

3

Modelagem da Turbulência

Mencionou-se no Capítulo 1 que as duas principais abordagens para simulações de escoamentos turbulentos denominam-se RANS (Reynolds Average Navier-Stokes) e LES (Large Eddy Simulation). Estas metodologias possuem origens completamente diversas, e são obtidas através de filtragens que apresentam diferenças fundamentais: enquanto na metodologia RANS a filtragem é estatística ou temporal, na metodologia LES, a mesma é feita espacialmente. Isso torna muito difícil a tarefa de mesclar as duas técnicas de forma a tirar partido das vantagens que cada uma delas propicia em regimes de escoamento distintos. No entanto, apesar das filtragens serem fundamentalmente diferentes, os termos delas derivados apresentam muitas semelhanças e são comumente modelados como um termo difusivo, usando-se a hipótese de Boussinesq.

Para que as duas metodologias possam ser empregadas em conjunto e de forma transparente, é importante reconhecer que os respectivos processos de filtragem são, na verdade, casos particulares de um processo de filtragem mais geral. Aliás, o próprio esquema de discretização espacial e temporal utilizado, sem o qual não é possível resolver numericamente as equações de conservação, pode ser descrito como um processo de filtragem duplo, onde o passo de tempo empregado está relacionado a uma largura de banda do filtro temporal, e o espaçamento de malha, a uma largura de filtro espacial. Cumpre notar que, embora para a Técnica de Volumes Finitos isso seja evidente, pode-se mostrar que qualquer que seja o método de discretização adotado, este sempre pode ser interpretado como um processo de filtragem duplo, isto é, temporal e espacial.

Com esse ponto de partida, comum às metodologias RANS e LES, fica mais fácil entender a origem a partir da qual estas começam a se diferenciar, abrindo possibilidades para uma maior integração entre as mesmas em simulações práticas de escoamentos de interesse industriais.

Na primeira parte deste capítulo, examina-se em detalhe esse processo de filtragem e as origens das duas metodologias, situando-as num contexto

geral das simulações de escoamentos turbulentos.

No restante do capítulo, expõem-se as conseqüências diretas desse processo de filtragem e discretização, a saber: o erro de comutatividade e o tensor turbulento (tensor sub-malha no caso do LES, e tensor de Reynolds no caso do RANS).

3.1

Processo Geral de Filtragem das Equações de Transporte

O ponto de partida para qualquer simulação computacional é a descrição matemática das leis físicas que regem o movimento do fluido, através de equações diferenciais. As equações de conservação que governam o movimento do fluido são as equações de Navier-Stokes e continuidade. No caso de escoamentos incompressíveis na ausência de forças de corpo, estas podem ser descritas por:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p_T + \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3-1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3-1b)$$

onde t é o tempo, \mathbf{u} é o vetor velocidade, p_T , a pressão termodinâmica, ρ , a massa específica do fluido, e μ a viscosidade absoluta ou dinâmica.

Como em um escoamento de fluido incompressível, a massa específica ρ é constante, esta pode ser incorporada à pressão, formando uma pressão modificada $p = p_T/\rho$, e à viscosidade dinâmica, formando a viscosidade cinemática $\nu = \mu/\rho$. Assim, as equações de Navier-Stokes para um escoamento incompressível podem ser escritas como:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3-2a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3-2b)$$

que é, na verdade, um sistema de quatro equações a quatro incógnitas, dependente de um parâmetro ν e de escalas temporais e espaciais. Através de uma simples adimensionalização na qual se utiliza uma velocidade característica U_0 e uma distância característica D , pode-se mostrar que as Eqs. 3-2 dependem somente do número de Reynolds $Re = DU_0/\nu$. Este parâmetro dita o regime de escoamento do fluido, uma vez que é proporcional à razão entre as importâncias das forças inerciais em relação às

forças viscosas. Como o termo inercial da Eq. 3-2a é não-linear, quanto maior sua importância, mais intensa é a geração de novas estruturas vorticiais, que operam em novos modos (frequências espaciais), e que são transportados pelo próprio escoamento. Essa geração intensa de novas estruturas, de forma a preencher e alargar o espectro de frequências espacial, é uma das características fundamentais de um escoamento turbulento, sendo fácil entender que quanto maior o número de Reynolds, maior será a importância da turbulência, mais largo e contínuo será o espectro, e mais rápidos serão os processos de misturas.

Somente para alguns poucos casos particulares as Eqs. 3-2 possuem solução analítica. Logo, para que estas possam ser de utilidade na previsão numérica de escoamentos mais gerais, alguma forma de mapeamento de um espaço contínuo para um espaço discreto deve ser feito. O sistema dinâmico discreto resultante deste mapeamento deve representar da melhor maneira possível o sistema dinâmico original, tal qual descrito pelas Eqs. 3-2.

Estima-se que o número de graus de liberdade necessário para representar fielmente todas as estruturas de um escoamento tridimensional turbulento, sem praticamente nenhuma perda de informação, é da ordem de $Re^{9/4}$. No caso freqüente de não ser possível representar todas as estruturas, diz-se que a transformação do sistema contínuo no discreto provoca perda de informações.

Essa perda de informações pelo processo de discretização pode também ser interpretada como um processo de filtragem e, de fato, qualquer esquema de discretização pode ser escrito como um operador filtro, conforme será mostrado em particular para o caso do Método dos Volumes Finitos, empregado no presente trabalho.

Um processo geral de filtragem pode ser definido por:

$$\bar{a}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g[\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t', \Delta(\mathbf{x}, t), \Theta(\mathbf{x}, t)] a(\mathbf{x}', t') d\mathbf{x}' dt', \quad (3-3)$$

onde $a = a(\mathbf{x}, t)$ é a variável original, \bar{a} é a variável filtrada, e os parâmetros $\Delta(\mathbf{x}, t)$ e $\Theta(\mathbf{x}, t)$ controlam respectivamente as larguras de filtro espaciais e temporais do filtro descrito pela função g . Para simplificar a notação, o símbolo de integral aqui representa integral nas três dimensões espaciais e na direção temporal.

Note que este é o caso mais geral do processo de filtragem, onde ambas as larguras de filtro (bandas de filtragem) dependem da posição e do tempo. Muitos casos de interesse prático envolvem largura de filtro espacial que só

depende de posição ($\Delta(\mathbf{x}, t) = \Delta(\mathbf{x})$) e largura de filtro temporal constante, $\Theta(\mathbf{x}, t) = \Theta$, ou que só depende do instante de tempo, $\Theta(\mathbf{x}, t) = \Theta(t)$.

Convém notar que quando aplicado a equação de N-S, deve-se observar se o operador filtragem comuta com os operadores derivadas espaciais – divergente, gradiente e laplaciano. Assim, um processo de filtragem cuja largura do filtro dependa da posição, $\Delta = \Delta(\mathbf{x})$, não comuta, a princípio, com os operadores de derivada espacial. Atenção especial deve ser dada ao termo advectivo, no qual a não-linearidade dá origem a um erro de comutação ϵ_{com} definido como

$$\epsilon_{\text{com}} = \overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})} - \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u} \mathbf{u}}), \quad (3-4)$$

o qual, de um modo geral, é não-nulo.

A importância deste conceito geral de filtragem advém de sua característica unificadora, uma vez que qualquer abordagem numérica que se empregue ou mesmo qualquer abordagem da turbulência que se utilize, pode ser considerada como uma forma particular da aplicação da Eq. 3-3 às equações de Navier-Stokes, Eqs. (3-2), bastando para isso a escolha apropriada da função g e de sua dependência com relação a $\Delta(\mathbf{x}, t)$ e $\Theta(\mathbf{x}, t)$.

3.2 Processo de Discretização

Como mencionado, qualquer processo de discretização pode ser escrito como uma integral tal qual a Eq. 3-3. O método clássico de Diferenças Finitas consiste em distribuir pontos pelo domínio computacional e aproximar as derivadas das Eqs. 3-2 em cada um dos pontos nodais i , utilizando expansões em série de Taylor. Isso corresponde à aplicação de um filtro (Eq. 3-3) nas equações de N-S (Eqs. 3-2), cuja função g é igual a função δ (delta de Kroneker) centrada no ponto nodal i . Já no método de Elementos Finitos, a função g é prescrita como sendo igual ao perfil interpolar para estimar a variável dependente a .

O Método dos Volumes Finitos, foco do presente trabalho, consiste em particionar o domínio computacional em N volumes de controles V_{ci} com i variando de 1 a N , e posterior integração das Eqs. 3-2 em cada um desses volumes de controle. Isso corresponde à aplicação de um filtro (Eq. 3-3), nas

equações de N-S, (Eqs. 3-2), cuja função g é dada por:

$$g = \begin{cases} \frac{1}{V_{ci}}, & \text{se } \mathbf{x}' \in V_{ci} \text{ ,} \\ 0, & \text{caso contrário .} \end{cases} \quad (3-5)$$

Obtém-se assim um conjunto de N equações para cada uma das quatro equações diferenciais parciais originais. Uma vez que a cada volume de controle é associada uma velocidade \mathbf{u} (três componentes) e uma pressão p , o sistema de equações, na sua versão discreta, está fechado.

3.3

Equações de Navier-Stokes Médias – RANS

A abordagem da turbulência através de uma metodologia de média de Reynolds (RANS) envolve a aplicação de uma integral no tempo, conhecida por média de Reynolds, dada por

$$\bar{a} = \lim_{\Delta T \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta T} \int_{-\Delta T/2}^{\Delta T/2} a(\mathbf{x}, t) dt, \quad (3-6)$$

nas equações de N-S, Eqs. 3-2, obtendo-se:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{p} + \nu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}}, \quad (3-7a)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0. \quad (3-7b)$$

Note-se que, como o operador média de Reynolds independe da posição, não há erro de comutação entre este operador e o de divergência no termo advectivo, isto é:

$$\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})} - \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}) = \epsilon_{\text{com}} = 0 \quad (3-8)$$

O termo $\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}})$ precisa ser reescrito em função de variáveis disponíveis, $\bar{\mathbf{u}}$. Para tal, a equação pode ser transformada em:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla \bar{p} + \nu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}}, \quad (3-9a)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad (3-9b)$$

onde a nova variável τ , definida como

$$\tau = \overline{\mathbf{u} \mathbf{u}} - \overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}, \quad (3-10)$$

é conhecida como tensor de Reynolds, e precisa ser modelada.

Dentre as várias possíveis modelagens (Pope, 2000), uma das mais conhecidas e utilizadas é o modelo $\kappa - \varepsilon$, que se baseia em equações de transporte para energia cinética turbulenta κ e dissipação de energia cinética turbulenta ε .

Mais importante do que apresentar as diversas possíveis modelagens para o tensor de Reynolds é reconhecer que o processo de filtragem temporal apresentado acima, juntamente com o inevitável processo de discretização, são um caso particular do filtro geral apresentado, no qual a largura de banda temporal $\Theta(\mathbf{x}, t)$ é constante e tende a infinito. O parâmetro de filtragem espacial, $\Delta(\mathbf{x}, t)$, no caso por exemplo de Método de Volumes Finitos (MVF), está associado à espessura da malha, que em geral, varia espacialmente, e, conseqüentemente, introduz um erro de comutatividade no termo advectivo.

À luz desse entendimento do processo de filtragem, nota-se que, em regiões de intensas atividades turbulentas, é provável que a filtragem temporal seja muito mais importante que a espacial. Por outro lado, em regiões laminares do escoamento, onde o valor do tensor de Reynolds resultante é praticamente nulo, não se pode assumir que a filtragem espacial seja insignificante perante a filtragem temporal, uma vez que esta última não produz efeito em regime laminar. Assim, a hipótese contida nas Eqs. 3-8 pode não ser válida em algumas regiões do escoamento, e os problemas trazidos por uma malha não regular, a ser empregada com MVF numa abordagem RANS, são facilmente compreendidos, quando se utiliza o conceito de filtragem mais geral, apresentado acima, na Eq. 3-3.

Enquanto na metodologia RANS comumente se fala de filtragem no tempo, ignorando-se a filtragem espacial, intrínseca ao próprio esquema de discretização, na metodologia LES, faz-se o oposto, ou seja, fala-se apenas de uma filtragem espacial, ignorando-se o fato de que, para avançar as equações de transporte no tempo, utiliza-se alguma forma de integral temporal. Assim, embora seja costume ignorar os efeitos da filtragem espacial no RANS e da temporal no LES, deve-se ter em mente que, na verdade, ambos são casos particulares de um processo mais geral, e, portanto, têm uma raiz comum. Embora possuam comportamentos completamente diferentes em certos aspectos, o que traz certas dificuldades para a utilização conjunta

dessas duas metodologias, a consciência da origem comum das duas pode facilitar futuras implementações nas quais o LES e o RANS convivem harmoniosamente na mesma simulação, cada qual tendo sua influência aumentada na região ou regime para qual foi idealizada e para a qual apresenta maior acurácia ou menor custo computacional. Assim, grandes esforços da comunidade científica têm sido depositados na busca dessa integração entre RANS e LES, objetivando-se a exploração dos pontos fortes de cada uma em diferentes regiões ou regimes do escoamento. Resultante desse esforço é a bem conhecida metodologia de Simulação de Estruturas Desprendidas (DES) de Spalart (1997).

Note-se que não se faz distinção neste trabalho entre o símbolo de filtragem baseada em média de Reynolds utilizado em metodologia RANS e o símbolo de filtragem a ser utilizado na discussão que se segue sobre LES. Isto porque, conforme já enfatizado, ambos são casos particulares de um processo mais geral, não sendo portanto necessário o uso de diferentes notações.

Devido à importância da LES para o presente trabalho, dedicam-se a seções seguintes a um maior detalhamento desta metodologia.

3.4

Simulação de Grandes Escalas – LES

A solução completa das equações de Navier-Stokes para número de Reynolds razoável requer um esforço computacional considerável, uma vez que são necessárias definições espacial e temporal extraordinárias, para que sejam representadas todas as estruturas que de fato influenciam o escoamento. Como quanto maior o número de Reynolds, mais importantes e mais presentes são as pequenas estruturas turbilhonares, a simulação de escoamentos turbulentos exige um grande número de graus de liberdade a ser resolvido.

A fim de tornar tal simulação computacionalmente viável, é necessário selecionar (ou melhor, filtrar) parte desse conjunto de graus de liberdade. Este processo de seleção pode ser feito de diversas maneiras, e de fato, todas as metodologias utilizadas para regimes turbulentos utilizam, de certa forma, alguma de suas variantes.

A abordagem adotada pela LES consiste na aplicação de um filtro, tal qual descrito pela Eq. 3-3, nas equações de Navier-Stokes, o qual seleciona apenas as grandes estruturas turbilhonares como aquelas a serem simuladas.

$$\frac{\overline{\partial \mathbf{u}}}{\partial t} + \overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})} = -\overline{\nabla p} + \nu \overline{\nabla^2 \mathbf{u}}, \quad (3-11a)$$

$$\overline{\nabla \cdot \mathbf{u}} = 0. \quad (3-11b)$$

No entanto, de forma oposta à metodologia RANS, assume-se que a resolução temporal é grande o suficiente comparada com a espacial, de forma que, no processo de filtragem, se possa desprezar as influências temporais e se concentrar nas espaciais. Isso, em termos práticos, significa que o passo de tempo utilizado no avanço temporal das equações discretizadas é pequeno o suficiente para capturar a física das estruturas, e também para que o erro do esquema numérico correspondente seja insignificante.

Sendo o filtro empregado completamente independente de qualquer parâmetro temporal, pode-se assumir, no primeiro termo da Eq. 3-11a, que os operadores filtragem e derivada temporal podem ser comutados. Considera-se ainda que os termos lineares apresentam erros de comutatividade desprezíveis quando comparados ao termo advectivo, não-linear.

Assim, de forma análoga à utilizada na metodologia RANS, necessita-se reescrever o termo $\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})}$ em função de variáveis disponíveis, isto é, $\overline{\mathbf{u}}$. A transformação de $\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})}$ em $\nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}})$ pode ser feita em duas etapas, cada uma das quais introduzindo um erro de comutação (Guerts, 2004):

$$\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})} = \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}) + \epsilon_{\text{com}}, \quad (3-12a)$$

$$\nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot \epsilon_{\Pi}, \quad (3-12b)$$

onde

$$\epsilon_{\text{com}} = \overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})} - \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}) \quad (3-13)$$

é o primeiro erro de comutação oriundo da troca de ordem entre os operadores filtro e derivadas espaciais, e

$$\epsilon_{\Pi} = \overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}} - \overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}, \quad (3-14)$$

é o segundo erro de comutação, devido à troca de ordem entre a filtragem e o operador produto externo.

Embora ambos sejam erros de comutação, por questões de conveniência e tradição, convencionou-se nesse trabalho referir-se a ϵ_{com} como o erro de comutatividade propriamente dito. O segundo deles, ϵ_{Π} , é mais

conhecido na literatura como $\tau_{SGS} = \epsilon_{\mathbf{\Pi}}$, sendo referido como o termo ou tensor Sub-malha, nomenclatura essa adotada também nesse trabalho.

Assim, o termo advectivo da Eq. 3-11 pode ser escrito como:

$$\overline{\nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u})} = \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}) + \epsilon_{\text{com}} + \nabla \cdot \tau_{SGS}. \quad (3-15)$$

Sem entrar ainda no mérito de se a filtragem é independente da malha utilizada (filtragem explícita) ou se é intrínseca à mesma (filtragem implícita), convém observar que, somente se a largura de banda espacial $\Delta(\mathbf{x}, t)$ não depender nem da posição nem do tempo, ou seja, se $\Delta(\mathbf{x}, t) = \Delta$, o primeiro erro de comutação ϵ_{com} torna-se nulo, podendo as equações de transporte ser reescritas como:

$$\frac{\partial \overline{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot \tau_{SGS} = -\nabla \bar{p} + \nu \nabla^2 \overline{\mathbf{u}}, \quad (3-16a)$$

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{u}} = 0, \quad (3-16b)$$

$$\tau_{SGS} = \overline{\mathbf{u} \mathbf{u}} - \overline{\mathbf{u}} \overline{\mathbf{u}}. \quad (3-16c)$$

O cerne da metodologia LES baseia-se no fato de que, para um filtro espacial adequadamente escolhido, a maior parte da energia do escoamento está contida nas grandes escalas, cuja evolução temporal é descrita pela Eq. 3-16 e depende fortemente da geometria e presença de fronteiras. Para tal, é necessário que a largura da filtragem espacial esteja localizada na faixa inercial do espectro de energia, de forma que as grandes escalas a serem resolvidas contenham a maior parte da energia do escoamento. O termo τ_{SGS} , que representa a ação das pequenas escalas nessa evolução, é, normalmente, pequeno, mais isotrópico e menos dependente da geometria, admitindo uma modelagem mais universal.

No entanto, o tamanho das grandes estruturas turbilhonares, ou de outra forma, das estruturas contendo a maior parte da energia, varia de acordo com o regime do escoamento e com a região. Assim, é de se esperar que o tamanho dessas estruturas seja bem menor em regiões próximas a uma parede (na camada limite, por exemplo) ou numa camada cisalhante livre, do que em regiões de esteira, posteriores a um grande descolamento de camada limite de um corpo rombudo. Deste modo, o tamanho das estruturas que contêm, por exemplo, 90% da energia total, pode ser milhares de vezes menor numa camada limite em comparação com uma região de esteira no mesmo escoamento. Para que não haja desperdício de graus de liberdade na esteira, ou escassez na camada limite, é necessário que a largura (banda) do

filtro espacial se adapte às diferentes exigências, o que torna imperativo que Δ varie espacialmente. Por sua vez, isso acarreta um erro de comutatividade ϵ_{com} , o qual pode não ser pequeno, dependendo de quão rápido a largura do filtro varie no espaço.

Talvez seja esta a questão mais crítica da metodologia LES, uma vez que se deve buscar uma solução de compromisso entre minimizar o erro de comutatividade com uma filtragem o mais homogênea possível, ou minimizar o tensor sub-malha com uma filtragem que se adapta espacialmente, mas que, por outro lado, causa grandes erros de comutatividade. Nota-se assim, que a LES exige um cuidado especial no pré-processamento (definição da malha, e filtragem), a fim de manter um balanço adequado entre os erros ϵ_{com} e $\nabla \cdot \tau_{SGS}$. O conhecimento ou a avaliação das ordens de grandeza relativas dos mesmos é também fundamental para que, por exemplo, não se desperdice esforço na modelagem sub-malha, quando esta é obscurecida pelo erro de comutatividade, ou vice-versa.

Obviamente, o que se pretende, idealmente, numa simulação LES, é uma razão entre $\nabla \cdot \tau_{SGS}$ e ϵ_{com} o maior possível, de forma que a modelagem sub-malha seja praticamente a única fonte de erro. Ao mesmo tempo, quanto menores as duas fontes de erro mencionadas, mais próximo de um DNS e, portanto, mais precisa, será a simulação, embora isso normalmente implique num custo computacional (memória e tempo de computação) elevado. Na prática, de nada adianta uma razão grande entre os erros se a modelagem sub-malha ainda não está suficientemente desenvolvida.

Existem basicamente duas vertentes quanto ao processo de filtragem na metodologia LES. A primeira delas, mais purista, prega que o processo de filtragem deve ser independente ou minimamente influenciado pelo processo de discretização. Neste caso, a filtragem é feita explicitamente, com um número de onda de corte comumente bem menor (tipicamente entre 2 e 8 vezes) do que aquele associado a malha local. Isso garante que os erros de discretização sejam bem menores que o termo a ser modelado τ_{SGS} , além de minimizar erros de *aliasing* (Kravchenko e Moin, 1997 e posteriormente Chow e Moin, 2003). Um outro argumento a favor dessa filosofia é de que, para que testes de validação, envolvendo diversas malhas e filtros, sejam conclusivos, é necessária a independência completa entre o espaçamento de malha e a largura do filtro, o que só pode ser obtido com uma filtragem explícita. Assim, do ponto de vista acadêmico, é interessante isolar-se as fontes de erro, de forma a poder validar os diversos modelos propostos.

Uma segunda vertente, mais voltada para as aplicações práticas, prega que não é necessária uma filtragem explícita, uma vez que a própria discre-

tização do domínio já pode ser considerada como um processo de filtragem implícito, evitando assim um esforço computacional extra. Além disso, essa filosofia herda as vantagens intrínsecas do método de discretização, como por exemplo, no caso do Método de Volumes Finitos, a trivial extensão a malhas não-estruturadas. Assim, essa vertente apresenta maior flexibilidade para o tratamento de geometrias mais complexas do que a linha purista, que acaba se restringindo a aplicações mais acadêmicas, de geometrias mais simples. Some-se a isto, o fato de que a filtragem implícita proporciona a menor largura de banda possível, o que minimiza o termo a ser modelado.

Embora cada uma das vertentes acima possua seus próprios argumentos, nesse trabalho será adotada a segunda, baseada numa filtragem implícita, intrínseca à malha. Todos os comentários feitos acima sobre a variação espacial da largura de filtro, e o balanço entre o erro de comutatividade e o tensor sub-malha, continuam válidos. A única observação adicional a ser feita é a de que, nesta abordagem escolhida, a largura do filtro é diretamente determinada pelo espaçamento de malha, portanto onde se mencionava variação espacial abrupta ou suave da banda do filtro, agora se lê, respectivamente, uma malha que varia seu espaçamento muito rapidamente ou que se mantém praticamente uniforme. Assim, uma malha uniforme, sem variação de espaçamento, apresenta erro de comutatividade nulo, e justifica pesados investimentos na melhoria da modelagem sub-malha, enquanto uma malha que se alarga ou se encolhe de forma discreta já começa a apresentar um certo erro de comutação, o qual precisa ser mensurado, a fim de não obscurecer a importância do tensor τ_{SGS} . Reforça-se, no caso em questão, a sensibilidade da metodologia LES à escolha da malha e dos esquemas numéricos.

Nas seções seguintes, são examinados em mais detalhes o erro de comutatividade e o termo sub-malha, devido à grande importância dos mesmos na metodologia LES.

3.5 Erro de Comutatividade

Conforme mencionado anteriormente, para que o erro de comutatividade seja nulo, é necessário que a largura do filtro seja independente da posição e do instante de tempo. Em outras palavras, quando se utiliza filtragem implícita, a malha deve ser uniforme.

Vasilyev e Lund (1997) e Vasilyev et al. (1998) mostraram que, com um esforço computacional extra, pode-se construir filtros de ordem mais alta

que reduzem o erro de comutatividade a níveis tão baixos quanto se queira. Em particular, utilizando-se filtros de ordem M , mostra-se que é possível limitar ϵ_{com} à ordem de Δ^M , o que a princípio é um resultado animador.

Entretanto, Guerts (2004), constata que, quando se utiliza os filtros propostos, o termo sub-malha $\nabla \cdot \tau_{SGS}$ também fica limitado a Δ^M . Em suma, embora os filtros propostos por Vasilyev tragam vantagens por diminuir os erros de comutação, não se observa melhoria da razão entre termo sub-malha e erro de comutatividade, a qual deve ser a maior possível. Assim, a crítica que se faz ao emprego de tais filtros é a de que a maior precisão apresentada é devida ao fato de se estar mais próximo de uma simulação direta (DNS), a um custo computacional bem mais caro, e não de se ter diminuído a importância relativa do erro de comutatividade.

Para o caso de um filtro retangular (*top-hat*) em uma dimensão, pode-se mostrar (Guerts, 2004) que o erro de comutação total, isto é, incluindo $\nabla \cdot \tau_{SGS}$ e ϵ_{com} é da forma:

$$\nabla \cdot \tau_{SGS} + \epsilon_{\text{com}} = C(k\Delta) \underbrace{\left\{ k \sin(2kx) \right\}}_{\nabla \cdot \tau_{SGS}} + \underbrace{\left\{ \frac{\Delta'}{\Delta} [\cos(2kx) - 1] \right\}}_{\epsilon_{\text{com}}}, \quad (3-17)$$

onde Δ' é a derivada espacial de Δ , ou seja, $\partial(\Delta)/\partial x$, e k é o número de onda do modo em questão.

Assim, nesse caso simples, para que o modelo sub-malha tenha importância e justifique investimento para melhorias, é necessário que

$$\frac{\Delta'}{\Delta} \ll k, \quad (3-18)$$

ou seja, a taxa de alargamento relativo do espaçamento de malha deve ser limitado pelo número de onda em questão. Nota-se daí que um alargamento de malha costuma ser mais crítico para as grandes estruturas (k baixo), ou, de outra forma, são os modos de maior comprimento de onda que vão ditar as limitações práticas do alargamento da malha.

Um outro raciocínio que pode ser feito baseado na Eq. 3-18 é o seguinte: quanto menor o alargamento (ou compressão) de malha, ou seja, quanto mais uniforme for a malha, maior a faixa de número de ondas para a qual o erro de comutatividade ainda é bem menor que o termo sub-malha, ou seja, maior o espectro de modos para o qual a modelagem sub-malha (SGSM) domina o erro de comutatividade.

Além da importância do controle da razão entre os erros de comutatividade e de modelagem sub-malha, um outro ponto crítico deve ainda ser

examinado. Germano (2000) mostrou que o efeito numérico de um gradiente de espaçamento de malha pode ser equivalente à adição de um termo viscoso nas equações de transporte. Em particular, verificou que o sinal dessa viscosidade adicional depende da direção do alargamento da malha e da velocidade do fluido. Assim, se a malha se alargar na direção contrária ao vetor velocidade, tem-se um efeito de viscosidade negativa, o que pode ser catastrófico para a estabilidade numérica. Por outro lado, se a malha se alargar na mesma direção do vetor velocidade, a viscosidade aparente será positiva, o que, se por um lado traz estabilidade para o esquema numérico, por outro, aumenta a dissipação a ponto, talvez, de ofuscar os termos modelados.

Este efeito apontado por Germano (2000) pode ser entendido fisicamente da seguinte maneira: uma vez que os turbilhões são convectados pelo escoamento, se houver uma mudança no espaçamento de malha ao longo da trajetória percorrida por uma estrutura turbilhonar, o efeito sentido por esta última será o de uma variação da posição da frequência de corte no espectro. Em outras palavras, esta estrutura experimentará uma rápida diminuição de energia quando passar para uma região de malha mais grosseira, correspondendo a um efeito dissipativo, de viscosidade aparente positiva. No sentido inverso, isto é, de uma região de malha grosseira para uma de malha fina, a mesma estrutura sentirá necessidade de preencher os modos de energia até então vazios do espectro. Note-se que uma região de malha mais fina suporta mais modos de números de onda mais elevados do que os que estavam sendo carregados pelo turbilhão em regiões mais grosseiras da malha. Essa súbita necessidade de aumentar a energia dos modos mais elevados corresponderia à viscosidade negativa, comentada em parágrafos anteriores.

Uma alternativa possível para a abordagem desses erros de comutatividade, que não será explorada nesse trabalho, é a modelagem dos mesmos. Guerts (2004) expõe algumas maneiras de se estimar e quantificar esse erro, baseando-se, por exemplo, em argumentos de similaridade de escalas. A maioria das opções apresentadas usa raciocínios análogos aos empregados em formulações de modelos sub-malha, envolvendo modelos estruturais.

3.6

Tensor Sub-Malha

De acordo com o apresentado na seção 2.2, os modelos funcionais baseiam-se na tentativa de modelar o papel do termo sub-malha na cascata

de energia, não se importando muito com a forma estrutural do tensor e direções principais. Nesse sentido, comumente é suficiente modelar esse termo como um termo difusivo, análogo ao encontrado naturalmente nas equações de N-S. Porém, para que a energia não se acumule indevidamente nas menores escalas, a viscosidade associada a este termo dissipativo deve ser maior do que a laminar, sendo escolhida de tal forma a equilibrar a taxa de transferência inercial da energia. Assim, a hipótese mais comum para modelos funcionais é a hipótese de Boussinesq, que é análoga à usada em metodologias RANS:

$$\tau_{SGSij} \equiv \tau_{ij} = -\nu_{SGS} \bar{S}_{ij}, \quad (3-19)$$

onde se usa a notação indicial de Einstein. \bar{S}_{ij} é a parte simétrica do gradiente da velocidade resolvida, ou taxa de deformação, sendo dada por:

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3-20)$$

A viscosidade sub-malha, ν_{SGS} , deve ser escolhida, ou mesmo automaticamente ajustada (Germano, 1991) de tal forma a haver um equilíbrio de fluxo de energia.

Sendo ν_{SGS} um escalar, a hipótese descrita pela Eq. 3-19 corresponde a assumir que o tensor sub-malha está alinhado com o tensor taxa de deformação, de forma análoga à usada na equação de N-S para se modelar o termo viscoso, $\nu \nabla^2 \mathbf{u}$. No caso da viscosidade molecular, isso é perfeitamente justificável, pois as escalas moleculares são muito pequenas e o alinhamento com o tensor deformação se dá, na prática, instantaneamente. Porém, no caso em questão, as escalas que estão sendo modeladas são bem maiores e, portanto, mais lentas, de modo que nem sempre essa hipótese de alinhamento é válida.

Tal qual ocorre com o tensor de Reynolds para metodologias RANS, aqui também se deve fazer um pequeno ajuste, para que o traço do lado esquerdo da Eq. 3-19 seja igual à zero, já que traço do lado direito da mesma equação é nulo. Assim, faz-se necessária a seguinte correção:

$$\text{dev}(\tau_{ij}) = -\nu_{SGS} \bar{S}_{ij}, \quad (3-21)$$

onde $\text{dev}(\tau_{ij})$ é a parte deviatórica de τ_{ij} , ou seja, $\text{dev}(\tau_{ij}) = \tau_{ij} - 1/3 \tau_{kk} \delta_{ij}$. Note que τ_{kk} é o próprio traço de τ_{ij} , e pode ser associado com a energia

cinética sub-malha, chamada k_{SGS} no decorrer deste trabalho:

$$k_{SGS} = \frac{1}{2} \tau_{kk}. \quad (3-22)$$

Convém ainda observar que o termo $1/3 \tau_{kk} \delta_{ij} = 2/3 k_{SGS} \delta_{ij}$.

Ao substituir o tensor sub-malha na Eq. 3-16, deve-se avaliar a divergência deste, a qual em notação indicial é

$$\nabla \cdot \tau_{SGS} = \partial_i [\text{dev}(\tau_{ij}) + 2/3 k_{SGS} \delta_{ij}] = -\partial_i [\nu_{SGS} \bar{S}_{ij}] + (2/3) \partial_j k_{SGS}, \quad (3-23)$$

onde $\partial_i(\cdot) = \partial(\cdot)/\partial x_i$.

Observe-se que o segundo termo da Eq. 3-23 pode ser incorporado ao termo de pressão da Eq. 3-16 sem conseqüências palpáveis para o sistema de equações. De fato, a pressão modificada está amarrada implicitamente pela equação de continuidade, não importando quantos ou quais termos – desde que apareçam sob a forma de um gradiente de um escalar nas N-S – ela tenha incorporado.

Partindo-se da Eq. 3-21, várias modelagens sub-malha diferentes podem ser concebidas, diferindo apenas na maneira pela qual a viscosidade sub-malha é calculada. A análise dimensional de ν_{SGS} mostra que para definir essa viscosidade são necessárias duas escalas, por exemplo, uma escala de comprimento, e uma de velocidade. Representando-se, simbolicamente, as escalas de comprimento, tempo, e velocidade, por \hat{l} , \hat{t} e \hat{u} , respectivamente, pode-se escrever ν_{SGS} de diversas formas, como, por exemplo, as mostradas a seguir:

$$\nu_{SGS} = C_{ul} \hat{u} \hat{l} = C_{lt} \hat{l}^2 / \hat{t} = C_{ut} \hat{u}^2 \hat{t}, \quad (3-24)$$

sendo C_{ul} , C_{lt} , e C_{ut} constantes ajustáveis.

Diferentemente das metodologias RANS onde não se tem uma escala de comprimento bem definida, no caso do LES, essa escala, que deve estar de alguma forma relacionada ao comprimento das menores estruturas resolvidas, pode ser automaticamente associada à largura da malha, pelo menos no caso de se usar filtragem implícita, como no presente trabalho. Resta, então, escolher uma escala de velocidade (ou de tempo) adequada. Para uma escala de tempo, por exemplo, pode-se adotar o inverso da magnitude da taxa de deformação, $|\bar{S}_{ij}|$, enquanto, para uma escala de velocidade, é comum se usar a raiz quadrada da energia cinética associada aos pequenos turbilhões.

Nesta seção são apresentados, em mais detalhes, três possíveis modelagens:

- o modelo de Smagorinsky (1963), que foi escolhido por sua importância histórica, e também por ser muito utilizado ainda hoje;
- a abordagem Dinâmica (originalmente proposto por Germano et al., 1991), selecionada por ter revolucionado os modelos sub-malha ao dispensar o ajuste empírico de constantes;
- o modelo de uma equação (desenvolvido independentemente por uma série de autores, por exemplo, Yoshizawa e Horiuti, 1985), por representar uma outra classe de modelos, que faz uso de informações sub-malha, não disponíveis explicitamente.

3.6.1

Modelo Sub-malha de Smagorinsky

A grande maioria dos modelos funcionais isotrópicos parte da hipótese de Boussinesq, Eq. 3-21, e propõe um método para o cálculo da viscosidade sub-malha. O modelo de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963), em particular, assume um equilíbrio entre produção, dissipação e transferência de energia nas pequenas escalas, e se utiliza da taxa de deformação para definir uma escala de tempo, e do próprio espaçamento de malha para estabelecer uma escala de comprimento. Assim, propõe a seguinte viscosidade sub-malha, estimada a partir de grandezas resolvidas:

$$\nu_{SGS}(x, t) = (C_s \bar{\Delta})^2 |\bar{S}(x, t)|, \quad (3-25)$$

onde $|\bar{S}(x, t)|$ é o módulo do tensor taxa de deformação do campo de velocidades resolvido,

$$|\bar{S}(x, t)| = \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}, \quad (3-26)$$

$\bar{\Delta}$ é uma escala de comprimento associada com a largura do filtro espacial, e C_s é a constante de Smagorinsky.

A escala de comprimento, $\bar{\Delta}$, deve trazer para a Eq. 3-25 informações locais sobre as menores escalas sendo resolvidas. Se os volumes de controle da malha apresentarem um formato cúbico, isto é, $\bar{\Delta}_x = \bar{\Delta}_y = \bar{\Delta}_z$, ou mesmo um formato de um paralelepípedo de arestas não muito diferentes, essa escala pode ser convenientemente escolhida como:

$$\bar{\Delta} = \sqrt[3]{V_c} \quad (3-27)$$

onde V_c é o volume do volume de controle.

Embora a Eq. 3-27 seja satisfatória para malhas cujos volumes de controle possuam alongamentos (razões de aspecto) não muito diferentes da unidade, as variações de tamanho e direções preferenciais das estruturas turbulentas encontradas em diferentes regiões de um mesmo escoamento impõem, muitas vezes, o uso de malhas altamente versáteis que devem se adaptar rapidamente às diferentes necessidades de diferentes zonas. Assim, são raras as ocasiões em que se pode dispor de malhas com volumes de controle aproximadamente cúbicos, e, muitas vezes, a Eq. 3-27 se mostra inadequada.

É fácil verificar, por exemplo, que, se o espaçamento na direção z ($\bar{\Delta}_z$) for muito maior que $\bar{\Delta}_x$ e $\bar{\Delta}_y$, a Eq. 3-27 superestima a viscosidade ν_{SGS} para estruturas turbulentas compatíveis com os tamanhos de malha das direções x e y . Nesse caso, pode haver um amortecimento excessivo das oscilações turbulentas. Algumas alternativas para solucionar esse problema são apresentadas por Sagaut (2002), porém todas elas possuem alguma desvantagem, tais como custo computacional extremamente elevado, e validade restrita a malhas estruturadas. Em suma, toda a questão reside no fato de que $\bar{\Delta}$ é um escalar, enquanto os volumes de controle da malha, e, portanto as menores estruturas turbulentas a serem resolvidas, são tridimensionais, podendo ter comprimentos distintos nas diversas direções.

A constante de Smagorinsky possui valores ótimos diferentes, dependendo do tipo de código utilizado, e do tipo de escoamento em questão. Para turbulência homogênea e isotrópica, Clark et al. (1979) utilizaram $C_s = 0,18$, enquanto Deardorff (1970) usou $C_s = 0,1$ para um canal plano. Esta variação se deve ao fato de que, em canais planos, o gradiente de velocidade não é nulo, contribuindo para o termo $\bar{S}(x, t)$. Portanto, para que o equilíbrio local de energia seja mantido, o valor da constante deve ser diminuído.

Resumidamente, os principais defeitos desse modelo sub-malha são (Sagaut, 2002):

- Em regiões laminares do escoamento, mas que apresentam uma taxa de deformação significativa, o modelo não prevê uma viscosidade sub-malha nula, mas sim um valor positivo que pode alterar significativamente a natureza do escoamento, tornando-o excessivamente difusivo. Surge daí uma necessidade de se alterar a constante de Smagorinsky dinamicamente.
- Para filtros, ou malhas, altamente anisotrópicas, a escala de comprimento $\bar{\Delta}$, e, conseqüentemente ν_{SGS} , sendo escalares, não conseguem

representar de forma adequada as menores estruturas tridimensionais presentes. A rigor, para tal, seria necessário adotar formas tensoriais para os mesmos.

- Por assumir a hipótese de equilíbrio de energia, o modelo falha em regiões onde este equilíbrio é destruído por uma elevada produção de energia turbulenta, tal como em proximidades de paredes, camadas cisalhantes livres, etc.

Este primeiro modelo sub-malha tem sido largamente utilizado e permitiu o início de uma das mais promissoras linhas de pesquisa na área da simulação numérica de escoamentos turbulentos. No campo da modelagem sub-malha, avanços consideráveis têm sido conseguidos, chegando à novas concepções como os modelos dinâmicos que não necessitam do uso desta constante *ad-hoc*. Nesta nova concepção de modelagem, apresentada a seguir, esta constante é avaliada e alterada dinamicamente, a cada passo de tempo, durante a simulação.

3.6.2 Modelo Sub-malha de Smagorinski Dinâmico

Abordagens dinâmicas são aquelas nas quais o valor da constante é avaliado, para cada localização no espaço e no tempo, com base nas grandezas resolvidas disponíveis (Germano et al., 1991). Isto significa que qualquer modelo “estático” que faça uso explícito de uma constante (como, por exemplo, os baseados na hipótese de Boussinesq) pode ser a origem de um modelo dinâmico, bastando, para isso, adotar uma metodologia para recalcular a constante envolvida, para cada ponto da malha, e para cada instante de tempo. Nesse sentido, apresenta-se a seguir um método geral, que pode ser aplicado a qualquer modelo, para calcular tal constante. Posteriormente, aplica-se o método ao modelo de Smagorinsky, gerando o modelo de Smagorinsky Dinâmico.

Em linhas gerais, a abordagem adotada parte do princípio de que dois níveis de filtragem diferentes (com larguras de filtro próximas) aplicados sucessivamente devem requerer modelagens sub-filtro com constantes idênticas. Esta constante pode ser determinada a partir da solução obtida, uma vez que o segundo processo de filtragem é feito sobre grandezas disponíveis.

Para a aplicação de dois níveis de filtragem sucessivos, faz-se uso da identidade de Germano (Germano, 1992), a qual pode ser escrita como:

$$L_{ij} = T_{ij} - \widehat{\tau}_{ij}, \quad (3-28)$$

onde:

$$L_{ij} = \widehat{\overline{u_i u_j}} - \widehat{u_i} \widehat{u_j}, \quad (3-29)$$

$$T_{ij} = \overline{\widehat{u_i u_j}} - \widehat{u_i} \widehat{u_j}, \quad (3-30)$$

$$\widehat{\tau}_{ij} = \widehat{\overline{u_i u_j}} - \widehat{u_i} \widehat{u_j}. \quad (3-31)$$

Note-se que $\widehat{\tau}_{ij}$ é nada menos que o tensor sub-malha, $\tau_{ij} \triangleq \tau_{SGSij}$, passado por um segundo processo de filtragem, simbolicamente definido como $(\widehat{\quad})$, cujo parâmetro de filtragem espacial, $\widehat{\Delta}$ é usualmente, embora não necessariamente, o dobro do original, $\bar{\Delta}$.

A escolha da razão entre as larguras de bandas dos dois níveis de filtragem (usualmente $\widehat{\Delta} = 2 \bar{\Delta}$) é motivada pela simplicidade de se utilizar números múltiplos, bem como por estudos numéricos que concluem ser esta a escolha ótima, em termos de eficiência e custo computacional.

Assim, os tensores τ_{ij} e T_{ij} são, respectivamente, os tensores sub-malha de primeiro e segundo nível de filtragem. Assume-se que ambos possuem a mesma forma, com o mesmo valor de C_s , o qual agora depende da posição e do instante de tempo, sendo então redefinido como $C_d = C_d(\mathbf{x}, t)$. Os tensores são escritos então como:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = C_d \beta_{ij}, \quad (3-32)$$

$$T_{ij} - \frac{1}{3} T_{kk} \delta_{ij} = C_d \alpha_{ij}, \quad (3-33)$$

sendo α e β os termos modelados desprovidos da constante. No caso do modelo de Smagorinsky, por exemplo, $\beta_{ij} = -\bar{\Delta}^2 |\bar{S}_{ij}| \bar{S}_{ij}$ e $\alpha_{ij} = -\widehat{\Delta}^2 |\widehat{S}_{ij}| \widehat{S}_{ij}$, mas em prol da manutenção da generalidade, essa informação só será usada posteriormente, no desenvolvimento do modelo de Smagorinsky Dinâmico.

Levando-se as fórmulas para os tensores, Eqs. 3-32 e 3-33, na identidade de Germano, Eq. 3-28, tem-se

$$L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} \triangleq L_{ij}^d = C_d \alpha_{ij} - \widehat{C_d} \beta_{ij}, \quad (3-34)$$

onde o superescrito d em L_{ij}^d denota a parte deviatórica da matriz.

Como o segundo termo do lado direito da equação acima apresenta a constante dentro do processo de filtragem, a mesma não pode ser determinada, sem que se faça a seguinte aproximação:

$$\widehat{C_d \beta_{ij}} = C_d \widehat{\beta_{ij}}, \quad (3-35)$$

que é equivalente a se considerar C_d constante no volume de integração.

Pode-se, então, definir um erro (resíduo) associado à Eq. 3-34

$$E_{ij} = L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} - C_d \alpha_{ij} + C_d \widehat{\beta_{ij}}, \quad (3-36)$$

e calcular C_d de forma a minimizar tal erro.

Lilly (1992) propôs uma minimização no sentido de mínimos quadrados, na qual a constante é a solução de

$$\frac{\partial E_{ij} E_{ij}}{\partial C_d} = 0, \quad (3-37)$$

o que fornece

$$C_d = \frac{m_{ij} L_{ij}^d}{m_{kl} m_{kl}}, \quad (3-38)$$

com $m_{ij} = \alpha_{ij} - \beta_{ij}$.

Observe que o coeficiente $C - d$ assim calculado, se ajusta instantaneamente ao regime de escoamento local, podendo assumir valores negativos. O aparecimento esporádico e localizado de valores negativos para a viscosidade sub-malha poderia ser interpretado como um efeito anti-dissipativo localizado, oriundo da cascata retrógrada. Por outro lado, pode apresentar valores ilimitados, caso o denominador se anule. Em ambos os casos, o método numérico se torna instável, já que os valores negativos da viscosidade podem permanecer por longos intervalos de tempo, causando aumento na flutuação das altas frequências.

Algumas alternativas para solucionar o problema são: 1) utilizar médias estatísticas nas direções homogêneas do escoamento (se houver), no tempo, localmente no espaço, ou mesmo num referencial lagrangiano que acompanha uma partícula; 2) utilizar limitadores arbitrários (*clipping*); 3) ou utilizar uma combinação desses métodos.

Assim, a Eq. 3-38 pode ser reescrita como

$$C_d = \frac{\langle m_{ij} L_{ij}^d \rangle}{\langle m_{kl} m_{kl} \rangle}, \quad (3-39)$$

ou, alternativamente, como

$$C_d = \left\langle \frac{m_{ij} L_{ij}^d}{m_{kl} m_{kl}} \right\rangle, \quad (3-40)$$

onde o operador $\langle \rangle$ identifica um dos processos de média citados no parágrafo acima.

Uma outra opção seria uma média sobre diferentes realizações, ou seja, uma média estatística propriamente dita.

Desta forma, qualquer modelo sub-filtro que utiliza uma constante adaptativa, como mostrado acima, constitui um modelo dinâmico. Quando aplicado ao modelo (estático) de Smagorinsky, o método origina o modelo dinâmico de Smagorinsky, o qual, por ter sido o primeiro a ser testado e por ser ainda hoje um dos mais empregados, é comumente chamado simplesmente “modelo dinâmico”.

A hipótese de que a constante é a mesma para dois níveis diferentes de filtragem pressupõe que as frequências de corte dos dois filtros estejam localizadas na faixa inercial do espectro e que os dois filtros sejam similares, ou seja, que possuam a mesma função, a menos de um fator de escala, relacionado à largura de banda. Meneveau e Lund (1997) identificaram algumas inconsistências do modelo dinâmico original (Germano, 1991), o que lhes permitiu estender seu domínio de validade à faixa viscosa do espectro.

Teoricamente, se a largura do filtro for menor ou igual ao comprimento característico de Kolmogorov, um modelo adequado deve prever valor nulo para a constante, uma vez que o escoamento está sendo completamente resolvido, dispensando modelos sub-filtro.

Entretanto, os modelos dinâmicos (Germano, 1991 e Lilly, 1992) retornam uma constante que depende do segundo nível de filtragem, ou seja, $C_d = C(\widehat{\Delta})$, o que significa que quando a largura do filtro tende para o comprimento característico de Kolmogorov (η), tem-se

$$\lim_{\widehat{\Delta} \rightarrow \eta} C_d = C(r\eta) \neq 0 \quad \text{onde} \quad r = \widehat{\Delta}/\overline{\Delta}. \quad (3-41)$$

O algoritmo proposto por Meneveau e Lund (1997) corrige esse problema, ao assumir que as constantes correspondentes aos dois níveis de filtragem não são mais idênticas. Esse e outros métodos mais abrangentes (Sagaut, 2002), não são apresentados aqui, por não fazerem parte do escopo desse trabalho.

3.6.3 Modelo Sub-malha de Uma Equação

Conforme o comentado nas seções 2.2.3 e 3.6, há várias possibilidades para o cálculo da viscosidade sub-malha. O modelo de Smagorinsky utiliza apenas informações das grandes escalas (resolvidas), conforme explicitado na Eq. 3-25, e assume um equilíbrio de energia, o qual nem sempre é verificado. Outros (Sagaut, 2002) podem fazer uso de informações relativas a uma frequência específica (comumente a de corte) ou mesmo informações contidas em escalas não-resolvidas, as quais não aparecem explicitamente nas equações de N-S filtradas.

Neste último caso, como tais informações não estão disponíveis (juntamente por serem relativas a escalas não-resolvidas), devem ser, em última análise, obtidas de grandezas simuladas. O modelo de uma equação apresentado neste ítem avalia a viscosidade sub-malha a partir de uma escala de velocidade baseada na energia cinética das pequenas escalas (k_{SGS}), a qual é obtida a partir da solução de sua equação de transporte (Yoshizawa e Horiuti, 1985). Esta, por sua vez, é expressa apenas em função de grandezas disponíveis, e fornece, a cada passo de tempo, a escala de velocidade, $\hat{u} \triangleq \sqrt{k_{SGS}}$, que, juntamente com uma escala de comprimento associada à malha ($\bar{\Delta}$), define a viscosidade sub-malha, a menos de uma constante:

$$\nu_{SGS} = C_k \sqrt{k_{SGS}} \bar{\Delta}. \quad (3-42)$$

A energia cinética das pequenas escalas pode ser definida como

$$k_{SGS} = \frac{1}{2} \tau_{SGSkk}, \quad (3-43)$$

e sua equação de transporte pode ser estabelecida a partir de simples manipulações da equação de quantidade de movimento, Eq. 3-2, e da equação de grandes escalas, Eq. 3-16. Assim, seguindo-se a própria construção de τ , multiplica-se internamente (produto interno) a Eq. 3-2 por \mathbf{u} , e a Eq. 3-16 por $\bar{\mathbf{u}}$, obtendo-se duas equações de transporte, para $1/2 (u_k u_k)$ e $1/2 (\bar{u}_k \bar{u}_k)$, respectivamente. Filtrando-se a primeira dessas duas equações e subtraindo este resultado da segunda, chega-se, após algumas hipóteses de fechamento (Yoshizawa e Horiuti, 1985), a uma equação de transporte para a energia turbulenta sub-malha:

$$\frac{\partial k_{SGS}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_j k_{SGS}) = \frac{\partial}{\partial x_j} [(\nu + \nu_{SGS}) \frac{\partial k_{SGS}}{\partial x_j}] - \varepsilon - \tau_{lm} \bar{S}_{lm}, \quad (3-44)$$

onde, o transporte turbulento e a difusão de pressão foram modelados como um processo difusivo, representados pela viscosidade ν_{SGS} , enquanto a dissipação viscosa é representada por $\varepsilon = C_\varepsilon k_{SGS}^{3/2}/\overline{\Delta}$.

Essa equação de transporte consegue, por ser transiente, capturar as mudanças de energia turbulenta em escalas não-resolvidas, que seriam ignoradas por hipóteses de equilíbrio energético, tais como as utilizadas no modelo de Smagorinsky. Entretanto, esse modelo, assim como todos os modelos baseados na Hipótese de Boussinesq (também chamados modelos de viscosidade turbilhonar, ou *eddy-viscosity models*) ainda assume alinhamento entre o tensor sub-malha e a taxa de deformação, o que muitas vezes não é verificado. De fato, sob circunstâncias ideais nas quais o equilíbrio energético é verificado, este modelo é mais caro computacionalmente e não apresenta desempenho superior ao clássico modelo de Smagorinsky.