4
Simulação de Grandes Escalas

4.1.
Introdução

As leis de escala, aplicadas a domínios particulares, é indiscutivelmente a grande pérola do conhecimento do fenômeno turbulência. As escalas de turbulência caracterizam-se pelo largo espectro que as contém. Da análise dimensional, conclui-se que quanto maior o número de Reynolds maior é o intervalo de definição das escalas do escoamento turbulento. Sendo todo escoamento turbulento transiente e tridimensional, a conseqüência imediata é a restrição de solução numérica direta, das equações de Navier-Stokes, somente para casos com baixo número de Reynolds e geometria simples.

O grande atrativo da simulação direta é eliminar a necessidade de modelos. Contudo, as exigências de resolução temporal e espacial tem impedido o seu uso na maioria dos casos de interesse prático. Além disso, geralmente as informações mais relevantes são as contidas nas maiores escalas do escoamento, aquelas que controlam a difusão turbulenta da quantidade de movimento e de calor. A simulação numérica de grandes escalas (LES) é uma alternativa com menor esforço computacional. Nesta metodologia de simulação, a dinâmica das estruturas das grandes escalas são calculadas, enquanto o efeito da turbulência das pequenas escalas é modelado, usando os chamados modelos submalha (SGS, por '*Sub-grid scales*').

A simulação numérica de grandes escalas repousa entre os extremos da simulação direta, onde todas as flutuações são resolvidas e nenhum modelo é exigido, e a clássica abordagem de Reynolds, onde somente valores médios são calculados e todas as flutuações modeladas. A principal vantagem da simulação das grandes escalas é permitir o acesso às estruturas de vorticidade não estacionária e, portanto, às flutuações que essas estruturas produzem, enquanto os modelos com média de Reynolds somente fornecem valores médios. Com um método tipo LES, somente as estruturas de mais alta freqüência serão modeladas.

A primeira aplicação, desta nova filosofia de simulação dos escoamentos turbulentos, foi realizada pelos meteorologistas. Tão logo os recursos computacionais permitiram, estes tentaram fazer simulações globais do estado atmosférico, por longos intervalos de tempo. Foi Smagorinsky (1963) que, utilizando-se das idéias de decomposição de escalas de Reynolds, propôs esta nova filosofia de modelagem e realizou a primeira tentativa tridimensional de simular o clima. Decompõem-se agora os campos turbulentos em componentes de alta freqüência e baixa freqüência, utilizando-se um processo de filtragem. É o comprimento característico do filtro, baseado na malha de discretização, que irá fazer a separação, determinando a freqüência de corte (Lesieur & Metais, 1996; Piomelli 1999; e Meneveau & Katz, 2000).

Aliado ao considerável esforço computacional exigido por esta abordagem, há ainda a necessidade de se modelar o efeito do grande número de pequenos turbilhões, ou turbilhões submalha. Isto deu origem aos chamados modelos de escala submalha (SGS). Apresentar e discutir aspectos dos modelos SGS é o objetivo deste capítulo.

4.2. Fundamentos da Simulação de Grandes Escalas

Sabe-se que os maiores turbilhões dominam a física de qualquer escoamento turbulento, sendo os responsáveis pelo transporte da maior parte da quantidade de movimento e energia, especialmente nas regiões de recirculação e nos escoamentos cisalhantes livres. As principais diferenças entre os maiores e menores turbilhões são relacionadas abaixo:

- Os grandes turbilhões interagem fortemente com o escoamento médio. Os menores vórtices são gerados principalmente por iterações não lineares entre os grandes turbilhões;
- Os grandes turbilhões contém a maior parte da energia;
- A maior parte do transporte de massa, quantidade de movimento linear, energia, e, em escoamentos contendo mais de uma espécie, concentração é devida aos grandes turbilhões. Os menores turbilhões dissipam flutuações destas quantidades, mas afetam as propriedades médias somente levemente;

- A estrutura dos grandes turbilhões é muito fortemente dependente da geometria e natureza do escoamento. Eles são usualmente vorticosos, mas sua forma e intensidade são função do escoamento. Os menores turbilhões, por outro lado, são muito mais universais do que as grandes escalas;
- Devido a forte dependência da geometria, as grandes escalas são altamente anisotrópicas. Os menores turbilhões são quase isotrópicos e, consequentemente, universais;
- As escalas de tempo dos grandes turbilhões aproximam-se da escala de tempo do escoamento médio. Para o escoamento sobre um corpo, a escala dos grandes turbilhões é aproximadamente a dimensão do corpo dividido pela velocidade da corrente livre. Já os menores turbilhões são criados e destruídos muito mais rapidamente.

Uma conseqüência importante destas propriedades é que é muito mais difícil modelar as grandes escalas que os menores turbilhões. Como os grandes turbilhões variam muito de escoamento para escoamento, não é possível obter um modelo, para estes turbilhões, que seja universal. Há, contudo, uma forte esperança que se possa obter um modelo útil, para as pequenas escalas.

Estas observações levam ao conceito de simulação de grandes escalas (LES). Nesta abordagem, as estruturas de grandes escalas são calculadas explicitamente e as pequenas modeladas. Este método teria então inúmeras vantagens sobre métodos nos quais todos os turbilhões são modelados.

Infelizmente, nem todas as premissas acima estão presentes em todos os escoamentos turbulentos. Estas parecem manter-se em escoamentos turbulentos homogêneos e em escoamentos cisalhantes livres. Já em escoamentos limitados por paredes, as estruturas, responsáveis pela maior parte do transporte de quantidades de movimento e, presumivelmente, o transporte de outras propriedades, podem ser muito pequenas, especialmente na região próxima a fronteira sólida.

Se ao contrário, todas as sentenças colocadas acima forem aceitas, segue que a simulação de grandes escalas deve ter muitas vantagens sobre os métodos de tensões de Reynolds, isto é, métodos com média no tempo. A mais significativa vantagem é o cálculo explícito da maior parte do transporte verdadeiro de massa, quantidade de movimento, energia e espécies, enquanto as porções destes fluxos modeladas são muito menores, que as modeladas nas equações médias de Reynolds. Consequentemente, todos os resultados devem ser menos sensíveis as imperfeições do modelo nesta abordagem que em qualquer outra. A esperança de se encontrar um modelo largamente aplicável é muito maior.

A principal desvantagem da simulação de grandes escalas, relativa aos métodos de Reynolds, é que os cálculos são necessariamente tridimensionais e transientes. Isto significa um custo maior. De fato, o enorme tempo, associado a necessidade do uso de computadores de alto desempenho, faz o custo da simulação LES ser geralmente muito alta, exceto para escoamentos simples.

A metodologia da simulação de grandes escalas consiste de três passos distintos. Inicialmente uma operação de filtragem é realizada sobre as equações de Navier-Stokes, a fim de remover as menores escalas espaciais. As equações resultantes, que descrevem a evolução espaço temporal dos maiores turbilhões, contém termos envolvendo o campo das pequenas escalas, os quais não são calculados explicitamente. Estes termos descrevem os efeitos das escalas não resolvidas sobre o campo resolvido e, devido a sua semelhança com as tensões de Reynolds nas equações médias de Reynolds, são chamados tensões de Reynolds de escala submalha ou simplesmente tensões submalha. Em princípio, as tensões submalha dependem sobre a precisa definição da operação de filtragem e os parâmetros que a caracterizam. A fim de que as equações LES resultantes tenham a mesma estrutura que as equações de Navier-Stokes, as operações de filtragem e de diferenciação devem comutar. A seguir, as tensões submalha, as quais são desconhecidas, desde que elas dependem das escalas não resolvidas, devem ser substituídas por algum modelo. Por fim, realiza-se a solução numérica das equações fechadas para o campo das grandes escalas. A malha deve ser suficientemente fina para resolver as menores escalas dos turbilhões não filtrados, mas muito maior que a escala de Kolmogorov.

4.3. Equações de Governo

A discussão será limitada a escoamentos de fluidos Newtonianos, incompressíveis e com viscosidade molecular constante, governados pelas equações de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i} + \upsilon \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{4.1}$$

As quais devem ser resolvidas juntamente com a equação da continuidade:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{4.2}$$

Os termos convectivos das equações 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 for alto o suficiente para não permitir a resolução precisa das escalas de dissipação (altos números de onda), há um acúmulo de energia nas menores escalas calculadas, até que a dissipação e a taxa de transferência de energia alcancem o equilíbrio. O excesso de energia, acumulada numericamente na escala de malha e que não é transferida, como no efeito cascata, às escalas de Kolmogorov, gera uma rápida transferência das grandes escalas (Rogallo & Moin, 1984). Uma das mais importantes modificações a ser introduzida nas equações de Navier-Stokes, é criar um mecanismo de remoção de energia das escalas calculadas, que represente, tão próximo quanto possível, o processo físico da cascata de energia.

Por outro lado, os valores, em pontos nodais de uma simulação, representam variáveis do escoamento em um sentido médio. Os operadores de discretização removem escalas menores que o tamanho da malha. Consequentemente a abordagem direta é limitada a escoamentos completamente resolvíveis, onde a média, a nível de escala de malha, não causa nenhuma perda de informação e o valor final independe do operador de discretização. 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. O primeiro passo em uma simulação de grandes escalas é consequentemente definir as variáveis que podem ser resolvidas (campo resolvido) e suas equações de governo.

O campo das grandes escalas ou o campo resolvido é essencialmente uma média local do campo completo, sendo melhor definido por meio da função filtro ou peso. Utilizando, por conveniência, uma notação unidimensional, embora a generalização tridimensional seja direta, a operação de filtragem sobre uma função *f(x,t),* definida no domínio (-∞,∞), com um filtro de banda Δ constante, é definida por (Rogallo & Moin, 1984; Hussain, 1998; Piomelli 1999; e Meneveau & Katz, 2000):

$$\overline{f}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x-\eta,t)\ f(\eta,t)\ d\eta \tag{4.3}$$

onde *G* é uma função com domínio (-∞,∞), dotada das seguintes propriedades (Ghosal & Moin, 1995):

(a) $G(-x,t)=G(x,t);$ (4.4)

(b) $\int_{-\infty}^{\infty} G(x)\ dx = 1;$

(c) $G(x)\rightarrow 0$ quando $|x|\rightarrow\infty;$

(d) $\int_{-\infty}^{\infty} G(x)\ x^n\ dx$ existe para todo $n \geq 0$.

A parte filtrada da função, $\overline{f}\ (x,t)$, é a variável para a qual será derivada a equação de governo. Na verdade, ao se realizar a operação de filtragem, divide-se o campo do escoamento turbulento em grandes estruturas ou grandes escalas, parte filtrada da função, $\overline{f}\ (x,t)$, e pequenas estruturas, $f'(x,t)$, que correspondem as escalas submalha (SGS). Deste modo, presume-se que uma escala de comprimento de corte Δ pode ser escolhida, de tal modo que todas as flutuações nas escalas maiores que Δ serão resolvidas e as escalas remanescentes constituem as flutuações das menores escalas. Portanto, o subintervalo de filtragem ou a banda de filtro, Δ, deve estar entre a escala de comprimento integral (*L*) e a escala de dissipação de Kolmogorov (l_d). Os efeitos das flutuações das menores escalas sobre o campo resolvido, os chamados grandes turbilhões, deverão ser modelados. Tipicamente, Δ deveria ser uma escala de comprimento característico das menores estruturas de interesse no escoamento. Deste modo, a função *f(x, t)* pode ser escrita como:

$$f(x,t) = \overline{f}(x,t) + f'(x,t) \tag{4.5}$$

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. O Apêndice D apresenta um estudo dos principais filtros utilizados em simulação de grandes escalas.

Ao aplicar-se então o filtro as equações de Navier-Stokes (eq. 4.1) e a equação da continuidade (eq. 4.2), as equações de governo das escalas resolvidas, para escoamento incompressível de fluido Newtoniano, podem ser finalmente colocadas na forma:

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{u_j}\,\overline{u_i})}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \upsilon \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}) \tag{4.6}$$

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} = 0 \tag{4.7}$$

onde:

$$\tau_{ij} = \left(\overline{u_i u_j} - \overline{u_i}\,\overline{u_j}\right) \tag{4.8}$$

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 quatro equações e quatro variáveis, acrescida do tensor τ_{ij}. Trata-se, portanto, de um sistema de equações aberto, com mais incógnitas que equações. Os tensores tem momentos de segunda ordem. É sempre possível gerar equações de transporte para estes momentos, porém este procedimento acarreta o aparecimento de momentos de terceira ordem e assim sucessivamente. É o clássico problema de fechamento da turbulência. As equações devem ser fechadas pela especificação do fluxo como função do campo resolvido. Como na solução numérica de escoamentos incompressíveis não é necessário modelar explicitamente o traço do tensor submalha τ_{ij} $(1/3\,\tau_{kk})$, pois este termo pode ser combinado com a pressão, aos modelos cabe somente reproduzir a parte desviatória do tensor submalha $(\tau_{ij} - 1/3\,\tau_{kk})$. O modelo submalha de Smagorinsky, o qual foi utilizado neste tarbalho, é apresentado no próximo item. Outros modelos submalha de fechamento de turbulência constam do Apêndice D.

4.4.
Modelos de Escalas Submalha
Modelo de Smagorinsky

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

Para a metodologia de simulação de grandes escalas, o modelo submalha de viscosidade turbulenta significa assumir a parte desviatória do tensor de tensão de Reynolds de escala submalha ser diretamente proporcional ao tensor da taxa de deformação das escalas resolvidas:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3}\tau_{kk} = 2\,\upsilon_t\,\overline{S_{ij}} = \upsilon_t\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right) \tag{4.9}$$

O problema do fechamento das equações é então reduzido a determinação da viscosidade turbulenta escalar, υ_t como função das variáveis do campo resolvido.

A viscosidade turbulenta submalha, υ_t, no modelo de Smagorinsky é obtida sobre a hipótese que as pequenas escalas de turbulência estão localmente em equilíbrio com respeito a produção e dissipação da energia cinética turbulenta submalha, conforme vastamente documentado na literatura (Piomelle, 1999; Hartel e Kleiser, 1998). Assume-se ainda que a viscosidade turbulenta é proporcional a escala de comprimento submalha característica, Δ, e a escala de velocidade submalha característica, $\kappa_{SGS}^{1/2}$ (Meneaveu & Kantz, 2000). Deste modo obtém-se o modelo algébrico para a viscosidade turbulenta:

$$\upsilon_t = (C_s\,\Delta)^2 \left| \overline{S} \right| \tag{4.10}$$

onde $\left| \overline{S} \right| = \sqrt{2\,\overline{S_{ij}}\;\overline{S_{ij}}}$, C_S, o chamado coeficiente de Smagorinsky, é constante e Δ é a escala de comprimento associada ao filtro e na prática é assumida como sendo o tamanho do espaçamento da malha *h* (Piomelle, 1999; Rodi et al., 1997). A viscosidade turbulenta υ_t tem a dimensão da viscosidade cinemática e $\overline{S_{ij}}$ é taxa de deformação do campo resolvido de velocidade.

Este é o mais popular e antigo modelo de turbulência de escala submalha (SGS). Foi primeiramente proposto por Smagorinsky em 1963 e, em conseqüência, é conhecido na literatura como modelo de Smagorinsky (Silveira Neto, 1998).

O parâmetro C_s pode ser determinado do decaimento da turbulência homogênea isentrópica, se o número de onda de corte, $k_c = \pi / \Delta$, estiver situado dentro do intervalo inercial da lei de Kolmogorov (Lesieur & Metais, 1996; Piomelle, 1999). O valor de C_S, neste caso, está entre 0,16 e 0,23 (Meneveau & Kantz, 2000; Lesieur & Metais, 1996; Piomelle, 1999). Contudo, na prática, verificou-se que estes valores são excessivos (Silvetrini, 2000; Hartel & Kleiser, 1998). O valor mais comumente utilizado nas simulações numéricas tem sido C_s=0,1 (Lesieur & Metais, 1996; Hartel & Kleiser, 1998).

Quando a malha tem espaçamento diferente para cada direção e o tamanho da malha é igual a banda do filtro, a escala de comprimento característico, Δ, é geralmente definida como sendo a raiz cúbica do volume de malha, ou seja

(Meneveau & Kantz, 2000; Scmhidt & Thiele, 2002; Piomelli, 1999):

$$\Delta = \left(\Delta_x \Delta_y \Delta_z\right)^{1/3} \tag{4.11}$$

Este comprimento característico foi primeiro proposto por Deardoff, no início da década de setenta (Meneaveu & Kantz, 2000). Entretanto, Scotti et al. (1993) mostraram que esta expressão é somente válida para malhas isentrópicas ou, ao menos, aproximadamente isentrópicas. Já para filtros direcionais fortemente anisotrópicos ($\Delta_x >> \Delta_y \approx \Delta_z$) os autores mostraram que a banda do filtro Δ do modelo de Smagorinsk deveria ser corrigida com a função $f(a_1, a_2)$, onde $a_1 = \Delta_x / \Delta_z$, $a_2 = \Delta_y / \Delta_z$, isto é,

$$\Delta = \left(\Delta_x \Delta_y \Delta_z\right)^{1/3} f(a_1, a_2) \tag{4.12}$$

onde

$$f(a_1, a_2) \cong \mathbf{cosh} \left\{ \left(\frac{4}{27} \right) \left[(\mathbf{ln}\ a_1)^2 - (\mathbf{ln}\ a_1\ \mathbf{ln}\ a_2) + (\mathbf{ln}\ a_2)^2 \right] \right\}^{1/2} \tag{4.13}$$

Algumas outras formas de se determinar a escala de comprimento característico Δ tem sido reportadas na literatura. Entre estas pode-se citar (Silvestrini, 2000; Ferziger, 1984):

$$\Delta = \max\left(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z\right) \tag{4.14}$$

$$\Delta = \min\left(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z\right) \tag{4.15}$$

$$\Delta = \left(\Delta_x^2 + \Delta_y^2 + \Delta_z^2\right)^{1/2} \tag{4.16}$$

Apesar de ser largamente usado e do seu relativo sucesso, o modelo de Smagorinsky tem significativas desvantagens. No início da década de 80, alguns autores mostraram que a expressão originalmente proposta só é correta se a escala integral da turbulência (L) é menor que Δ. Uma vez que LES não foi construído sobre essa hipótese, verifica-se a incoerência da expressão proposta (Ferziger, 1984; Rogallo & Moin, 1984).

Os modelos de viscosidade turbulenta, para simulação de grandes escalas, tem obtido bons resultados em escoamentos homogêneos. Em particular, em escoamentos homogêneos sem significativas deformações, tem-se predito muito bem diversas das quantidades estatísticas. Já as estatísticas sensíveis as pequenas escalas não são preditas corretamente. Em escoamentos homogêneos com deformação ou cisalhamento, há evidências que o fluxo de energia pode ser invertido. Neste caso, o fluxo líquido de energia é das pequenas para as grandes escalas. Em tal situação, o modelo não deveria dissipar energia das grandes escalas. Os modelos de viscosidade turbulenta, os quais dissipam energia das grandes escalas, não podem, portanto, predizer este comportamento.

Modelos de viscosidade turbulenta são incapazes de manipular outras classes de escoamento. As propriedades físicas da turbulência submalha não são corretamente capturados por esses modelos. A comparação da tensão de Reynolds submalha do modelo de Smagorinsky, levantada a partir de dados de simulação direta, com a sua distribuição real mostra significantes diferenças (Meneveau & Kantz, 2000). Em transição de escoamentos, deve-se esperar que muita energia esteja nas grandes escalas, isto é, as menores escalas não estão em equilíbrio com as grandes escalas e o argumento de produção igual a dissipação não se sustenta. Em regiões de turbulência anisotrópica, a qual requer filtro anisotrópico, a escolha do comprimento de escala característico, como foi visto acima, não é imediata.

O coeficiente de Smagorinsky C_S é na verdade dependente do escoamento e deveria anular-se nas fronteiras sólidas, nas regiões laminares dos escoamentos em transição e quando a escala do filtro se aproximasse da escala de Kolmogorov (Liu et al, 1999; Piomelle, 1999). O modelo é muito dissipativo e tem sido freqüentemente utilizado com funções empíricas de amortecimento, nas regiões de parede. Esta modificação algumas vezes é difícil de ser aplicada a geometrias complexas. A presença de estratificação, cisalhamento, rotação ou quando a turbulência sofre rápida distorção, afastando-se da condição de equilíbrio, afetam a dissipação submalha, tornando o coeficiente do modelo inapropriado para esses escoamentos (Meneaveu & Katz, 2000). Devido ao grande esforço computacional exigido pela técnica de simulação de grandes escalas, o ajuste do coeficiente de Smagorinsky, à cada situação particular, torna-se excessivamente dispendioso ou mesmo inviável, dependendo do tipo de escoamento, do método numérico e da malha utilizada.

Como todo modelo de viscosidade turbulenta, o modelo de Smagorinsky assume erroneamente um alinhamento entre tensão submalha e o tensor de deformação de malha. Este problema é também familiar a modelagem com média de Reynolds, embora na simulação de grandes escalas o esforço de modelagem se concentre somente nas menores escalas e seja por isso menor.

Apesar dos óbices apontados, o modelo de Smagorinsky tornou-se o modelo mais popular em simulação de grandes escalas (Rodi et al., 1997) e tem sido aplicado a muitas situações, talvez pela sua simplicidade, por ser robusto numericamente e ser livre de instabilidades numéricas.