedimento deu origem ao chamado modelo de escala submalha gradiente ou não linear:

$$\tau_{ij} = \left( \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} \right) \cong C_{nl} \Delta^2 \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} \quad (\text{D.30})$$

onde o coeficiente  $C_{nl}$  depende do filtro. A eq. (D.30) acima é aplicável somente aos filtros com segundo momento finito. Assim não é possível aplicá-lo com o filtro de corte. O modelo não linear não apresenta o comportamento assintótico correto ( $y^3$ ) na região da parede (Meneveau & Katz, 2000).

Outros modelos não lineares, para simulação de grandes escalas, tem sido propostos na literatura independentemente do modelo de similaridade (Meneveau & Katz, 2000).

### D.2.4. Modelo de Escala Submalha Função Estruturada de Velocidade

A teoria de fechamento em dois pontos tem sido utilizada para construir modelos submalha para simulação de grandes escalas (Piomelli, 1999; Silvestrini, 2000). Kraichnan (1976) determinou a energia transferida das escalas resolvidas

para as escalas submalha, para um número de onda de corte pertencente a um subintervalo inercial infinito, usando um modelo de fechamento de dois pontos para turbulência homogênea isentrópica (Piomelli, 1999).

A partir da teoria estatística desenvolvida por Kraichnan, Chollet & Lesieur (1982) utilizaram a teoria de fechamento de dois pontos EDQNM (por ‘*Eddy Damped Quasi-Normal Markovian*’), modelo de Orszag (1970) (Rogalo & Moin, 1984; Piomelli, 1999), para fazer o fechamento das equações de conservação no espaço de Fourier (Fersiger, 1984; Piomelli, 1999). Eles desenvolveram um modelo submalha de viscosidade turbulenta baseado no espectro de energia cinética turbulenta  $E(k)$  e no número de onda de corte,  $k_c$ , definido no subintervalo inercial. O modelo emprega  $[k_c E(k_c)]^{1/2}$  e  $k_c^{-1}$  como sendo, respectivamente, a escala de velocidade e a escala de comprimento, para obter a viscosidade turbulenta submalha (Piomeli, 1999; Silvestrini, 2000). Chollet & Lesieur (1981) obtiveram a viscosidade turbulenta, no espaço de Fourier, como (Piomelli, 1999):

$$\nu_t = \nu_t^+ (k/k_c) \sqrt{\frac{E(k_c, t)}{k_c}} \tag{D.31}$$

e Chollet propõe ajustar empiricamente a função  $\nu_t^+ (k/k_c)$  pela expressão (Piomelli, 1999):

$$\nu_t^+ \left( \frac{k}{k_c} \right) = C_k^{-3/2} \left[ 0,441 + 15,2 \exp \left( -3,03 \frac{k_c}{k} \right) \right] \tag{D.32}$$

onde foi suposta a existência do intervalo inercial de Kolmogorov. Tomando a constante de Kolmogorov  $C_k$  como 1,4, a expressão pode ser rearrumada da seguinte forma (Sivestrini, 2000)

$$\nu_t^+ \left( \frac{k}{k_c} \right) = 0,267 \left[ 1 + 34,5 \exp \left( -3,03 \frac{k_c}{k} \right) \right] \tag{D.33}$$

O modelo de Chollet & Lesieur produz viscosidade turbulenta nula tão logo não haja energia próximo ao número de onda de corte. Contudo, o modelo é definido no espaço de Fourier, o que impede a sua extensão para geometrias complexas e, por exemplo, para esquemas de diferenças finitas (Ferziger, 1984;

Piomelli, 1999).

A fim de superar esta deficiência, Metais & Lesieur (1991) propuseram utilizar o conceito de função estruturada de segunda ordem de velocidade, desenvolvendo o modelo de escala submalha de função estruturada de velocidade. Assumindo um número de onda de corte na região do subintervalo do espectro de Kolmogorov, Metais & Lesieur (1991) expressaram o espectro de energia, em termos da função estruturada de segunda ordem, como sendo (Silveira Neto, 1998):

$$E(x, k_c, t) = 0,03 \Delta F_2(x, r, t) \quad (\text{D.34})$$

onde  $\Delta$  é a banda do filtro,  $k_c = \pi/\Delta$  é o número de onda de corte, e  $r$  é o raio da região onde é realizado o processo de média (Silveira Neto, 1998). Entretanto, originalmente a função estruturada  $F_2(x, r, t)$  é relativa ao espectro de energia completo, com  $k \in [0, \infty)$ , e a simulação de grandes escalas só resolve escalas até  $k_c$  ( $k < k_c$ ). Em consequência, falta a parte referente as escalas submalha ( $k > k_c$ ). A proposta de Metais & Lesieur (1991) introduz, então, uma correção para a função estruturada de segunda ordem de velocidade, supondo uma extensão do intervalo inercial do espectro de energia para  $k > k_c$ . Estabeleceu-se a função estruturada de segunda ordem da velocidade do campo resolvido como (Silveira Neto, 1998; Silvestrini, 2000):

$$F_2(\vec{x}, r, t) = \left\langle \left\| \overline{u_i}(x+r, t) - \overline{u_i}(x, t) \right\|^2 \right\rangle \quad (\text{D.35})$$

onde o operador  $\langle \rangle$  denota um processo de média em torno do ponto  $x$ , tal que  $\|r\| = \Delta$ . O cálculo deve então ser realizado, utilizando-se o campo de velocidade resolvido. A forma mais simples de calcular esta média espacial é fazê-la sobre os seis pontos nodais vizinhos do ponto em estudo.

De posse do espectro de energia cinética de turbulência homogênea isentrópica, o qual é relacionado a função estruturada de segunda ordem de velocidade, e a própria função estruturada corrigida para o campo resolvido, o modelo submalha de função estruturada é obtido como (Silveira Neto, 1998; Piomelli, 1999; Silvestrini, 2000):

$$\nu_t(x, k_c, t) = C_{sf} \Delta \sqrt{F_2(x, \Delta, t)} \quad (D.36)$$

onde  $C_{sf} = 0,063$ .

É interessante destacar que, se uma malha isotrópica é usada, o modelo submalha função estruturada pode ser visto como uma aproximação de diferença finita do tensor gradiente de velocidade (Piomelli, 1999):

$$F_2 \cong 2 \Delta^2 \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = 2 \Delta^2 (S_{ij} S_{ij} + \Omega_{ij} \Omega_{ij}) = \Delta^2 (2 |S|^2 + 2 \Omega_{ij} \Omega_{ij}) \quad (D.37)$$

onde  $\Omega_{ij} = (1/2) [\partial \bar{u}_i / \partial x_j - \partial \bar{u}_j / \partial x_i]$  é a parte anti-simétrica do tensor do gradiente de velocidade e  $S_{ij} = (1/2) [\partial \bar{u}_i / \partial x_j + \partial \bar{u}_j / \partial x_i]$  é a parte simétrica.

Deste modo, quando as diferenças na função estruturada são substituídas, dentro de uma aproximação de primeira ordem, por derivadas espaciais, verifica-se que o modelo aproxima-se do modelo de Smagorinsky (Lesieur & Metais, 1996; Piomelli, 1999). Para a fórmula de seis pontos, no limite de  $\Delta \rightarrow 0$ , tem-se que (Lesieur & Metais, 1996; Silvestrini, 2000):

$$\nu_t(x, t) = 0,777 (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 S_{ij} S_{ij} + \overline{\omega_k \omega_k}} \quad (D.38)$$

onde  $\overline{\omega_k \omega_k} = \Omega_{ij} \epsilon_{ijk}$  é a vorticidade do campo filtrado e  $C_s$  a constante de Smagorinsky. Os resultados obtidos com o modelo submalha de função estruturada são cerca de 20% menos dissipativo que o modelo de Smagorinsky nas regiões de pequena vorticidade, como, por exemplo, em escoamentos isentrópicos (Lesieur & Metais, 1996; Piomelli, 1999). Entretanto nas regiões de alta vorticidade, como, por exemplo, no núcleo dos turbilhões, o modelo de função estruturada é mais dissipativo que o modelo de Smagorinsky (Silvestrini, 2000).

Melhores resultados foram obtidos, utilizando-se uma formulação de quatro pontos, na qual somente as diferenças de velocidade nos planos paralelos ao da parede foram usadas, ou pela aplicação de um filtro Langragiano à velocidade, antes de calcular a função estruturada (Piomelli, 1999).

Várias modificações, sobre a versão básica do modelo de escala submalha função estruturada, têm sido propostas nos últimos anos, mas a todas falta

generalidade. Este é um modelo relativamente recente, necessitando ainda um largo trabalho de desenvolvimento. Há grandes limitações no trato das regiões junto a parede e principalmente na transição a turbulência, onde as hipóteses de homogeneidade e isotropia já não são mais verdadeiras e a teoria de Kolmogorov não é válida (Silveira Neto, 1998).

**D.2.5. Modelo RNG de Escala Submalha**

A teoria do grupo de renormalização desenvolvida por Yakhot & Orszag (1986) e Yakhot & Smith (1992) foi utilizada para obter um modelo submalha RNG de viscosidade turbulenta. O procedimento, como já foi mostrado no capítulo anterior, resulta em uma viscosidade submalha efetiva,  $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$ , dada por (Hussain, 1998; Karniadakis et al. 1989):

$$\mu_{eff} = \mu [1 + H(X)]^{1/3} \tag{D.39}$$

onde  $H(X)$  é a função de Heaviside, tal que:

$$H(X) = \begin{cases} X & \text{se } X > 0 \\ 0 & \text{se } X \leq 0 \end{cases} \tag{D.40}$$

e  $X$  é dado pela expressão:

$$X = \frac{C_{RNG}^4 \Delta^4}{\mu^3} (\mu_{eff} \overline{2 S_{ij} S_{ij}}) - C \tag{D.41}$$

onde  $C_{RNG}=0,157$ ,  $C=100$  e  $\Delta=(\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3}$  é a escala de comprimento submalha característica.

Nas regiões de alto número de Reynolds do escoamento ( $\mu_t \gg \mu$ ), tem-se que

$$\mu_{eff} = (C_{RNG} \Delta)^2 \sqrt{\overline{2 S_{ij} S_{ij}}} \tag{D.42}$$

Ou seja, o modelo submalha RNG reduz-se ao modelo de Smagorinsky com uma constante de 0,157. Nas regiões de baixo número de Reynolds, o modelo faz a viscosidade efetiva recuperar a viscosidade molecular. Esta proposta do modelo submalha RNG o habilita a modelar os efeitos de baixo número de Reynolds encontrados nas regiões próximas a parede e em transição de escoamentos.

#### **D.2.6. Modelagem Dinâmica de Submalha**

A determinação ou ajuste a priori de um valor fixo dos coeficientes dos modelos de escala submalha, baseados no conceito de viscosidade turbulenta, levou a severas limitações no trato de escoamentos em transição e nas proximidades de paredes. A fim de resolver este problema, Germano et al. (1991) propuseram um método de calcular os parâmetros dos modelos baseados na solução, isto é, no campo de velocidades, tornando-os função da posição e do tempo. Esta proposta na verdade não é um modelo, mas um procedimento dinâmico de avaliar os coeficientes de um modelo base, a partir das menores escalas do campo resolvido. O modelo de Smagorinsky tem sido largamente usado como modelo base.

A introdução da idéia de avaliar dinamicamente os coeficientes dos modelos provocou um significativo progresso na modelagem submalha de escoamentos turbulentos afastados da condição de equilíbrio. O procedimento dinâmico utiliza o conhecimento do comportamento das menores escalas resolvidas para determinar os coeficientes do modelo base. Supõe-se que o comportamento das menores escalas resolvidas apresenta similaridade com o comportamento das escalas submalha (Silvestrini, 2000).

O conceito fundamental do procedimento dinâmico é o uso de dois filtros com comprimentos característicos diferentes:

- O primeiro é aquele utilizado na simulação das grandes escalas. É comum denominá-lo como filtro a nível de malha;
- O outro tem uma banda maior que a banda do filtro original, tipicamente  $\tilde{\Delta}=2\Delta$ , sendo conhecido na literatura como filtro teste.

O procedimento utiliza informações das escalas resolvidas não contidas no filtro teste, para modelar a transferência de energia entre as escalas resolvidas e as escalas não resolvidas. Assumindo que as tensões submalha obtidas com o filtro original e com o filtro teste são similares e podem ser modeladas, usando a mesma forma funcional, e supondo ainda que os parâmetros a determinar são aproximadamente independentes da banda do filtro, expressões explícitas, para os coeficientes, são levantadas (Germano et al., 1991; Hartel & Kleiser, 1998).

É importante destacar que os parâmetros, a serem determinados, são agora funções dependentes tanto do tempo como da posição espacial. Estas funções devem anular-se nas regiões de escoamento laminar e proximidades de fronteiras sólidas. Obtendo-se, conseqüentemente, um melhor comportamento assintótico. Simular o efeito de transferência inversa de energia cinética turbulenta das escalas submalha para as escalas resolvidas (*'backscatter'*), fenômeno que aparece nas regiões de camada limite, por exemplo, era uma possibilidade que se esperava alcançar com esta técnica (Germano et al., 1991).

Na versão mais simples do procedimento, o modelo de Smagorinsky é assumido como modelo base. O procedimento proposto por Germano et al. (1991) para determinar o coeficiente do modelo base dá origem a um conjunto de cinco equações independentes para avaliar um único parâmetro, o qual deste modo está hiperdeterminado. Duas alternativas foram propostas para tratar este problema, uma por Germano et al. (1991) e outra por Lilly (1992). Esta última tornou-se a mais utilizada (Germano et al., 1991; Lilly, 1992; Lesieur & Metais, 1996; Piomeli, 1999; Silvestrini, 2000). O resultado deste procedimento é um valor do parâmetro do modelo, que varia com a posição e tempo, sendo algumas vezes de forma muito drástica. São produzidas grandes viscosidades turbulentas negativas. A variância do coeficiente pode alcançar valores tão altos quantos dez vezes o quadrado do próprio valor médio (Lesieur & Metais, 1996). Conseqüentemente, a remoção do coeficiente  $C_s$  da operação de filtragem, como realizado por Germano et al. (1991), não se justifica e o procedimento exhibe alguma inconsistência matemática (Ghosal et al., 1995). O valor negativo do coeficiente implica numa viscosidade turbulenta localmente negativa, o que representa um fluxo de energia das menores escalas para as escalas resolvidas (*'backscatter'*). A presença da cascata inversa (*'backscatter'*) é uma desejável característica do modelo

submalha. Contudo, o coeficiente do modelo tem um grande tempo de auto-correlação. Portanto, desde que o parâmetro do modelo se torne negativo em alguma região, permanecerá assim por prolongados períodos de tempo, durante o qual o crescimento exponencial local do campo de velocidade, associado com a viscosidade negativa, causará um crescimento não físico da energia das escalas resolvidas (Ghosal et al., 1995; Lesieur & Metais, 1996). Algumas soluções para este problema têm sido propostas na literatura. Entre estas, sugere-se fazer a média das quantidades envolvidas sobre uma ou mais direções homogêneas (Germano et al., 1991; Piomelli, 1999) ou no tempo (Piomelli, 1992). Embora a média do coeficiente sobre direções homogêneas do escoamento remova a inconsistência matemática do procedimento e tenha se tornado a escolha mais popular, perde-se algumas das vantagens conceituais da formulação dinâmica do estado local do escoamento (Lilly, 1992; Lesieur & Metais, 1996). A média realizada sobre o coeficiente faz com que a função varie mais lentamente, de modo que raramente torna-se negativa (Ghosal et al., 1995). Este esquema tem produzido resultados em boa concordância com experimentos e simulações diretas. O procedimento dinâmico rende um comportamento assintótico correto no limite da parede, obtendo naturalmente uma tensão submalha nula na parede (Lesieur & Metais, 1996). As suas desvantagens são: (a) baseia-se sobre um procedimento empírico; (b) pode ser aplicado somente a escoamentos que tenham ao menos uma direção homogênea (Ghosal et al., 1995; Lesieur & Metais, 1996). Ghosal et al. (1995), utilizando uma formulação integral da identidade de Germano et al. (1991), rigorosamente removeram a inconsistência matemática de extrair o coeficiente da operação de filtragem, a custo de ter de resolver uma equação integral a cada passo de tempo (Lesieur & Metais, 1996; Piomelli, 1999). Uma outra formulação alternativa foi sugerida por Meneveau et al. (1994, 1996), na qual o erro associado à identidade de Germano et al. (1991) é minimizado ao longo da trajetória de uma partícula, ao invés de uma direção homogênea (Lesieur & Metais, 1996; Piomelli, 1999). Contudo, duas equações de transporte adicionais necessitam ser resolvidas, o que aumenta o trabalho computacional (Lesieur & Metais, 1996). Certamente a opção mais simples seja assumir a viscosidade turbulenta nula, quando o valor calculado for negativo, embora esta alternativa anule totalmente a possibilidade saudável da existência da cascata inversa de

energia.

Por fim cabe destacar que não é obrigatório o uso do modelo de Smagorinsky como modelo base para o emprego do procedimento dinâmico. Qualquer modelo submalha de viscosidade turbulenta pode ser utilizado com o referido procedimento.

O procedimento dinâmico parte das equações de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (D.43)$$

Aplicando-se a função filtro  $G$  (eq. 3) com uma banda característica  $\Delta$ , a qual é a original do procedimento de simulação, obtém-se a equação filtrada abaixo:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (D.44)$$

onde a barra representa o processo de filtragem com o filtro de banda  $\Delta$ . Da definição do tensor

$$\tau_{ij} = (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (D.45)$$

A equação pode ser rescrita na forma :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \right) \quad (D.46)$$

Aplicando-se novamente a função filtro  $G$ , agora com uma nova banda  $\hat{\Delta} > \Delta$ , à equação filtrada (eq. D.44), obtém-se:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (D.47)$$

Definindo o tensor  $T_{ij}$  como:

$$T_{ij} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (D.48)$$

A eq. (D.47) toma a forma:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_j \tilde{u}_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - T_{ij} \right) \quad (D.49)$$

Do modelo de Smagorinsky, utilizado aqui como base, tem-se que:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} = 2 C \Delta^2 \left| \bar{S} \right| \bar{S}_{ij} \quad (D.50)$$

$$\left| \bar{S} \right| = \left( 2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij} \right)^{1/2} \quad (D.51)$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (D.52)$$

A quantidade  $C$  é o coeficiente do modelo (na verdade o quadrado do parâmetro original  $C_S$ ) e  $\Delta$  é a escala característica do filtro, tipicamente igual ao espaçamento da malha  $h$ . O termo  $1/3 \delta_{ij} \tau_{kk}$  assegura que, na ausência de cisalhamento, o tensor será isotrópico, com seu traço sendo igual a duas vezes a energia cinética das escalas submalha.

Já o tensor de Reynolds de escala submalha referente ao filtro teste é modelado por:

$$T_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} T_{kk} = 2 C \tilde{\Delta}^2 \left| \tilde{S} \right| \tilde{S}_{ij} \quad (D.53)$$

Com  $\left| \tilde{S} \right|$  e  $\tilde{S}_{ij}$  sendo definidos de modo similar aquele do filtro a nível de malha. A escala do filtro teste é referenciada por  $\tilde{\Delta}$ .

Por fim, aplica-se o filtro teste (banda  $\tilde{\Delta}$ ) ao tensor  $\tau_{ij}$ , na sua forma não modelada e modelada, obtendo-se:

$$\tilde{\tau}_{ij} = \left( \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \right) \quad (D.54)$$

$$\widetilde{\tau}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{\tau}_{kk} = -2 C \Delta^2 \left| \widetilde{S} \right| \widetilde{S}_{ij} \quad (D.55)$$

A grande contribuição ao problema da modelagem de escala submalha, dada por Germano et al. (1991), vem da hipótese de consistência entre os tensores modelados  $T_{ij}$  e  $\tau_{ij}$ , sustentada pela escolha local do parâmetro  $C$ . Para mostrar isto, define-se o novo tensor  $L_{ij}$ , dado por:

$$L_{ij} = T_{ij} - \widetilde{\tau}_{ij} = \left( \frac{\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j}{\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j} - \frac{\widetilde{u}_i}{\widetilde{u}_i} \frac{\widetilde{u}_j}{\widetilde{u}_j} \right) \quad (D.56)$$

Os elementos de  $L_{ij}$  são numericamente os componentes resolvidos do tensor associado com as escalas do movimento, entre a escala de teste e a escala a nível de malha. Estes elementos podem ser avaliados explicitamente e comparados localmente com a diferença das aproximações de fechamento, isto é:

$$L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} = 2 C M_{ij} \quad (D.57)$$

onde:

$$M_{ij} = \widetilde{\Delta}^2 \left| \widetilde{S} \right| \frac{\widetilde{S}_{ij}}{\widetilde{S}_{ij}} - \Delta^2 \left| S \right| \frac{S_{ij}}{S_{ij}} \quad (D.58)$$

Levantando-se  $L_{ij} - (1/3) \delta_{ij} L_{kk}$  explicitamente do campo resolvido, da definição da função filtro e da banda  $\widetilde{\Delta}$ , pode-se determinar o valor de  $C$ . O problema é que a eq. (D.57) representa cinco equações independentes em uma única incógnita. Assim, nenhum valor de  $C$  pode ser obtido corretamente. Contudo, seu erro pode ser minimizado pela aplicação da técnica de mínimo quadrado (Lilly, 1992). Definindo  $Q$  como sendo o quadrado do erro, isto é:

$$Q = \left( L_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} L_{kk} - 2 C M_{ij} \right)^2 \quad (D.59)$$

$C$  é avaliado da condição  $\partial Q / \partial C = 0$ , como

$$C = \frac{1}{2} \left( \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \right) \quad (\text{D.60})$$

Isto representa um mínimo de  $Q$ , uma vez que é fácil mostrar que  $\partial^2 Q / \partial C^2 > 0$  (Lilly, 1992). Note que o termo referente a isotropia não aparece no numerador da expressão de  $C$ , pois  $\overline{S_{ii}} = 0$  em escoamentos incompressíveis. Já o resultado original de Germano et al. (1991), obtido pela aplicação do produto escalar da eq. (D.57) com  $\overline{S_{ij}}$  era dado por:

$$C = \frac{1}{2} \left( \frac{L_{ij} \overline{S_{ij}}}{M_{ij} \overline{S_{ij}}} \right) \quad (\text{D.61})$$

O numerador das eq. (D.60) e (D.61) e, conseqüentemente, o sinal de  $C$  podem tornar-se negativo, levando ao efeito de fluxo de energia para as grandes escalas ('*backscatter*'). Este efeito é considerado por Germano et al. (1991) como sendo um aspecto favorável do seu procedimento, uma vez que o modelo passa a ser capaz de adicionar energia aleatoriamente as escalas explícitas. Contudo, como já foi dito anteriormente, há o risco de grandes valores negativos de viscosidade turbulenta tornarem a simulação numérica instável (Rodi, et al., 1997; Lilly, 1992). Conseqüentemente, tem-se tomado um valor de  $C$  médio, obtido da expressão (Piomelli, 1999):

$$C = \frac{1}{2} \frac{\langle L_{ij} M_{ij} \rangle}{\langle M_{ij} M_{ij} \rangle} \quad (\text{D.62})$$

onde  $\langle \rangle$  indica um processo de média.

### D.2.7. Modelos de uma Equação

Na modelagem clássica de Reynolds, é conhecido há muito tempo que os modelos algébricos de viscosidade turbulenta modelam inadequadamente as médias de Reynolds. Um número de modelos mais complexos tem sido propostos, os quais tem encontrado ressonância na modelagem submalha.

Muitos dos melhoramentos são baseados na noção que a proporcionalidade entre a tensão de Reynolds e a taxa de deformação média é válida, mas a formulação da viscosidade turbulenta necessita ser melhorada. Nestes modelos escreve-se que:

$$\nu_t = C_t q L \tag{D.63}$$

onde  $q$  e  $L$  são, respectivamente, escalas de velocidade e comprimento da turbulência e  $C_t$  uma constante. Nos modelos de uma equação, o comprimento de escalas é prescrito e uma equação diferencial parcial, para a energia cinética turbulenta submalha ( $\kappa = \tau_{kk} / 2$ ) é resolvida, a fim de obter a escala de velocidade. A equação de  $\kappa$  apresenta três termos que necessitam de modelagem. O primeiro é a dissipação viscosa, a qual é usualmente tomada como sendo proporcional a  $\kappa^{3/2} / \Delta$ . Os outros dois são o termo de transporte turbulento e a difusão de pressão, os quais são normalmente modelados juntamente como sendo uma difusão adicional. Consequentemente, o modelo de uma equação submalha pode ser posto como (Piomelli, 1999):

$$\nu_t = C_t \Delta \kappa^{1/2} \tag{D.64}$$

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j \kappa})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\nu + \nu_t) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} + \tau_{ij} \overline{u_i} \right) - C_\varepsilon \frac{\kappa^{3/2}}{\Delta} - \tau_{ij} \overline{S_{ij}} \tag{D.65}$$

As constantes  $C_t$  e  $C_\varepsilon$  podem ser avaliadas baseando-se na teoria de turbulência ou ajustadas dinamicamente (Piomelli, 1999). Entre as suas vantagens está a definição independente da escala de velocidade, resultando em uma descrição mais precisa da escala de tempo submalha, comparada aos modelos algébricos de viscosidade turbulenta. Nestes últimos,  $1/|\overline{S}|$  é geralmente usado como escala de tempo. Contudo, seus resultados não têm sido animadores e, consequentemente, a solução de uma equação adicional não tem se justificado dentro da técnica de simulação de grandes escalas (Ferziger, 1984; Piomelli, 1999).

### **D.2.8. Validação Computacional dos Modelos SGS**

Duas abordagens tem sido comumente usadas para desenvolver e testar modelos com média no tempo. Um método usa escoamentos turbulentos simples (usualmente homogêneos), para testar a validade dos modelos e determinar os parâmetros ajustáveis. A maior crítica a esta corrente é que a estrutura dos escoamentos homogêneos difere consideravelmente dos escoamentos que se quer realmente simular, e as constantes podem não ser válidas em muitos escoamentos complexos. O outro método ajusta os parâmetros, para representarem escoamentos similares aqueles que se quer calcular. Isto não é fácil de ser realizado, pois muitos parâmetros devem ser ajustados simultaneamente (Ferziger, 1984).

Entretanto, desenvolver e testar modelos de escala submalha é mais difícil. No passado, dados sobre as pequenas escalas de turbulência eram raros e validação direta do modelo, usando resultados experimentais, era praticamente impossível. Conseqüentemente, as constantes eram avaliadas por outros métodos. A abordagem foi quase completamente baseada sobre a teoria e usava as propriedades do subintervalo inercial. Lilly e outros mostraram que as constantes no modelo podem ser obtidas sobre esta base (Ferziger, 1984). Infelizmente não se pode sempre assegurar, em computação, que o corte entre pequenas e grandes escalas esteja no subintervalo inercial. Assim, necessita-se ser prudente, quando adotar os resultados desta técnica. De fato, inúmeros trabalhos tem relatado a necessidade de modificar constantes dos modelos SGS, para obter bons resultados (Lesieur & Metais, 1996; Piomelli, 1999).

Atualmente, pode-se já simular diretamente escoamentos turbulentos em baixo número de Reynolds e em geometrias simples. Nestes casos os resultados podem ser considerados como realizações do campo de escoamento físico e são uma interessante e importante complementação dos resultados de laboratório. Em particular, os resultados computacionais fornecem todos os três componentes de velocidade e a pressão, para um grande número de pontos espaciais, em um espaço de tempo relativamente pequeno. O progresso das técnicas experimentais de medida tem também permitido que dados experimentais sejam agora utilizados na avaliação dos modelos submalha (Meneveau & Katz, 2000). Esta alternativa

tem permitido o estudo dos escoamento em alto número de Reynolds, complementando os dados da simulação direta. Embora a restrição da informação parcial, desde que somente um subconjunto de parâmetros relevantes pode ser medido, continue limitando o emprego dos dados experimentais, a importância do emprego deste tipo de informação, na avaliação das tensões submalha, tem aumentado (Meneveau & Katz, 2000).

A prática comum na avaliação da capacidade de um modelo para tensão de escala submalha é comparar os resultados de uma simulação, na qual esse modelo foi empregado com dados disponíveis. Estes podem ser de simulação direta ou de experimentos. Na literatura, esta avaliação recebeu o nome de teste a posteriori (Piomelli et al., 1988; Meneveau & Katz, 2000). O modelo é avaliado somente após ter sido implementado na simulação de um escoamento. Na verdade os testes a posteriori devem ser considerados como sendo o último teste da capacidade do modelo. Deve-se registrar, entretanto, que devido a natureza integrada dos resultados (método numérico, resolução, modelo, etc.), este tipo de avaliação não fornece muita informação detalhada sobre a física do modelo e as razões que o levaram a trabalhar bem ou não.

Uma abordagem complementar e talvez mais fundamental baseia-se na comparação direta da tensão submalha real com a tensão submalha modelada. Tendo-se uma solução do escoamento, pode-se proceder da mesma forma como um experimentalista procederia. O campo calculado pode ser filtrado, para dar sua componente de grandes escalas. Já os componentes de pequenas escalas são obtidos por diferença. Calcula-se então os termos, que necessitam ser modelados, e, do campo de grandes escalas, pode-se calcular também o que o modelo prediz ser estes termos. A tensão submalha real é avaliada sob sua própria definição. A comparação direta entre o modelo e o valor exato é então possível. Tal comparação requer dados a alta resolução espacial, de modo que se possa resolver o intervalo de escalas submalha. Este teste é conhecido como teste a priori (Piomelli et al., 1988; Meneveau & Katz, 2000). Nesta abordagem de avaliação dos modelos nenhuma simulação de grandes escalas é realizada, sendo os dados utilizados oriundos de simulações diretas. Infelizmente, estas ainda estão restritas a baixo número de Reynolds e geometria simples.

É possível um modelo realizar pobremente os testes a priori e ter um

desempenho razoavelmente bom na simulação verdadeira. Contudo, um comportamento deficiente do modelo nos testes a priori é um claro sinal de preocupações e que o seu emprego deve ser cuidadoso.

### **D.2.9. Conclusões Sobre Modelagem SGS**

Dos argumentos discutidos acima, pode-se estabelecer as seguintes conclusões sobre o problema do fechamento de turbulência, em relação a simulação de grandes escalas:

- Embora sejam inadequados em alguns aspectos, os modelos de viscosidade turbulenta podem ser usados em simulação de escoamentos turbulentos homogêneos. Contudo, estes modelos enfrentam algumas dificuldades em escoamentos não homogêneos, especialmente aqueles nos quais as fronteiras sólidas são importantes;
- O mais popular modelo submalha para o propósito de aplicação de engenharia é certamente o modelo de Smagorinsky;
- O modelo de função estruturada é um modelo promissor, mas problemas de generalidade necessitam ser resolvidos;
- Os modelos de similaridade e misto e o procedimento dinâmico utilizam o conceito de invariância de escala;
- Os coeficientes dos modelos são dependentes das escalas de turbulência e de efeitos complexos (rápida distorção);
- O procedimento dinâmico de avaliação local dos coeficientes do modelo submalha base torna os referidos coeficientes funções do tempo e do espaço;
- O procedimento dinâmico mostrou ser uma poderosa ferramenta de apoio a modelagem submalha. Entretanto, o problema da brusca variação da viscosidade turbulenta, a qual, por vezes, assume alto valores negativos, criando instabilidade numérica, levou ao uso do conceito de média nas direções homogêneas;
- O conceito de média nas direções homogêneas geralmente adotado no procedimento dinâmico é inconsistente com a filosofia inicial do método;
- Simulação direta é o melhor meio de testar modelos submalha e determinar a priori os seus parâmetros. A teoria homogênea e a isotrópica podem

também ser proveitosamente utilizadas com este fim;

- Os testes a priori tem mostrado uma certa superioridade do modelo de similaridade, quando acoplado com outros modelos dissipativos (modelo misto);
- Modelos de turbulência de uma equação, apesar da esperança de trazer melhoramentos a técnica de modelagem submalha, relativo aos modelos algébricos de viscosidade, não tem atendido a esta expectativa;
- Modelos de turbulência duas equações e de tensão de Reynolds de escala submalha são somente uma promessa, desde que as hipóteses de modelagem necessitam ser diferentes daquelas usadas na modelagem com média de Reynolds;
- O estudo e contínuo desenvolvimento dos modelos submalha requerem dados de escoamentos em alto número de Reynolds e conseqüentemente uma grande integração da parte experimental com a pesquisa teórica e numérica em turbulência;
- Simulações diretas e simulações de grandes escalas podem ser usadas na construção de modelos com média de Reynolds mais realistas. Esta é uma das áreas onde ambos os tipos de simulação, direta e LES, têm um papel fundamental.