

6 Validação

Antes da realização das simulações envolvendo placas planas onde vários regimes de escoamento são observados, é necessário testar os modelos propostos em casos mais simples, a fim de se comprovar se os mesmos atendem aos objetivos para os quais foram idealizados. Isto porque, apesar da fácil verificação teórica da presente proposta para equações de transporte simplificadas, existem outros fatores complicadores a serem enfrentados em simulações reais de escoamentos incompressíveis, tais como a não linearidade do termo advectivo e a discretização temporal.

Assim, pretende-se verificar com tais testes se os modelos propostos continuam satisfatórios diante de um sistema dinâmico discreto não só na dimensão espacial como também na temporal. Para tal, propõem-se testes envolvendo equações discretas para o transporte de um escalar passivo, nos quais a variável transportada ϕ está sujeita a uma força artificial, tal qual a descrita nas Seções 5.1 e 5.2, cujo resultado é a atenuação dos modos indesejáveis.

Além disso, com o objetivo de avaliar o comportamento dos modelos propostos perante a não-linearidade das Equações de Navier-Stokes, propõe-se o clássico caso de teste físico envolvendo simulações de Turbulência Isotrópica e Homogênea (Fureby et al., 1997).

As seções a seguir descrevem os testes realizados apresentando os respectivos resultados, análises e conclusões.

6.1 Transporte de um Escalar Passivo

A equação que governa o transporte de um escalar passivo ϕ por um campo de velocidade \mathbf{u} pode ser escrita como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = f, \quad (6-1)$$

onde o forçamento f foi incluído com o intuito de atenuar as oscilações espaciais indesejáveis, de acordo com o exposto na Seção 5.1. O primeiro termo do lado esquerdo é o termo transiente, que se anula ao ser atingido o regime estacionário de escoamento, e o segundo termo do lado esquerdo é o termo advectivo.

Dois testes envolvendo transporte de um escalar passivo foram então idealizados. O primeiro deles envolve simulações unidimensionais em regime transiente, onde $\mathbf{u} = u \mathbf{i}$. Inicializa-se ϕ com uma distribuição espacial que pode conter modos desejáveis e indesejáveis, e resolve-se a equação correspondente. Para campos iniciais contendo apenas modos suaves, espera-se, como resultado, obter uma propagação por convecção do campo inicial ϕ com velocidade u , salvo pequenos erros de amplitude e fase, intrínsecos a qualquer esquema numérico de discretização. Já para configurações iniciais contendo modos indesejáveis, espera-se que os mesmos sejam rapidamente atenuados.

Um segundo tipo de teste envolve simulações 2-D em regime permanente ($\mathbf{u} = u \mathbf{i} + v \mathbf{j}$), nas quais uma descontinuidade em ϕ numa fronteira é propagada para o interior de um domínio computacional quadrado numa direção não ortogonal à malha. Os modelos propostos são então comparados a esquemas numéricos tradicionais (diferenças centradas, e *Upwind* de primeira ordem) em relação à robustez numérica face a instabilidades espaciais, bem como em relação à difusão numérica apresentada.

6.1.1 Transporte Unidimensional de Escalar Passivo

Nestas simulações unidimensionais e transientes de transporte de um escalar passivo, ϕ , emprega-se um domínio computacional de comprimento unitário, com condições de contorno periódicas para ϕ nas duas extremidades, onde a velocidade u com a qual o escalar é convectado é unitária. O valor de ϕ é armazenado no centro de cada subdivisão (célula). Inicialmente, é utilizada uma malha regularmente espaçada, com 16 subdivisões ($\Delta x = 1/16$), onde a propagação de uma estrutura que não contém os menores modos espaciais é examinada para diferentes valores dos parâmetros β_f e α_f . O passo de tempo empregado é de 0,01 segundos, o que corresponde, para uma malha regularmente espaçada, a um número de Courant de 0,16, que é superior ao valor máximo usado nas simulações de grandes escalas apresentadas no Capítulo 7. O esquema de discretização temporal escolhido foi o *backward difference*, implícito, de segunda ordem, salvo para o primeiro

passo de tempo, no qual se utiliza o esquema de Euler implícito, de primeira ordem. Posteriormente, são examinados os casos de modos indesejáveis e os de malha não uniforme.

Nas figuras que se seguem, as coordenadas correspondentes aos centros das células (volumes de controle unidimensionais) são representadas sobre o eixo das abscissas com círculos preenchidos. Os gráficos com a distribuição axial de ϕ são traçados através de interpolações lineares por partes entre os valores de ϕ originalmente disponíveis, localizados nos centros das células. A fim de facilitar a rápida identificação dos valores centrais originais de ϕ em meio a linhas de interpolação, os mesmos são também marcados com círculos preenchidos. Cada gráfico ilustra a distribuição de ϕ num dado instante de tempo t , para diferentes conjuntos de parâmetros ou esquemas numéricos. Além disso, em alguns casos o forçamento f correspondente ao ϕ recém-calculado é também apresentado, de forma a ser possível identificar a presença ou não de modos indesejáveis. Na presente proposta, tal forçamento é considerado constante no intervalo de tempo $[t, t + \Delta t]$, sendo Δt o passo de tempo utilizado. Para manter a consistência de unidades entre a força f e a variável ϕ e permitir rápida avaliação da ordem de grandeza de ambos os termos, opta-se por apresentar a força multiplicada pelo passo de tempo ($f \Delta t$), que pode, então, ser interpretada fisicamente como a variação de ϕ provocada pela respectiva força, em um passo de tempo. Para se ter uma idéia da progressão temporal de ϕ , ou seja, de como a forma inicial é alterada e qual o atraso de fase, mostra-se também a distribuição de ϕ no instante de tempo inicial, em $t=0$ segundos (linha preta contínua), para fins de referência. Isto posto, pode-se rapidamente visualizar se o espaço percorrido pela estrutura inicial corresponde àquele esperado de uma advecção com velocidade u , e se a forma inicial foi alterada inadequadamente, seja em amplitude, seja em fase, por atenuação ou dispersão excessivas.

Antes da análise de testes dinâmicos, onde a forma de onda inicial progride no tempo, convém apresentar alguns casos estáticos, nos quais vários possíveis modos são mostrados com as respectivas forças artificiais resultantes (f), a fim de se avaliar se a formulação proposta realmente se comporta conforme idealizado, ou seja, se de fato consegue diferenciar um “modo de corte” dos demais. Assim, na Fig. 6.1 são apresentados vários modos de comprimentos de onda próximos ao do menor modo suportado pela malha (Figs. 6.1 (a)-(f)), em contraste com um polinômio de grau 2 (Figs. 6.1 (g) e (h)), que é um modo bastante suave.

Analisando as Figs. 6.1 (a) e (b), correspondentes ao modo de comprimento de onda $\lambda = 4 \Delta x$, observa-se que, conforme esperado, para $\beta_f = 1, 2$

resulta uma força nula. Na verdade, este resultado é obtido com qualquer β_f maior ou igual à unidade. Este mesmo modo, porém, não pode ser descrito por um polinômio de grau menor ou igual a 2 em nenhuma partição do domínio. Desta forma, para $\beta_f = 0$, a força resultante ($f \Delta t$) na Fig. 6.1 (a) não se anula em nenhum centro de volume de controle.

Os modos seguintes a esse, em particular os de comprimento de onda $\lambda = 6 \Delta x$, Figs. 6.1 (c) a (f), também resultam em forças de pequena magnitude, com valor nulo em alguns pontos nodais do domínio. Em especial, no caso da Fig. 6.1 (d) ($\beta_f = 1, 2$), a força é nula em todo o domínio, e, nas Figs. 6.1 (e) e (f), $f = 0$ na maior parte (dois terços) dos pontos nodais.

Examinando agora as Figs. 6.1 (g) e (h) correspondentes a um polinômio de grau 2, nota-se que, conforme esperado, ambos os valores de β_f resultam numa força identicamente nula.

O caso de um “modo de corte”, com o menor comprimento de onda possível ($\lambda = 2 \Delta x$), é apresentado na Fig. 6.2 juntamente com a força artificial normalizada ($f \Delta t$). Nota-se que a força resultante é significativa, comparada tanto com os casos anteriores quanto com os valores correspondentes de ϕ , evidenciando que, de fato, o esquema proposto é capaz de distinguir adequadamente modos indesejáveis de modos mais suaves, de forma a poder aplicar aos mesmos uma atenuação diferenciada.

Os testes estáticos unidimensionais realizados até então mostram que, na ausência de imperfeições do esquema numérico base, neste caso, diferenças centradas, a força adicional sugerida é capaz de atenuar apenas os menores modos, considerados indesejáveis.

Deve-se ter em mente que a presente proposta consiste em apenas adicionar uma força artificial na equação discreta, de maneira que continua sendo necessário um esquema numérico base, com discretizações espaciais e temporais. Embora os testes estáticos tenham mostrado que a ação da força artificial proposta pode ser limitada aos menores modos suportados, na prática, as imperfeições do sistema dinâmico discreto associado à escolha do esquema base, podem influenciar negativamente no desempenho final do método. A interação dessas dispersões com o termo de forçamento artificial merece estudos mais cuidadosos, envolvendo testes dinâmicos, nos quais se observa a propagação de uma estrutura inicial contendo modos indesejáveis, suaves, ou ambos. Deve ser ressaltado, no entanto, que, embora quando submetido a testes dinâmicos o método proposto possa não satisfazer completamente os objetivos traçados, os testes estáticos servem como prova de que o insucesso se deve exclusivamente às imperfeições do modelo base. Nesse

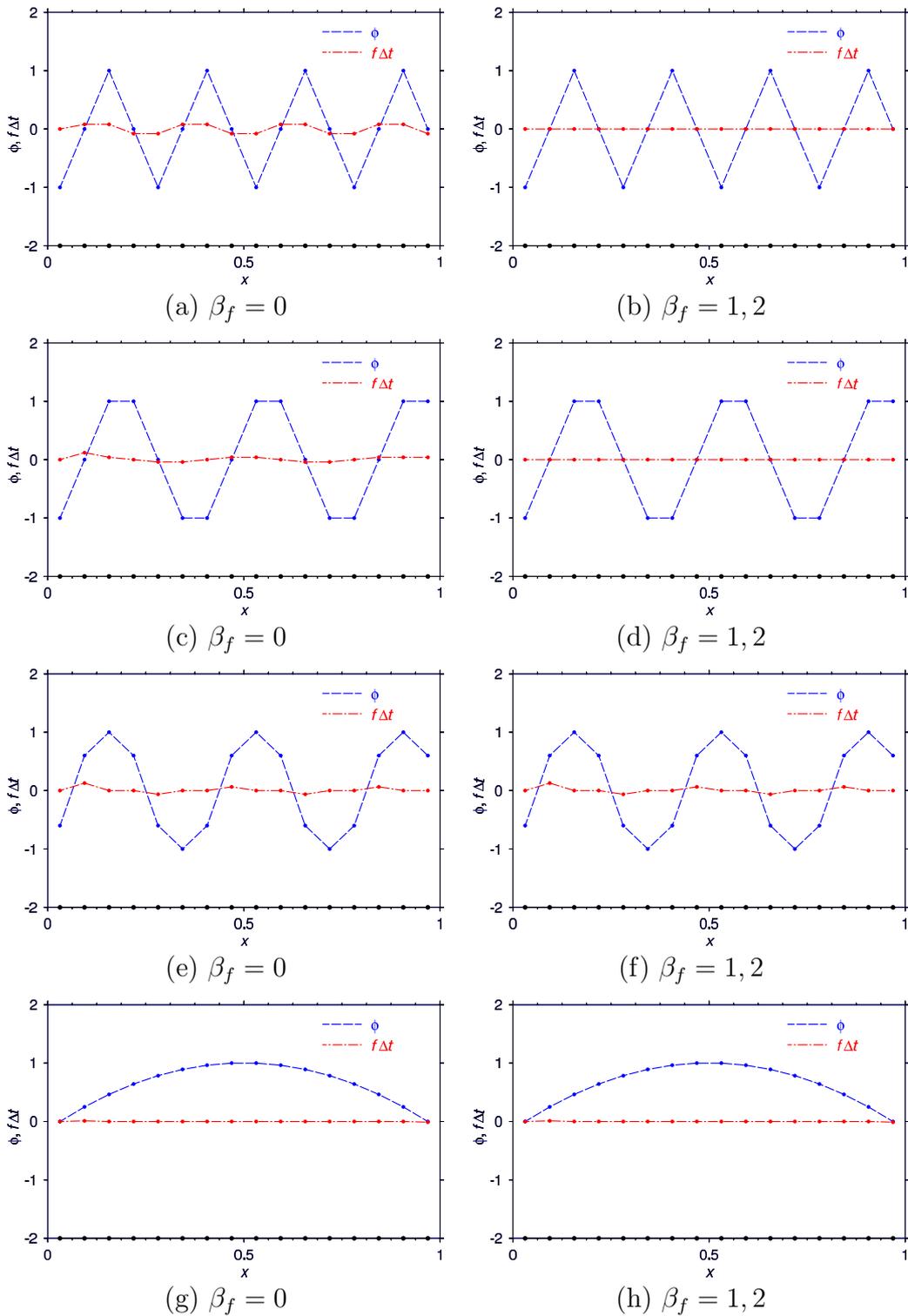


Figura 6.1: Exemplos de modos com comprimento de onda próximo ao do “modo de corte” (a)-(f), de um modo suave (g)-(h), e as respectivas forças resultantes, com $\alpha_f = 1$ e $\beta_f = 0$ ou $\beta_f = 1, 2$.

sentido, o fato do esquema de estabilização proposto não estar embutido no esquema numérico base permite que futuros avanços em esquemas de discretização sejam prontamente incorporáveis à presente proposta. Assim,

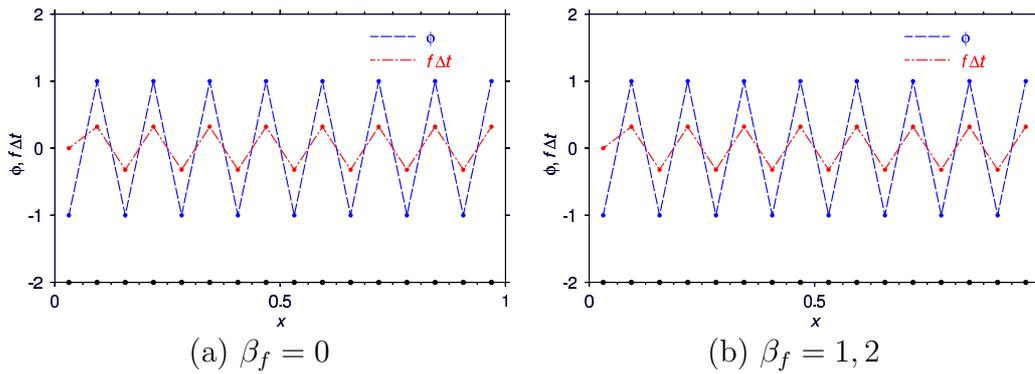


Figura 6.2: “Modo de corte”, e as forças resultantes com $\beta_f = 0$, e $\beta_f = 1, 2$.

quanto mais próximos da perfeição ficarem os esquemas numéricos, menos importância terá a funcionalidade estabilizadora do forçamento sugerido, até o ponto em que sua única função seria a de modelagem sub-malha, ou seja a de atenuar os pequenos modos gerados por mecanismos não-lineares (não presentes na Eq. 6-1), tais como a cascata de energia turbulenta. São então apresentados a seguir, testes dinâmicos, com a finalidade de se averiguar como as imperfeições do esquema numérico base e o forçamento proposto interagem.

O primeiro conjunto de resultados dinâmicos, ilustrado na Fig. 6.3, apresenta a propagação de uma estrutura inicial relativamente suave, com pouco conteúdo de alta frequência espacial, e a respectiva força normalizada ($f \Delta t$), utilizando o modelo proposto com parâmetros $\beta_f = 0$ e $\alpha_f = 1$. Para que a força pudesse ser visualizada claramente, aplicou-se um fator de escala ($10f \Delta t$). A distribuição de ϕ no instante de tempo inicial, em $t=0$ segundos também se encontra ilustrada na figura. Observa-se que, inicialmente, a força não é nula em todo domínio, por não se tratar de um polinômio de grau menor ou igual a dois. Com o decorrer do tempo, a estrutura vai ficando mais suave, e conseqüentemente, o módulo da força vai diminuindo.

A Fig. 6.4 corresponde ao mesmo caso, porém, utilizando o parâmetro $\beta_f = 1, 2$. Contrastando com a situação na qual $\beta_f = 0$, Fig. 6.3 (a), para $\beta_f = 1, 2$ a força correspondente à estrutura inicial, Fig. 6.4 (a), é nula em toda a extensão do domínio. Isto está de pleno acordo com o motivo da introdução da variável β_f – permitir certo grau de tolerância de forma a não atenuar estruturas razoavelmente suaves, tais quais a estrutura inicial da Fig. 6.4 (a). Novamente, para facilitar a visualização da força normalizada, aplicou-se um fator de escala ($10f \Delta t$). Observa-se que, no instante $t = 0, 2$ segundos, a força artificial só não é nula em dois pontos nodais, acusando a presença de modos altamente oscilatórios nos mesmos. Nota-se a suavização da estrutura com o passar do tempo, tal qual a observada anteriormente.

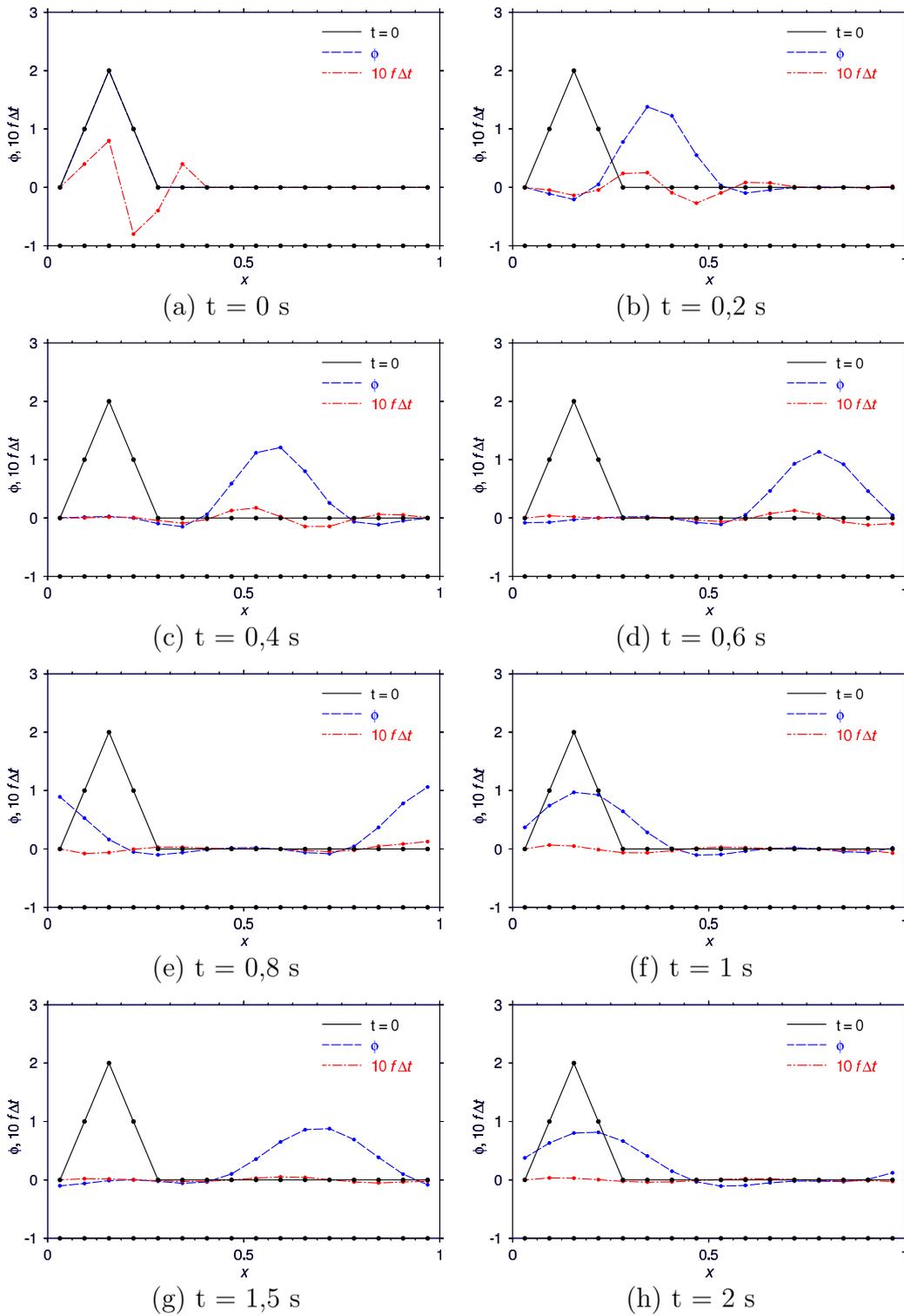


Figura 6.3: Progressão temporal de uma estrutura desejável de acordo com o modelo proposto, com $\beta_f = 0$, $\alpha_f = 1$, e da força artificial correspondente

A Figura 6.5 compara a previsão de propagação de uma estrutura inicial relativamente suave utilizando o modelo proposto (f-LES), com parâmetros $\beta_f = 0$ e $\alpha_f = 1$, com a obtida com esquemas tradicionais, tais como diferenças centradas puro (CD), *Upwind* (UW), e QUICK. Note

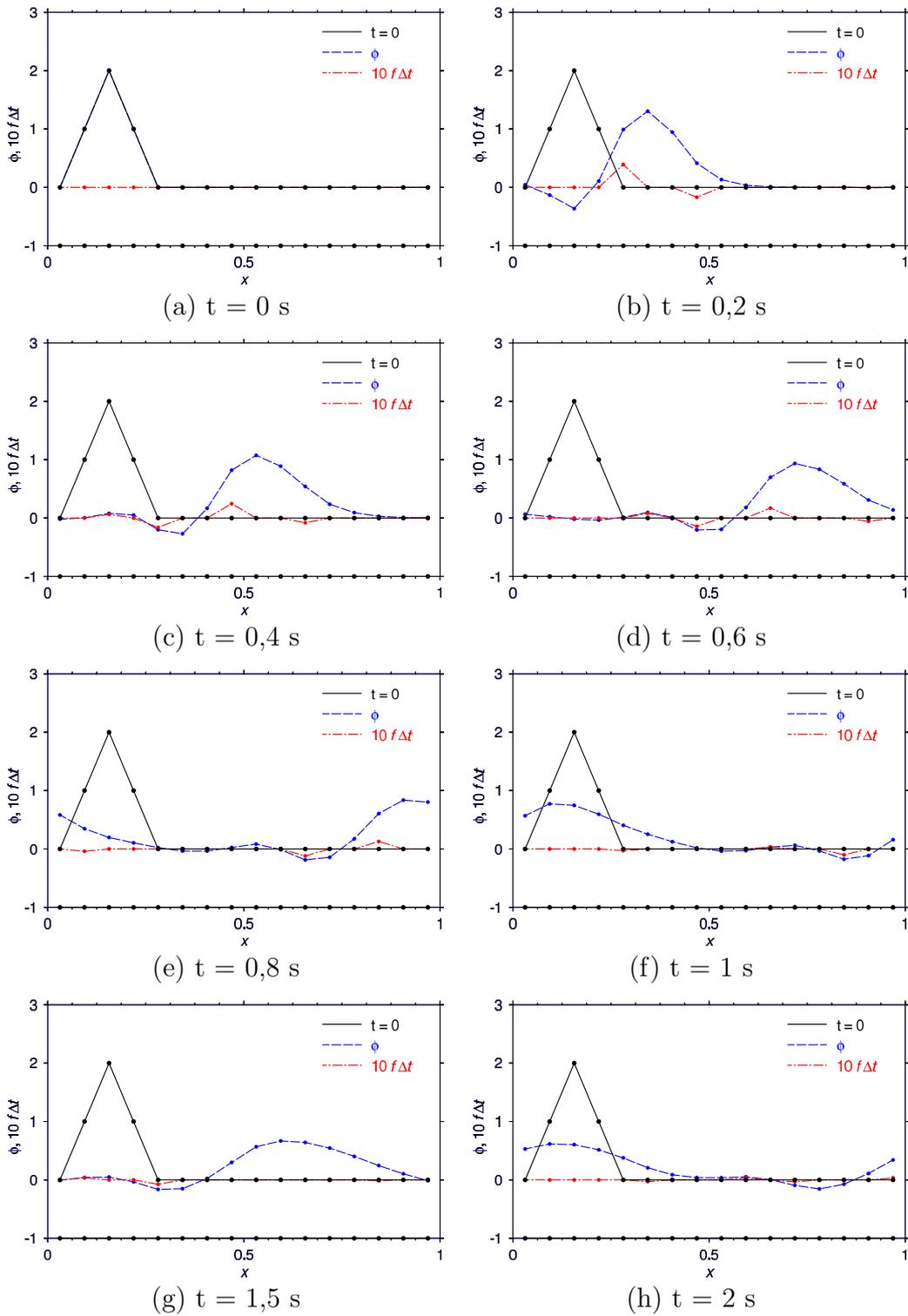


Figura 6.4: Progressão temporal de uma estrutura desejável de acordo com o modelo proposto, com $\beta_f = 1, 2$, $\alpha_f = 1$, e da força artificial correspondente

que o esquema de diferenças centradas tradicional (CD) apresenta grandes oscilações espaciais espúrias, enquanto o modelo proposto rapidamente atenua tais estruturas, preservando melhor a forma original da onda. Em termos de amplitude máxima, não se percebe muita diferença entre os

resultados obtidos com o modelo proposto e os resultantes de um esquema tradicional de diferenças centradas. Em termos práticos, considera-se os dois métodos equivalentes em termos de atenuação de amplitude máxima, já que as diferenças observadas devem-se a oscilações espúrias do esquema CD, um fenômeno puramente numérico, sem nenhum significado físico.

A equação de transporte (Eq. 6-1) admite uma solução analítica periódica, na qual, a cada múltiplo inteiro do segundo, a forma de onda deve coincidir com a forma de onda inicial ($t = 0$ s), tendo em vista a velocidade de convecção de $u = 1$ m/s e dimensão do domínio periódico $L = 1$ m. Embora tenha havido uma distorção grande da forma de onda após um segundo decorrido, pode-se afirmar com base na Fig. 6.5(f) que o resultado obtido com o esquema proposto ainda guarda semelhanças significativas em relação à forma original, estando a localização do valor de pico (crista da onda) bem próxima do valor previsto analiticamente ($x = 0,15625$ m), ligeiramente adiantada. Resumidamente, pode-se considerar que, passado 1 segundo, a amplitude reduz-se à metade, a largura da onda praticamente dobra, e a velocidade de propagação média no período é menos de 6,25% mais rápida que a esperada. O mesmo já não se pode dizer do esquema de diferenças centradas: a forma da onda em $t = 1$ s apresenta-se completamente desfigurada, com intensas oscilações espaciais presentes em todo o domínio, o que torna a simples identificação de uma largura de onda, ou mesmo a localização da crista da onda, tarefas difíceis. Em termos de velocidade de propagação média no período (1 segundo), nota-se que houve um atraso de pelo menos 12,5% em relação à velocidade característica $u = 1$ m/s.

Em $t = 1,5$ segundos (6.5(g)), esperava-se, pela solução analítica da equação 6-1, encontrar a mesma forma de onda, porém centrada na posição $x = 0,65625$ m do eixo das abscissas (oito volumes de controle à direita da crista da onda inicial). Em todos estes casos, constata-se uma grande distorção da forma, embora a forma de onda prevista pelo modelo proposto (f-LES) ainda apresente semelhanças com a forma inicial, o que não se pode dizer para o caso de diferenças centradas.

As distorções observadas em $t = 1$ s e $t = 1,5$ s tornam-se ainda mais exacerbadas em $t = 2$ s, Fig. 6.5(h), instante no qual a estrutura original já percorreu o domínio periódico duas vezes. As distorções e outros efeitos numéricos tiveram, assim, mais tempo para agir sobre a estrutura inicial, tornando-a praticamente irreconhecível em $t = 2$ s, pelo menos no caso do esquema CD.

Os resultados acima atestam que a opção pela atenuação dos modos

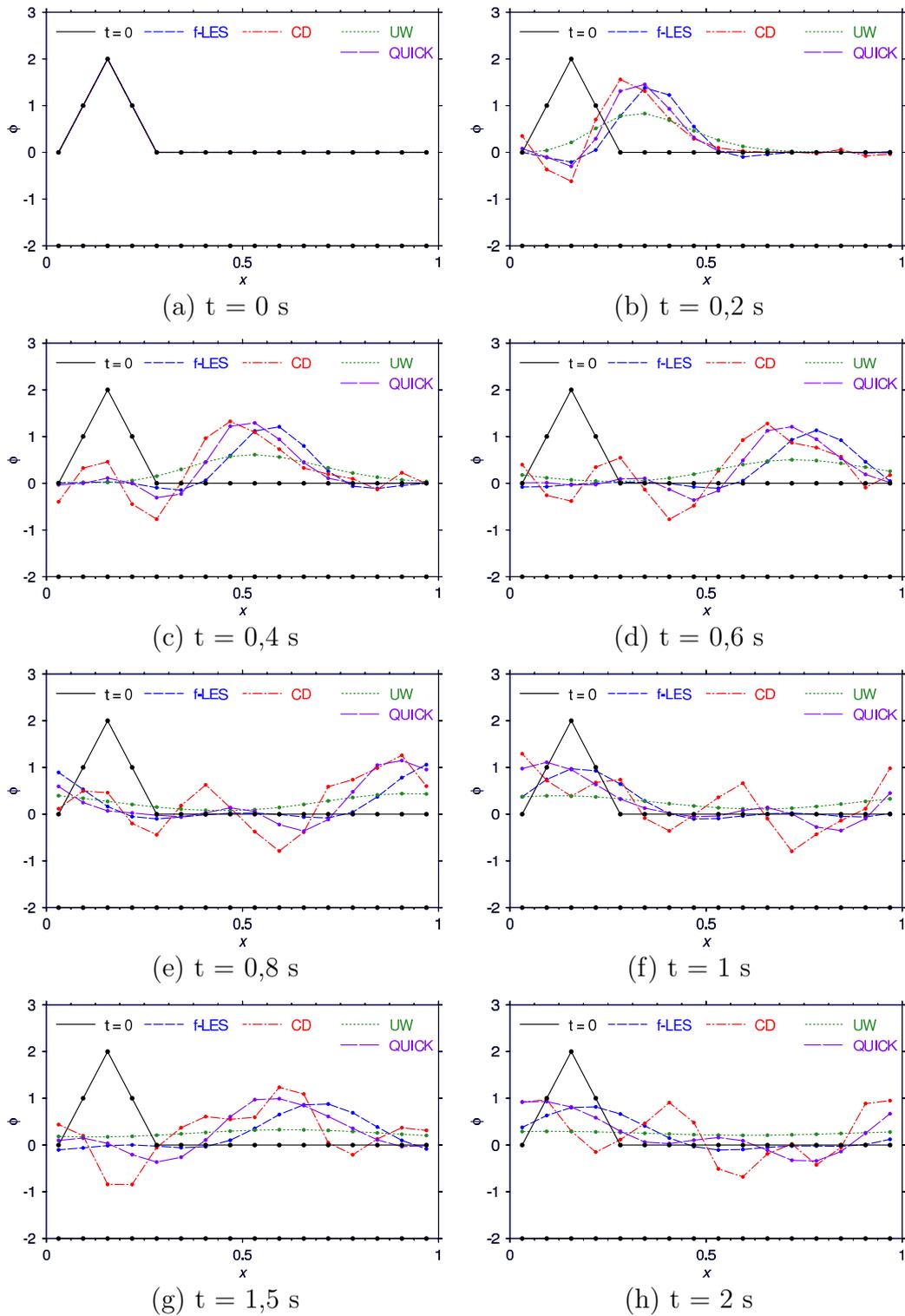


Figura 6.5: Progressão temporal de uma estrutura desejável de acordo com o modelo proposto, com $\beta_f = 0$, $\alpha_f = 1$, comparando-se diferenças centradas, *Upwind*, e QUICK.

não suportados numericamente, conforme proposto na Seção 5.1, não resulta em significativa perda de informação, quando comparado a opções que virtualmente conservam energia, caso de esquemas centrados. Pelo contrário,

a informação contida nesses modos traz instabilidade numérica e rápida desfiguração em relação à forma de onda inicial, e seu descarte parece trazer benefícios no que diz respeito à tentativa de preservar ao máximo as características originais da estrutura. Deste modo, baseado na Fig. 6.5, pode-se esperar que o modelo proposto represente um passo adiante em termos de robustez numérica, sem contudo apresentar uma atenuação de amplitude máxima muito diferente da observada em esquemas CD.

Ainda na mesma figura (6.5) são apresentadas as propagações obtidas quando se emprega metodologias mais tradicionais, projetados especificamente para limitar ou eliminar oscilações espaciais espúrias, tais como esquemas polarizados do tipo *Upwind* (UW), e QUICK.

Conforme esperado, o esquema *Upwind* de primeira ordem, apesar de resolver o problema de oscilações espaciais indesejáveis, apresenta excessiva atenuação. Note-se que em $t = 2$ s a forma original da onda já foi completamente perdida graças às altas dissipações presentes no esquema, enquanto nos resultados obtidos com o esquema proposto ainda são possíveis identificar ao menos uma crista e uma largura de onda. Essa excessiva atenuação torna os esquemas *Upwind* impensáveis para Simulações de Grandes Escalas, a não ser que utilizados em combinação com outros esquemas menos dissipativos.

Embora não garanta soluções com limites finitos, uma alternativa de ordem mais alta que o esquema *Upwind*, e portanto, menos dissipativa, é o esquema QUICK, de segunda ordem, proposto por Leonard (1979). Se o esquema *Upwind* peca por ser muito dissipativo, o QUICK não garante estabilidade numérica, sendo que para o presente caso da placa plana, no qual grandes variações espaciais de malha são necessárias, o mesmo revelou-se inadequado uma vez que todas as tentativas de simulação acabaram divergindo após um certo número de iterações. Não obstante, considera-se a comparação entre a presente proposta e o QUICK (Fig. 6.5) ilustrativa e relevante, do ponto de vista acadêmico.

O confronto entre o esquema de forçamento proposto (f-LES) e o QUICK (Fig. 6.5), sugere que ambos apresentam, a grosso modo, as mesmas atenuações para a amplitude da onda, e aproximadamente os mesmos erros de velocidade de propagação, sendo que o QUICK apresenta um ligeiro atraso, enquanto o esquema proposto, um ligeiro avanço. No entanto, em termos de oscilações espaciais, nota-se que o QUICK de fato apresenta níveis mais elevados mesmo para esta malha regular, o que talvez explique sua não aplicabilidade às Simulações de Grandes Escalas do presente trabalho, onde malhas irregulares tornam ainda mais importante a robustez numérica.

A Figura 6.6 mostra o efeito do refinamento de malha sobre a solução obtida com o esquema proposto (f-LES) e com o esquema centrado puro (CD). A estrutura inicial exibida na Fig. 6.6 (a) é a mesma para as duas malhas, porém é descrita por um número maior de pontos, já que a malha fina ("f-LES 48" e "CD 48") possui 3 vezes mais células que a malha grossa ("f-LES 16" e "CD 16"). Observa-se que a solução obtida foi bem melhor com a malha fina, o que já era de se esperar. Em especial, nota-se como a solução obtida com o esquema proposto praticamente coincide com a solução analítica, salvo um pequeno arredondamento nas transições abruptas da forma triangular original. Isto é bem visível nos instantes de tempo $t = 1$ e $t = 2$ segundos, Fig. 6.6 (f) e (h), onde a forma prevista numericamente deve coincidir com a forma original da estrutura. De fato, verifica-se que não só a velocidade de grupo, como também a própria largura da onda foi satisfatoriamente prevista, o que não era verdade para a malha de 16 volumes de controle ("f-LES 16"). Em contraste, percebe-se na mesma figura (6.6), que o esquema centrado puro (CD) continua apresentando fortes oscilações espaciais, atraso de propagação, alargamento da largura de onda, e intensas deformações em relação à estrutura original. Se para a malha grossa, o esquema centrado apresentou atenuação similar ao modelo proposto, para a malha mais fina (48 células), sua atenuação foi significativamente maior. Convém salientar ainda que o esquema proposto não apresentou oscilações espaciais visíveis, o que não deixa de ser surpreendente, tendo em vista o baixo nível de atenuação provocado.

O efeito do parâmetro α_f sobre a solução numérica é analisado com auxílio da Fig. 6.7, novamente para a malha de 16 células. Correspondendo às expectativas, quanto menor esse parâmetro, o tempo necessário para eliminar os menores modos é maior, e, conseqüentemente, maiores são as amplitudes das oscilações espaciais. Constata-se, ainda, que diminuindo-se o valor desse parâmetro, provoca-se um pequeno atraso da propagação, diminuindo a velocidade de grupo. Em particular, para $\alpha_f \approx 0,75$, o erro na velocidade de grupo se anula, sem que com isso as oscilações espaciais sejam significativas. Nas Figs. 6.7 (f) e (h), nota-se que a forma de onda correspondente a $\alpha_f = 0,75$ tem sua crista localizada bem próximo dos locais esperados.

Ao se utilizar um valor não nulo para o parâmetro β_f , admite-se a presença de modos indesejáveis até uma determinada amplitude, ditada pelo valor do referido parâmetro, a partir da qual, a força de atenuação f começa a agir no sentido de anular as mais rápidas oscilações espaciais.

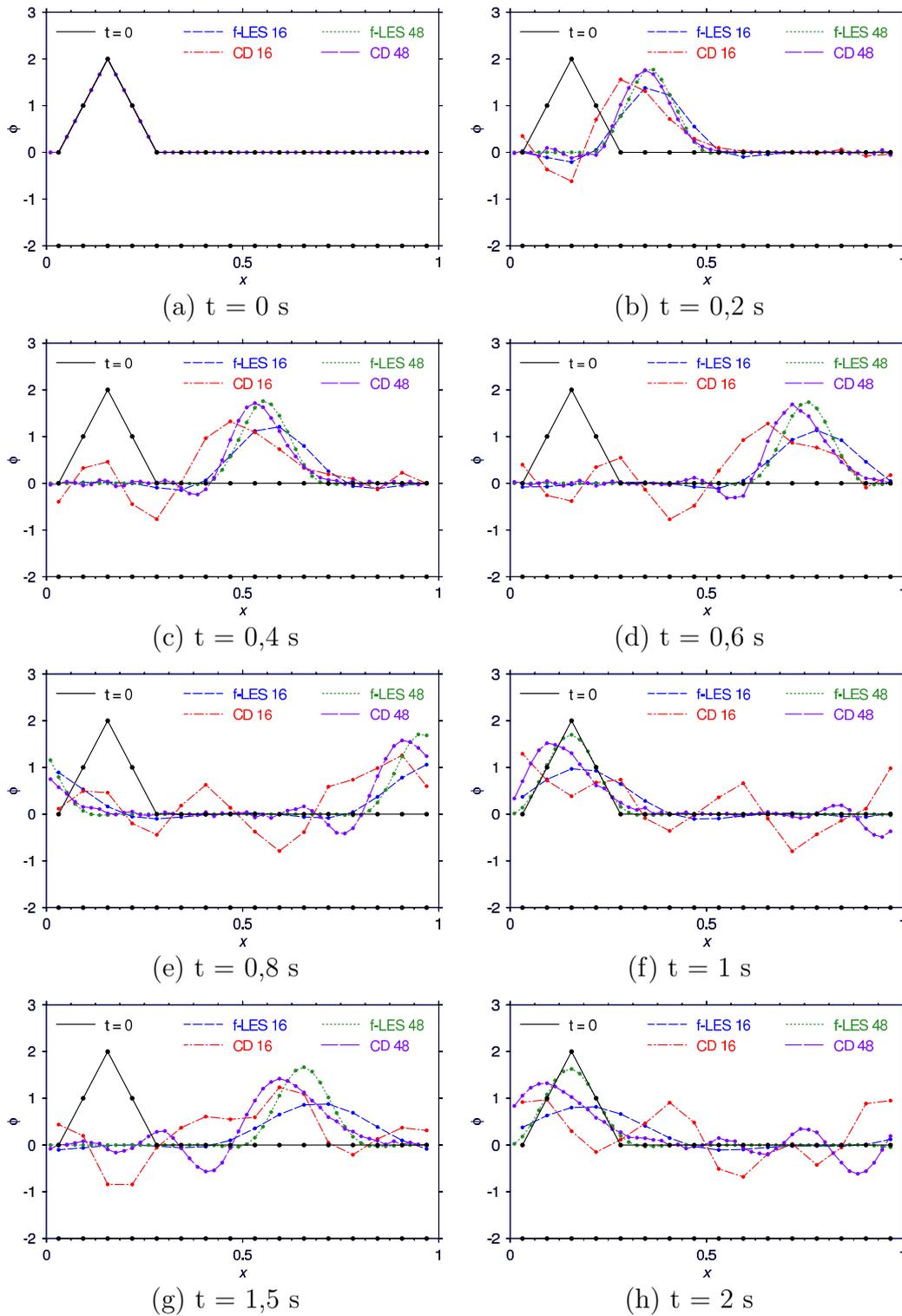


Figura 6.6: Progressão temporal de uma estrutura relativamente suave, de acordo com o modelo proposto (f-LES), com $\beta_f = 0$, e $\alpha_f = 1$, e com esquema centrado (CD), para duas malhas diferentes

Quanto maior o valor de β_f , maiores os níveis de amplitude permitidos para os modos indesejáveis, e mais próximo do esquema centrado é a previsão numérica. A Figura 6.8 mostra a evolução da mesma forma de onda inicial,

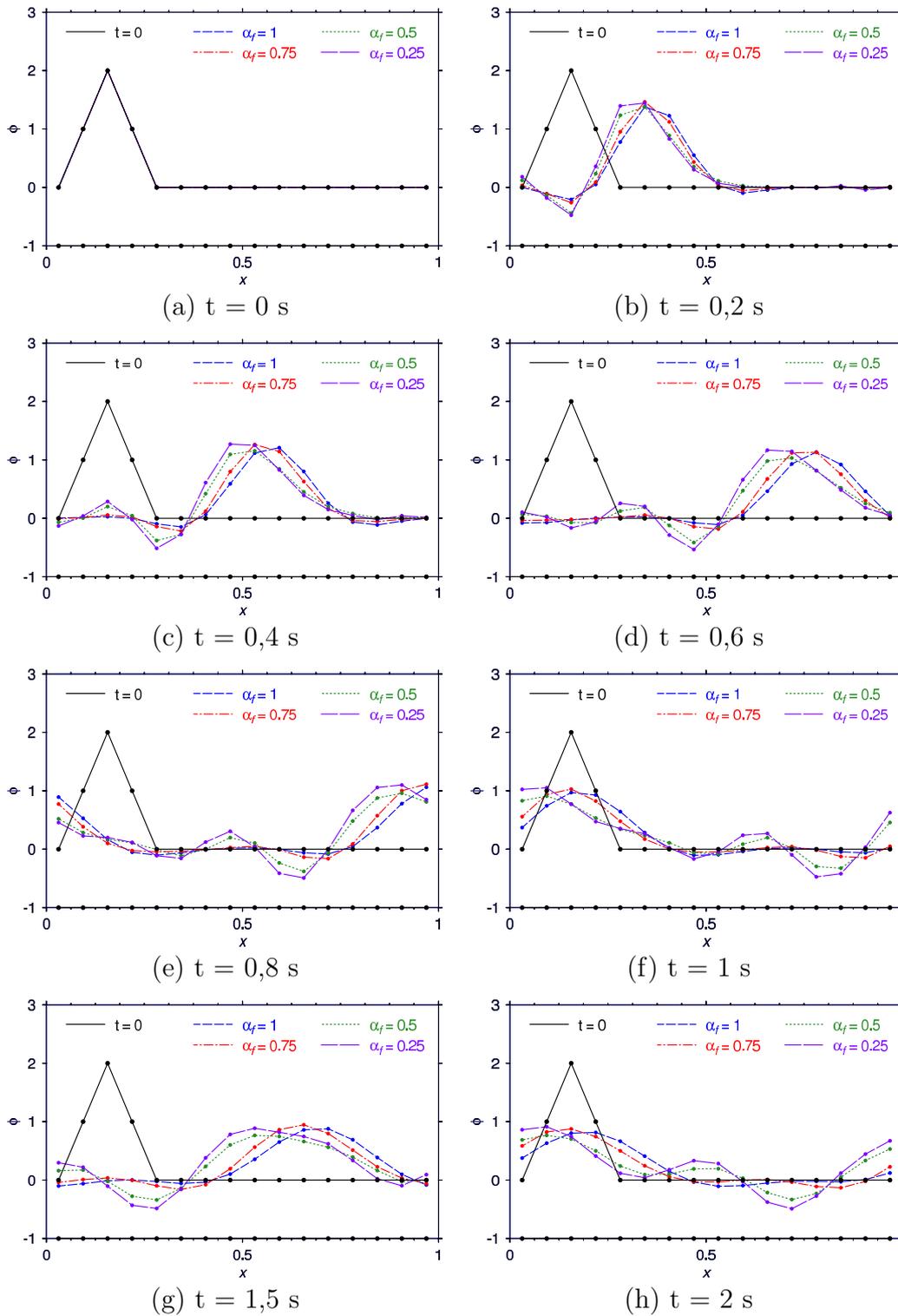


Figura 6.7: Progressão temporal de uma estrutura desejável de acordo com o modelo proposto, com $\beta_f = 0$, comparando-se $\alpha_f = 1$, $\alpha_f = 0,75$, $\alpha_f = 0,5$, e $\alpha_f = 0,25$.

na qual se pode constatar a presença de modos indesejáveis (oscilações rápidas). O valor $\beta_f = 10$ é exagerado e foi escolhido apenas para facilitar a visualização dos modos indesejáveis, os quais, aqui, aparecem normalmente

sobrepostos a um modo suave.

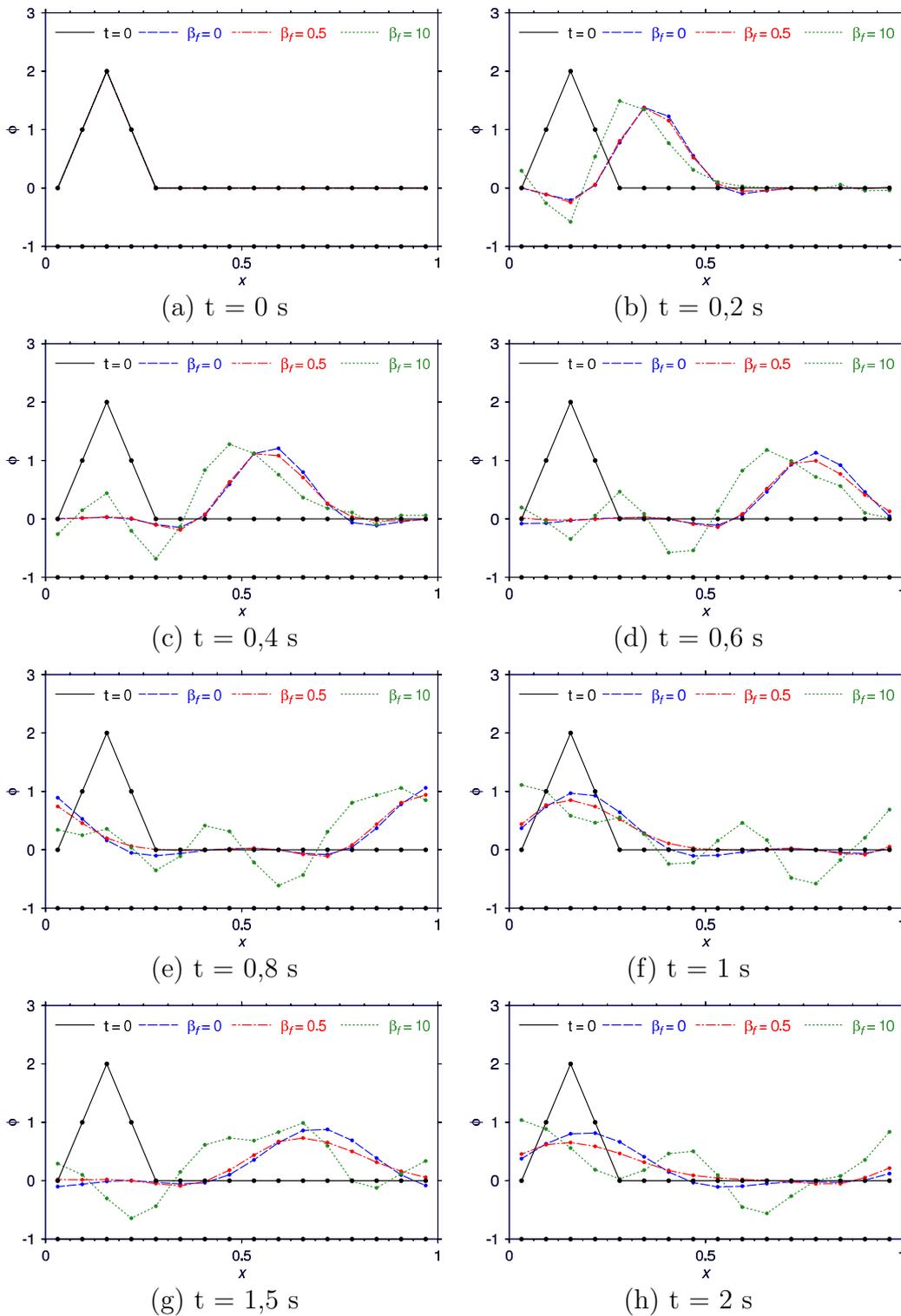


Figura 6.8: Progressão temporal de uma estrutura relativamente suave, de acordo com o modelo proposto, com $\alpha_f = 1$, comparando-se resultados obtidos com $\beta_f = 0$, $\beta_f = 0,5$ e $\beta_f = 10$

Observe-se também na Fig. 6.8 que o comportamento da solução com o parâmetro $\beta_f = 10$ exibe distorções semelhantes às apresentadas pelo

esquema CD, o que já era de esperar, uma vez que no limite em que $\beta_f \rightarrow \infty$, o esquema proposto se reduz ao próprio esquema de diferenças centradas, já que o limitador é, neste caso, sempre nulo.

Na Figura 6.9, ilustra-se a atenuação de um “modo de corte”, inicialmente presente a partir $x = 0,15625$ m, utilizando-se o esquema de forçamento proposto, com $\beta_f = 1,2$, examinando-se a influência do parâmetro α_f , e comparando-se com resultados de esquemas tradicionais, como *Upwind* e QUICK.

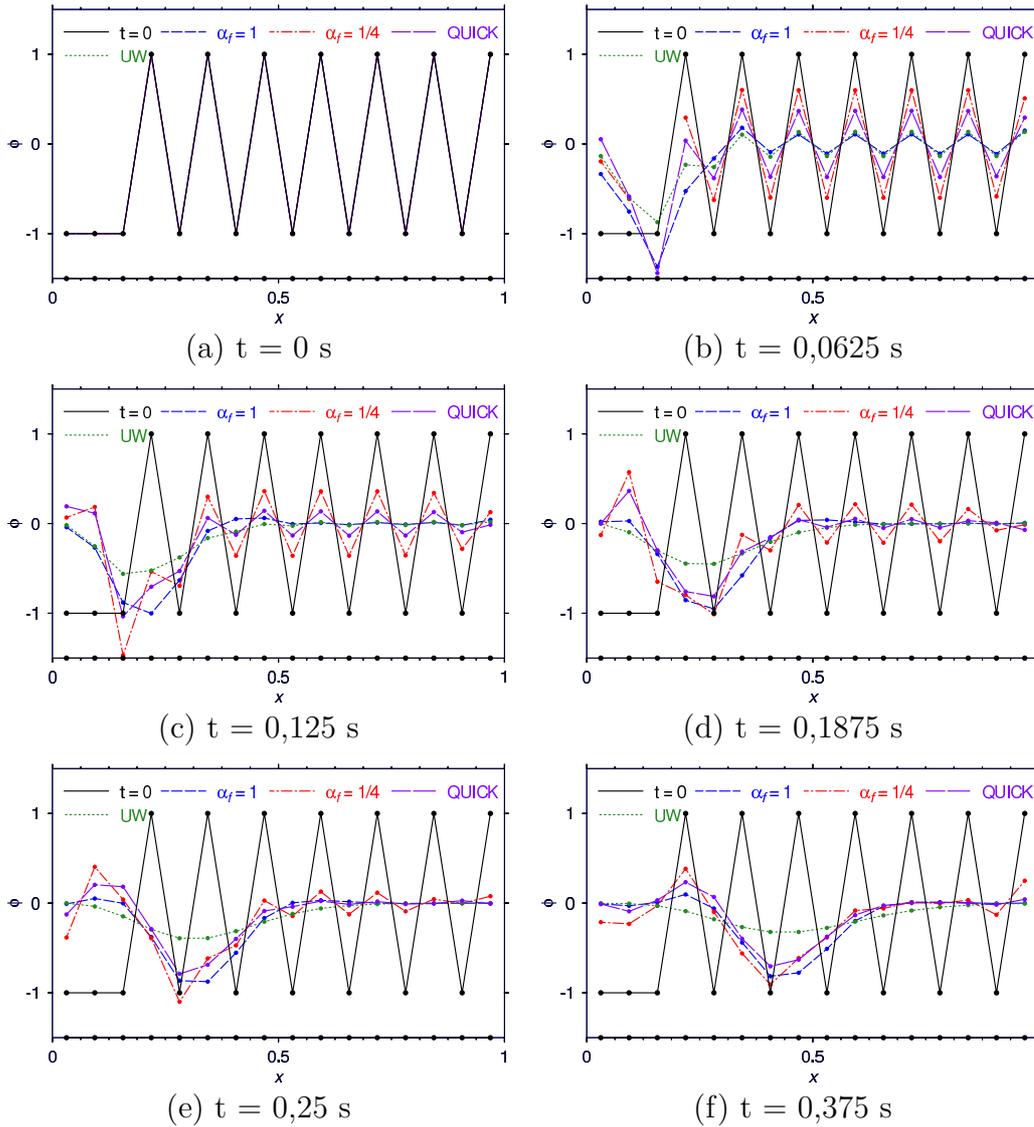


Figura 6.9: Progressão temporal de um “modo de corte” de acordo com o modelo proposto (f-LES), com $\beta_f = 1,2$, para $\alpha_f = 1$ e $\alpha_f = 0,25$, comparando-se com *Upwind* e QUICK

Nota-se, da Fig. 6.9 (b), que a atenuação obtida com $\alpha_f = 1$, após 0,0625 segundos, é equivalente à obtida com $\alpha_f = 0,25$ decorridos 0,25 segundos, Fig. 6.9 (e). Isso significa que, enquanto para $\alpha_f = 1$ uma

partícula de fluido deve percorrer um volume de controle, para $\alpha_f = 1/4$, a distância percorrida deve ser de quatro volumes de controle para que um “modo de corte” já tenha sido bem atenuado. A grosso modo, pode-se dizer que o espaço necessário para que o “modo de corte” seja eliminado é, aproximadamente, $1/\alpha_f$ vezes a largura da célula.

Ainda na mesma figura (6.9), observa-se que a atenuação provocada com $\alpha_f = 1$ é de mesma magnitude ou comparável à do esquema *Upwind*, porém, maior que a do esquema QUICK. Convém lembrar que para um modo suave ou desejável, foi constatado justamente o contrário, ou seja, que o método proposto no presente trabalho apresenta atenuação bem menor que o *Upwind*, e comparável ao QUICK. Talvez isso explique, em parte, o fato desta proposta ser mais robusta numericamente que o QUICK, porém bem mais precisa que o *Upwind*, mesclando as características desejáveis de cada uma.

Conforme mencionado anteriormente, malhas irregulares são um mal necessário em simulações de escoamentos em geral, pois acarretam erros numéricos, instabilidades, e, no caso particular de Simulações de Grandes Escalas, erros de comutatividade entre os operadores filtragem e derivadas. Embora devam ser evitadas sempre que possível, a sua utilização diminui drasticamente o número total de volumes de controle empregados, e, conseqüentemente, o custo computacional da simulação, principalmente em escoamentos externos onde as distâncias do objeto imerso para uma fronteira é grande.

Assim, faz-se necessário testar a proposta apresentada para o caso de malhas irregulares, nas quais o tamanho da célula varia ao longo do domínio. Sabe-se que a situação mais crítica para a estabilidade numérica é aquela em que o volume de controle diminui no sentido do escoamento, ou seja, o tamanho da célula é menor a jusante. Este caso é mostrado na Fig. 6.10, para o transporte de um escalar passivo num domínio periódico. Nesta figura, são comparados os desempenhos do modelo proposto f-LES (com $\beta_f = 0$ e $\alpha_f = 1$ e com $\beta_f = 2$ e $\alpha_f = 1$), do método diferenças centradas (CD) puro, e do *Upwind* (UW), através de amostras instantâneas da forma de onda em vários instantes de tempo.

Nota-se que, com o modelo proposto, principalmente com $\beta_f = 0$, a forma de onda permanece suave e ainda guarda semelhanças com a forma inicial, mesmo depois de 2 segundos decorridos. Já não se pode afirmar o mesmo para o esquema CD, onde fortes oscilações espaciais são observadas. Pela localização da crista da onda nos diversos instantes de tempo, pode-se dizer que o erro de velocidade de grupo da estrutura, para o esquema

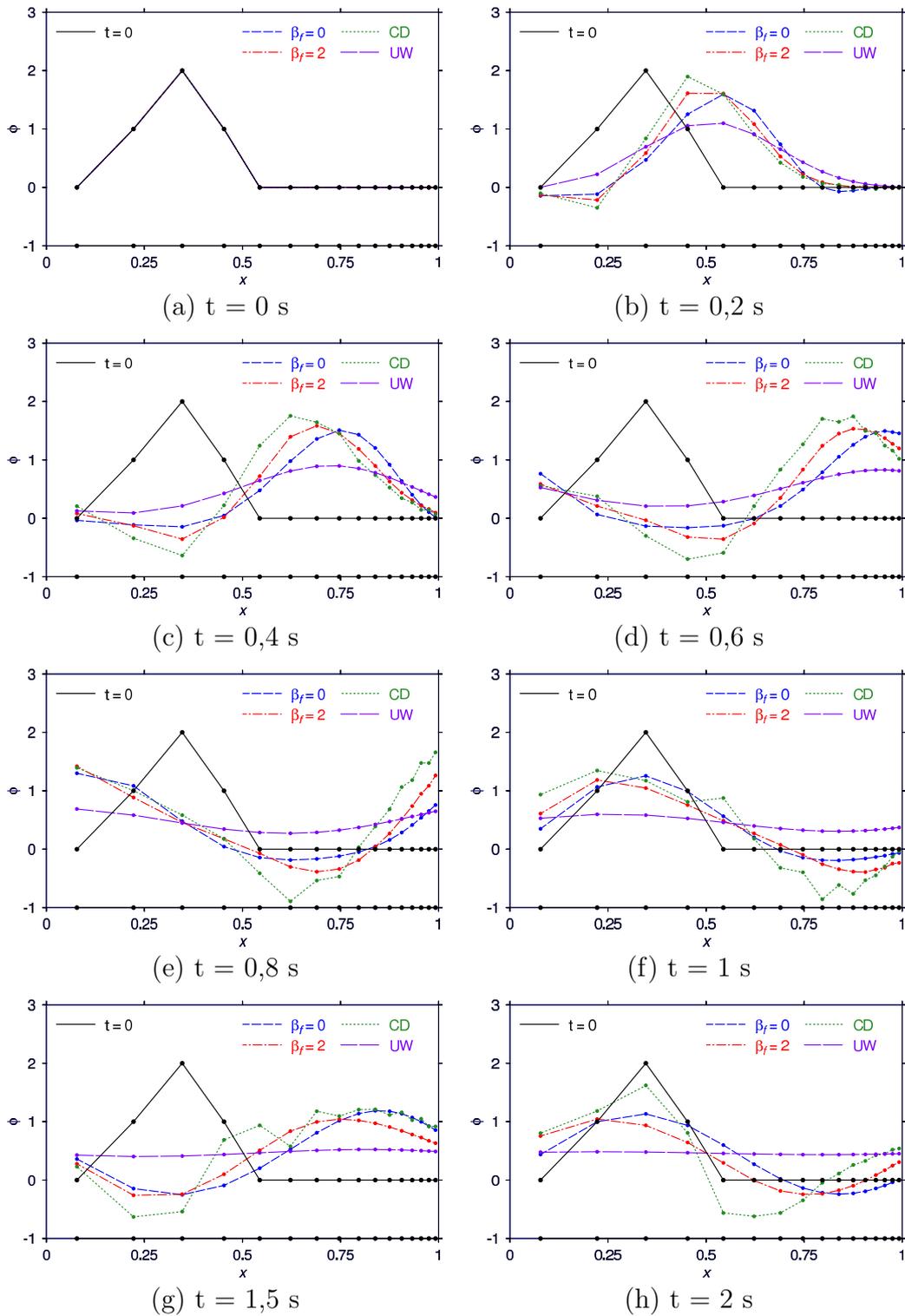


Figura 6.10: Progressão temporal de uma estrutura relativamente suave numa malha não regular, de acordo com o modelo proposto f-LES ($\alpha_f = 1$), com $\beta_f = 0$ e $\beta_f = 2$, comparando-se com os resultados obtidos com o esquema de diferenças centradas (CD) e *Upwind* (UW)

proposto, é pequeno, e comparável ao caso de malha regular. A comparação do esquema proposto f-LES com o *Upwind* é apresentada na mesma figura

(6.10), onde nota-se novamente que o *Upwind* é demasiadamente dissipativo.

A comparação dos resultados com dois diferentes valores do parâmetro β_f , apresentados também na Fig. 6.10, sugere que, com $\beta_f = 2$, além de maiores oscilações espaciais – mais visíveis nos estágios iniciais, como em $t = 0, 2$ na Fig. 6.10 (b) – o erro na previsão da velocidade de grupo é maior.

Assim, estes testes preliminares envolvendo um transporte advectivo unidimensional de um escalar passivo, apesar de simples, atestam que o esquema proposto comporta-se de forma semelhante ao esquema *Upwind* de primeira ordem perante estruturas indesejáveis, porém de forma bem menos dissipativa para estruturas mais suaves. Embora esse teste inicial não seja completo e conclusivo, pelo menos sugere que o esquema proposto pode apresentar a robustez numérica requerida para simulações mais complexas, e ainda ter um comportamento diferenciado face a estruturas indesejáveis e desejáveis, de forma a não atenuar tanto estruturas pequenas, porém, importantes para o escoamento.

6.1.2

Transporte Bidimensional de Escalar Passivo

Uma outra forma de visualizar os efeitos de dissipações numéricas é através de um escoamento bidimensional no qual um escalar passivo é transportado por convecção, a partir das fronteiras de entrada do domínio computacional, nas quais o valor desse escalar é prescrito e fixo – condição de Dirichlet. Em um determinado ponto da fronteira de entrada, esse valor prescrito apresenta um salto, passando, digamos, de valor nulo, a valor unitário na aresta seguinte da fronteira. Na ausência de dissipação numérica ou outros efeitos espúrios, esta descontinuidade deve se propagar para o interior do domínio, sem sofrer nenhum processo de suavização, ou seja, o comprimento característico do salto prescrito na fronteira deve ser aproximadamente o mesmo observado no interior do domínio.

O teste aqui proposto consiste, então, de um domínio computacional quadrado, de aresta unitária (1 metro), com 20×20 subdivisões, onde a aresta inferior e a aresta esquerda são fronteiras com valores de temperatura prescrita iguais a 1 e 0, respectivamente. Nas arestas superior e direita, fronteiras de saída, impõe-se a condição de Neumann para temperatura, segundo a qual a derivada da mesma é nula. O campo de velocidade é uniforme e constante em todo domínio, de magnitude $\sqrt{2}$, formando um ângulo de 45° com a malha, no sentido do vértice inferior esquerdo do quadrado, para o superior direito. O campo de temperaturas é inicializado

com valores nulos em todo o interior do domínio, e a Eq. 6-1 é resolvida, com ϕ substituído por T , com passos de tempo de 0,005 segundos, e esquema de discretização temporal de segunda ordem (*Backward differences*). Com o passar das iterações (avanço no tempo), as informações das fronteiras, isto é, os valores prescritos de temperatura, vão sendo propagados para o interior do domínio, até alcançarem as fronteiras de saída. O tempo necessário para que uma partícula do fluido percorra o domínio, do vértice inferior esquerdo até o superior direito, é de 1 segundo, e constata-se que, passados 100 segundos (ou 100 varridas de domínio), o campo de temperatura não sofre mais modificações significativas.

A Figura 6.11 ilustra os contornos de temperatura em $t = 100$ segundos para esse caso de teste. Observa-se que o esquema de diferenças centradas (CD) é o menos dissipativo, porém apresenta algumas oscilações espaciais visíveis. O comportamento do esquema proposto f-LES, com $\beta_f = 0,5$ e $\alpha_f = 1$, apresentado na Fig. 6.11 (a), foi satisfatório, com uma dissipação numérica apenas ligeiramente superior à do esquema CD, conforme evidenciado pelo ligeiro aumento do comprimento característico da descontinuidade, à medida que se percorre o domínio na direção da corrente. O esquema QUICK tem desempenho equivalente ao esquema proposto, porém com oscilações espaciais um pouco mais visíveis, o que já não se pode dizer do *Upwind*, que, conforme sabido, é extremamente dissipativo, que é o preço pago pela ausência completa de oscilações espaciais indesejáveis e robustez numérica.

Um outro teste de pouco interesse físico, mas de certo interesse numérico, consiste na mudança de posição das condições de contorno de valor prescrito (condição de Dirichlet) para as arestas à jusante do domínio computacional. Assim, trata-se do mesmo caso de teste descrito acima, porém com condições de contorno prescritas, nas arestas superior e direita, iguais a $T=-1$ e $T=1$, respectivamente. As arestas inferior e esquerda passam a obedecer a uma condição de contorno de gradiente nulo (Neumann). A temperatura é novamente inicializada com valor nulo no interior do domínio e nas fronteiras de entrada. Devido à direção da velocidade, esperava-se que as fronteiras de saída (arestas superior e direita do quadrado) não tivessem qualquer influência sobre o escoamento, por estarem a jusante do domínio, e pelo fato de não haver termo viscoso na Eq. 6-1.

Os resultados obtidos com o presente modelo f-LES, com $\beta_f = 0,5$ e $\alpha_f = 1$ e com o esquema de diferenças centrais CD, são apresentados na Fig. 6.12, onde se pode observar que as informações das fronteiras de saída são, de alguma forma, trazidas pelo método numérico para o interior do

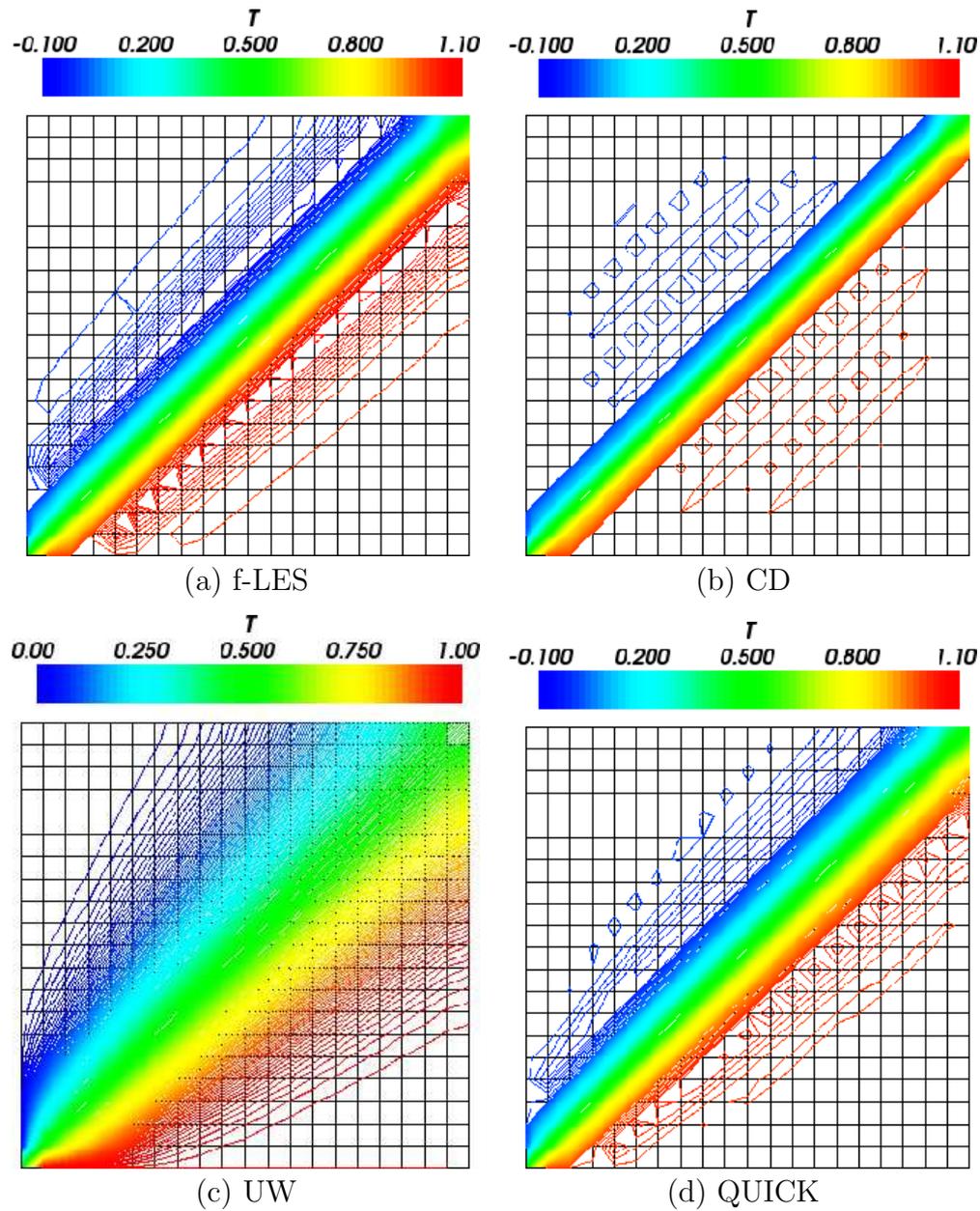


Figura 6.11: Contornos de temperatura para o transporte advectivo – condição de Dirichlet nas fronteiras de entrada e de Neumann nas de saída: (a) $\beta_f = 0,5$, $\alpha_f = 1$; (b) diferenças centradas (CD); (c) *Upwind* (UW); (d) QUICK.

domínio, contra o sentido da corrente. Isso é explicado pelas imperfeições dos esquemas numéricos, e que, de alguma forma já haviam sido observadas nos testes unidimensionais de transporte de escalar passivo ilustrados na Fig. 6.5. Tomando-se por exemplo as Figs. 6.5 (b), (c), e (d), nota-se que é atrás da crista da onda, ou seja, à montante da mesma, onde se formam as fortes oscilações espaciais espúrias, e não a jusante da mesma. A parte anterior da onda, à jusante da crista, é relativamente bem comportada. No presente caso, o domínio computacional, estando à montante das fronteiras

de valores prescritos, sofre efeitos similares aos sentidos pela parte posterior da onda da Fig. 6.5, oriundos de imperfeições dos esquemas numéricos.

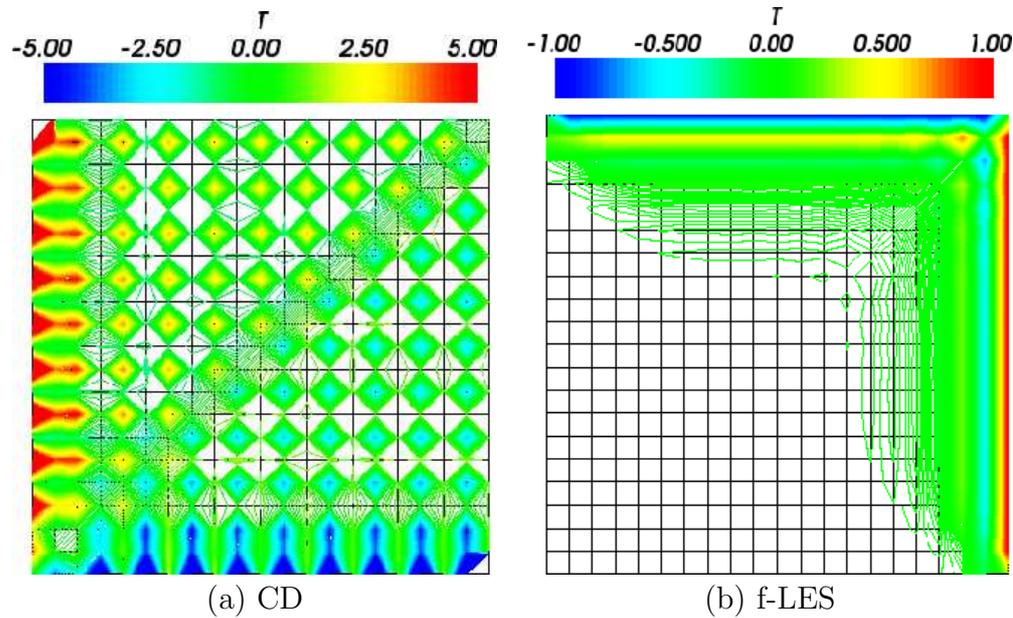


Figura 6.12: Contornos de temperatura para o transporte advectivo – condição de Dirichlet nas fronteiras de saída e de Neumann nas de entrada: (a) CD; (b) $\beta_f = 0,5$; $\alpha_f = 1$.

Apesar do regime de escoamento ser permanente, utilizou-se técnica transiente para obtenção da solução. Os valores de temperaturas locais observados no caso do esquema CD crescem indefinidamente com o avanço do tempo, enquanto os observados com o esquema proposto mantêm-se próximos aos valores iniciais, conforme esperado. Analisando a Fig. 6.12 (a), pode-se claramente observar o comportamento patológico conhecido como “tabuleiro de xadrez”, o qual não é obtido com o presente modelo. Não são reproduzidos aqui os testes com outros valores para o parâmetro β_f ($\beta_f = 0$ e $\beta_f = 1,2$), por terem apresentado resultados idênticos, ou pelo menos, com diferenças imperceptíveis em relação aos apresentados na Fig. 6.12.

Resultados similares ocorrem também quando são utilizadas condições de Dirichlet para temperatura em todas as fronteiras. Na Fig. 6.13 são apresentados os contornos de temperatura para o presente modelo f-LES com $\beta_f = 0,5$ e $\alpha_f = 1$ e para o esquema de diferenças centrais CD, onde as arestas inferior e esquerda estão a $T = 0$, enquanto a superior e direita estão a $T = -1$ e a $T = 1$, respectivamente. Observam-se os mesmos defeitos comentados acima para a Fig. 6.12, um pouco amenizados pelo limite imposto pela condição fixa de temperatura na entrada.

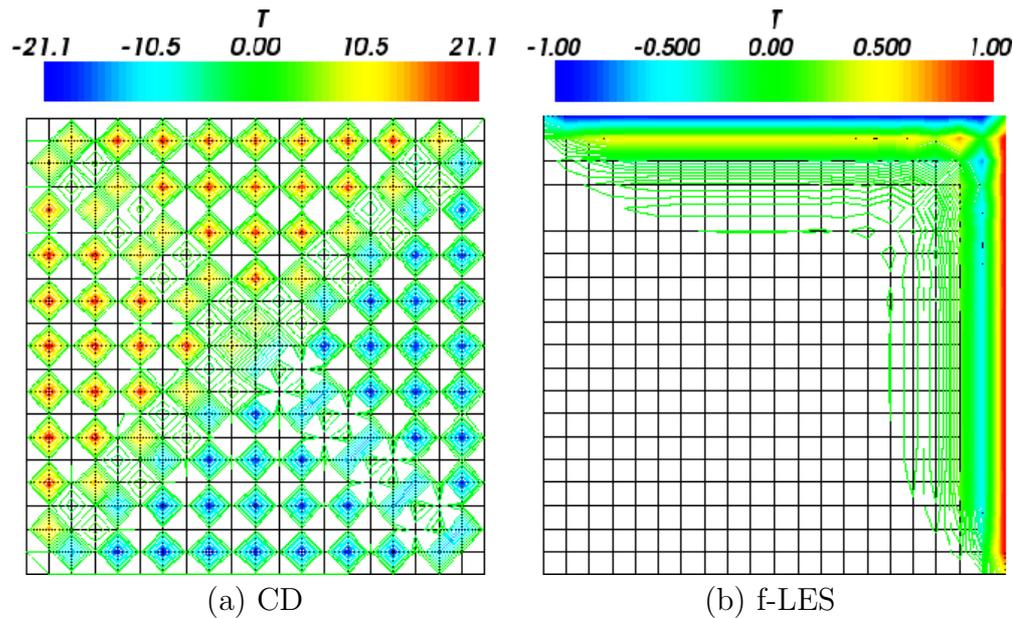


Figura 6.13: Contornos de temperatura para o transporte advectivo – condição de Dirichlet nas fronteiras de saída e nas de entrada: (a) CD; (b) $\beta_f = 0,5$, $\alpha_f = 1$.

Vale lembrar que, nas simulações de escoamentos turbulentos externos, objetivo principal do presente trabalho, há uma condição de contorno com valor prescrito no interior do domínio, à jusante de fronteiras de entrada, de forma análoga às testadas acima. De fato, a placa plana impõe condição de não deslizamento com velocidade nula, e pode provocar fortes oscilações à montante da mesma, caso não sejam tomados os devidos cuidados. Conforme sugerido nos testes acima, o esquema proposto mostrou-se, até aqui, potencialmente adequado para enfrentar os possíveis problemas numéricos previstos. Resta ainda saber como se comporta diante de situações mais próximas às reais, envolvendo, por exemplo, a não linearidade do termo advectivo da equação de Navier-Stokes, e a complexidade dos mecanismos de transferência entre as diversas escalas de um escoamento turbulento.

6.2 Turbulência Isotrópica e Homogênea

A próxima etapa dos testes de validação foi idealizada para verificar como o modelo se comporta em situações mais realistas, envolvendo escoamentos turbulentos, onde a não-linearidade do termo advectivo da equação de Navier-Stokes dá origem a uma importante interação entre estruturas de diferentes dimensões características. Para escoamentos homogêneos e isotrópicos, longe de paredes, esta interação reflete numa transferência de

energia, conhecida como cascata de energia, na qual a mesma flui das grandes para as pequenas estruturas, onde finalmente é dissipada por efeitos viscosos. Nesses casos, estruturas pertencentes a uma faixa intermediária de comprimentos de onda do espectro de energia não sofrem nenhuma influência da viscosidade molecular, sendo sua evolução ditada apenas pelos efeitos de inércia que regem a cascata de energia. O espectro de energia desta região independe de parâmetros particulares, como a viscosidade, e de acordo com as hipóteses de de Kolmogorov (1941), assume a seguinte forma universal, obedecendo à lei de $-5/3$,

$$E(k) = C \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}, \quad (6-2)$$

onde $E(k)$ é o espectro de energia em função do número de onda espacial k , ε é a dissipação, e C é uma constante. Devida à independência de parâmetros, a região do espectro de energia onde a Eq. 6-2 é válida é chamada de região inercial do espectro.

Assim, a observação do espectro resultante de simulações turbulentas, em comparação com a lei universal de $-5/3$, é a maneira mais efetiva de se verificar se o modelo proposto realmente provê uma diferenciação maior entre a atenuação provocada em modos de diferentes comprimentos de onda. Se isso for verdade, o espectro obtido com o modelo proposto deve se aproximar mais da lei universal do que outros modelos tradicionais, pelo menos na faixa de comprimentos de onda maiores, onde está depositada a maior parte da energia.

Computacionalmente, a turbulência homogênea e isotrópica numa caixa cúbica periódica é, talvez, o caso mais simples de escoamento turbulento onde as hipóteses de Kolmogorov são verificadas. Devido à ausência de paredes, não é possível, no entanto, realizar experimentos práticos desse escoamento, embora a turbulência à jusante de uma grade possa ser considerada uma boa aproximação (Comte-Bellot e Corrsin, 1966 e Mohamed e Larue, 1990).

Como não há produção natural de energia turbulenta nesse escoamento, a tendência é de que grandes vórtices inicialmente presentes transfram, ao poucos, parte de sua energia para pequenas estruturas, onde a energia é dissipada a uma taxa ε . Após um período mais longo, caso não haja injeção de energia por alguma força extra, a energia total terá decaído significativamente, até um ponto no qual o campo de velocidades será praticamente nulo.

Assim, duas alternativas são possíveis em termos de simulações de

Turbulência Homogênea e Isotrópica (HIT). Na primeira, chamada "livre decaimento da Turbulência Homogênea e Isotrópica", parte-se de um campo inicial de velocidade, com grandes estruturas energéticas, e examina-se o decaimento da energia total e das estruturas com o passar do tempo (Kaneda e Ishihara, 2003 e Hughes et al., 2001). Na segunda, chamada "Turbulência Homogênea e Isotrópica com forçamento", impõe-se uma força de corpo extra nas equações de Navier-Stokes, que atua apenas numa faixa de comprimentos de onda, próxima às menores escalas do espectro (Eswaran e Pope, 1998, e Fureby et al., 1997). Uma vez atingido uma situação de equilíbrio (estado permanente estatístico), esta força supre energia com a mesma taxa da dissipação que ocorre nas menores escalas, ε .

Esta segunda alternativa, na qual ao invés de um decaimento livre, temos uma turbulência homogênea e isotrópica sustentada, é a escolhida para o presente teste de validação, por permitir uma análise espectral em regime estatisticamente permanente.

Às equações de Navier-Stokes filtradas espacialmente, adiciona-se então uma força de corpo, $\rho \mathbf{f}_b$, resultando em

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot \tau_{SGS} = -\nabla \bar{p} + \nu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{f}_b, \quad (6-3a)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad (6-3b)$$

onde a modelagem sub-malha tradicional, $\nabla \cdot \tau_{SGS}$, é substituída por \mathbf{f} , no caso de simulações com o esquema proposto no Capítulo 5.

Fisicamente, essa força de corpo \mathbf{f}_b , que não guarda nenhuma relação com o forçamento artificial \mathbf{f} do modelo sub-malha proposto, pode ser, por exemplo, a de um campo elétrico agindo sobre um fluido carregado. Como o objetivo dessa validação é examinar a faixa inercial do espectro de energia em regime permanente, essa força de corpo deve ser aleatória (ou pseudo-aleatória) e deve estar restrita apenas às maiores escalas, de forma a não interferir com o restante do espectro, onde se pretende observar a lei de $-5/3$.

Para garantir que esta força só atue em escalas de comprimentos de onda grandes (números de onda pequenos), é mais conveniente trabalhar no espaço de números de onda, ou espaço de Fourier.

O mapeamento de uma função genérica $h(\mathbf{x}, t)$ descrita no espaço físico, para o espaço de números de onda (\mathbf{k}), no qual a mesma função é descrita por $H(\mathbf{k}, t)$, é realizado através das Transformadas de Fourier, que em três dimensões é definida pelas seguintes operações:

$$h(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} H(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}, \quad (6-4a)$$

$$H(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} h(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (6-4b)$$

onde, para simplificar a notação, os símbolos de integrais se referem a integrais triplas, nos três componentes dos vetores \mathbf{x} e \mathbf{k} . A Eq. 6-4a é denominada Transformada Inversa de Fourier, enquanto a Eq. 6-4b, Transformada Direta.

O número de onda vetorial, \mathbf{k} , é definido, a partir do comprimento de onda na direção i (λ_i), como

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{\lambda_x}, \frac{2\pi}{\lambda_y}, \frac{2\pi}{\lambda_z} \right), \quad (6-5)$$

ou, em notação indicial,

$$k_i = \frac{2\pi}{\lambda_i}. \quad (6-6)$$

As informações contidas em $H(\mathbf{k}, t)$ são tão completas quanto as contidas na própria função original, $h(\mathbf{x}, t)$, e, portanto, são suficientes para a reconstituição da mesma. Assim, no caso discreto, a mesma informação contida em \mathbf{N} pontos amostrais de uma função periódica $h(\mathbf{x}, t)$, de período $\mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)$, é também equivalentemente representada por \mathbf{N} coeficientes de Fourier, $H(\mathbf{k}, t)$, os quais são, do mesmo modo, necessariamente periódicos.

Na notação compacta utilizada neste trabalho, o vetor \mathbf{N} contém o número de amostras em cada uma das três direções, ou seja, $\mathbf{N} = (N_1, N_2, N_3)$, sendo a lista de pontos amostrais definida por:

$$\mathbf{x}_{\mathbf{m}} = \mathbf{x}_{m_1, m_2, m_3} = (m_1 \Delta x_1, m_2 \Delta x_2, m_3 \Delta x_3), \quad (6-7)$$

onde $\Delta x_i = L_i/N_i$, e m_i são números inteiros variando de $(-N_i/2)$ a $(N_i/2 - 1)$, para cada direção $i = \{1, 2, 3\}$.

As funções $h(\mathbf{x}, t)$ e $H(\mathbf{k}, t)$, amostradas nesses \mathbf{N} pontos, são também abreviadamente representadas por:

$$h_{\mathbf{m}} = h(m_1 \Delta x_1, m_2 \Delta x_2, m_3 \Delta x_3, t), \quad (6-8a)$$

$$H_{\mathbf{n}} = H(n_1 \Delta k_1, n_2 \Delta k_2, n_3 \Delta k_3, t), \quad (6-8b)$$

onde n_i e m_i são números inteiros, e Δx_i e Δk_i são os espaçamentos físicos e de número de onda em cada direção $i = \{1, 2, 3\}$.

Devido à periodicidade das funções, é suficiente restringir n_i e m_i ao intervalo $\{-N_i/2, \dots, +N_i/2 - 1\}$, com $i = \{1, 2, 3\}$, já que

$$h_{\mathbf{m}} = h_{\mathbf{m}+\mathbf{N}}, \quad (6-9a)$$

$$H_{\mathbf{n}} = H_{\mathbf{n}+\mathbf{N}}. \quad (6-9b)$$

Desta forma, os valores relevantes de \mathbf{k} , para um domínio paralelepípedo, de arestas $\mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)$, com N_i subdivisões em cada direção, abrangem uma constelação de pontos regularmente espaçados num sistema de coordenadas cartesiano, dados por:

$$\mathbf{k}_{\mathbf{n}} = \mathbf{k}_{n_1, n_2, n_3} = (n_1 \Delta k_1, n_2 \Delta k_2, n_3 \Delta k_3), \quad (6-10)$$

onde $\Delta k_i = (2\pi)/L_i$, e n_i são números inteiros variando de $(-N_i/2)$ a $(N_i/2 - 1)$, para cada direção $i = \{1, 2, 3\}$.

Assim, a resolução no espaço de números de onda, Δk_i , depende do tamanho do domínio,

$$\Delta k_i = \frac{2\pi}{L_i}, \quad (6-11)$$

enquanto o máximo valor possível de um componente do número de onda, $max(k_i)$, depende do espaçamento de malha Δx_i ,

$$max(k_i) = N_i \frac{\pi}{L_i} = \frac{\pi}{\Delta x_i}. \quad (6-12)$$

A Transformada de Fourier contínua se reduz, no caso periódico acima, à sua forma discreta, na qual o mapeamento é dado por:

$$h_{\mathbf{m}} = \sum_{\mathbf{n}} H_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_{\mathbf{m}}}, \quad (6-13a)$$

$$H_{\mathbf{n}} = \frac{1}{N_1 N_2 N_3} \sum_{\mathbf{m}} h_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_{\mathbf{m}}}. \quad (6-13b)$$

Uma facilidade do espaço de Fourier, particular das equações que

regem escoamentos incompressíveis, é que, aplicando-se as Eqs. 6-13 à equação de conservação de massa,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6-14)$$

obtém-se simplesmente

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (6-15)$$

onde \mathbf{U} é a transformada de \mathbf{u} , sendo que a Eq. 6-15 deve ser satisfeita para todos os números de onda, seja do domínio contínuo ou discreto.

Percebe-se outra vantagem de se trabalhar no espaço de Fourier quando se torna necessário restringir determinada função a uma faixa de escalas. Enquanto no espaço físico isto não é trivial, no espaço de número de ondas, basta anular tal função para \mathbf{k} fora dos limites previamente estipulados. Isto será aplicado, logo a seguir, para o termo de forçamento da Turbulência Homogênea e Isotrópica, \mathbf{f}_b .

Adota-se, então, o forçamento proposto por Eswaran e Pope (1988), onde o forçamento é dado, no espaço de Fourier, por

$$\mathbf{F}_b(\mathbf{k}, t) = \mathbf{P}(\mathbf{k}) \mathbf{w}(\mathbf{k}, t) \Theta(\mathbf{k}), \quad (6-16a)$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \mathbf{I} - |\mathbf{k}|^{-2} (\mathbf{k} \mathbf{k}), \quad (6-16b)$$

sendo t o instante de tempo, \mathbf{I} o tensor identidade, e $\mathbf{P}(\mathbf{k})$, um operador que projeta o campo resultante no espaço de funções que satisfazem divergência nula. $\Theta(\mathbf{k})$ restringe a faixa de atuação do forçamento e $\mathbf{w}(\mathbf{k}, t)$ é um processo aleatório, a ser definido posteriormente.

A fim de se garantir que o forçamento só atue numa faixa de frequências espaciais, a função unitária $\Theta(\mathbf{k})$, se anula para números de onda não pertencentes a um intervalo definido por um limite inferior, k_{INF} , e um superior, k_{SUP} , da seguinte forma:

$$\Theta(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1 & \text{para } |\mathbf{k}| \in [k_{INF}, k_{SUP}]; \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6-17)$$

Na Eq. 6-16, $\mathbf{w}(\mathbf{k}, t)$ é definido como um processo Uhlenbeck–Ornstein de difusão estocástico (Eswaran e Pope, 1988). Este é um processo vetorial, e, por ser Gaussiano, fica completamente definido por uma média e uma

covariância, dadas respectivamente por

$$\langle \mathbf{w}(\mathbf{k}, t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad (6-18a)$$

$$\langle \mathbf{w}(\mathbf{k}, t) \mathbf{w}^*(\mathbf{k}, t + s) \rangle = 2\sigma^2 \exp(-s/T_L) \mathbf{I}, \quad (6-18b)$$

sendo T_L uma escala de decorrelação temporal do processo, σ , um parâmetro que regula a amplitude das variações, ambos arbitrariamente escolhidos e $\mathbf{w}^*(\mathbf{k}, t)$, o complexo conjugado de $\mathbf{w}(\mathbf{k}, t)$.

A Tabela 6.1 apresenta os valores para os parâmetros acima citados utilizados nas simulações desta subseção.

Tabela 6.1: Parâmetros utilizados nas simulações de turbulência homogênea e isotrópica

Parâmetro	Valor utilizado
k_{INF} (m^{-1})	7
k_{SUP} (m^{-1})	13
T_L (s)	0,1
σ (m/s^2)	48
ν (m^2/s)	0

Note que, baseado na viscosidade molecular nula, fisicamente, o número de Reynolds resultante, utilizado nesta validação, é infinito. Isto não representa nenhum problema, uma vez que os modelos sub-malha se encarregam de dissipar a energia que chega às escalas de tamanho comparável ao espaçamento de malha, de forma que o número de Reynolds efetivamente simulado é limitado.

Assim, partindo-se de um campo de velocidade nulo, a força de corpo imprime uma aceleração no fluido, de forma a excitar modos de comprimento de onda entre k_{INF} e k_{SUP} . Aos poucos, nota-se o aparecimento de grandes estruturas turbilhonares no domínio, que passam a transferir parte de sua energia para escalas menores adjacentes, e estas, por sua vez, para escalas ainda menores, dando início à formação da cascata de energia. Enquanto essa energia não chega a escalas do tamanho do comprimento de Kolmogorov (η), praticamente nenhuma energia é dissipada, e a energia total do escoamento continua crescendo. Somente quando começam a aparecer estruturas do tamanho da escala de Kolmogorov (no caso de DNS), ou do tamanho do filtro espacial (no caso de LES), os efeitos dissipativos começam a equilibrar o fornecimento de energia pela ação da força de corpo. Ao se atingir o regime permanente no sentido estatístico, a potência fornecida pela força ($\mathbf{u} \cdot \mathbf{f}_b$) se iguala, em média, à potência dissipada (ε).

Este teste foi realizado com o auxílio de uma malha de $32 \times 32 \times 32$ pontos, com um número de Courant de 0,1. O esquema de discretização espacial selecionado foi o método de diferenças centrais e para a discretização temporal utilizou-se o esquema *backward difference*, implícito, de segunda ordem.

Para avaliar as estruturas coerentes do escoamento, empregou-se o "critério Q " (Dubief e Delcayre, 2000, Lesieur et al. 2005). Segundo esse critério, a coerência dos vórtices pode ser medida pelo segundo invariante do gradiente da velocidade,

$$Q = \frac{1}{2} (\overline{S_{ij}S_{ij}} - \overline{\Omega_{ij}\Omega_{ij}}) , \quad (6-19)$$

com

$$\overline{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) , \quad \overline{\Omega_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) , \quad (6-20)$$

sendo consideradas coerentes as estruturas nas quais o valor de Q excede determinado limite positivo, arbitrariamente escolhido.

A Figura 6.14 ilustra a formação das estruturas coerentes obtida usando-se o modelo proposto no Capítulo 5, através do campo de Q . Pode-se observar grandes estruturas coerentes nos instantes iniciais e a formação gradativa de estruturas menores, à medida que se avança no tempo.

Para realizar a análise espectral em regime permanente do escoamento, determinou-se a evolução temporal da potência dissipada (ε) utilizando-se o modelo tradicional de Smagorinsky dinâmico,

$$\varepsilon_{Smag} = \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \tau_{SGS}) \quad (6-21)$$

e o modelo proposto no presente trabalho,

$$\varepsilon_{f-LES} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} , \quad (6-22)$$

A Fig. 6.15(a) corresponde à solução obtida ao empregar o modelo tradicional de Smagorinsky dinâmico. Nesta mesma figura, quantificou-se também qual seria a cada instante de tempo o valor da potência dissipada, a partir do termo de forçamento, de acordo com a Eq. 6-22. Já a Fig. 6.15(b) representa a solução obtida com o modelo proposto, especificando-se $\alpha_f = 1,2$ e $\beta_f = 1$. Neste caso, o valor de dissipação que seria obtida ao se utilizar o tensor de sub-malha, Eq. 6-21 também foi apresentado. A comparação direta entre a taxa de dissipação prevista utilizando-se os dois modelos (sub-malha tradicional e proposto) é apresentada na Fig. 6.16

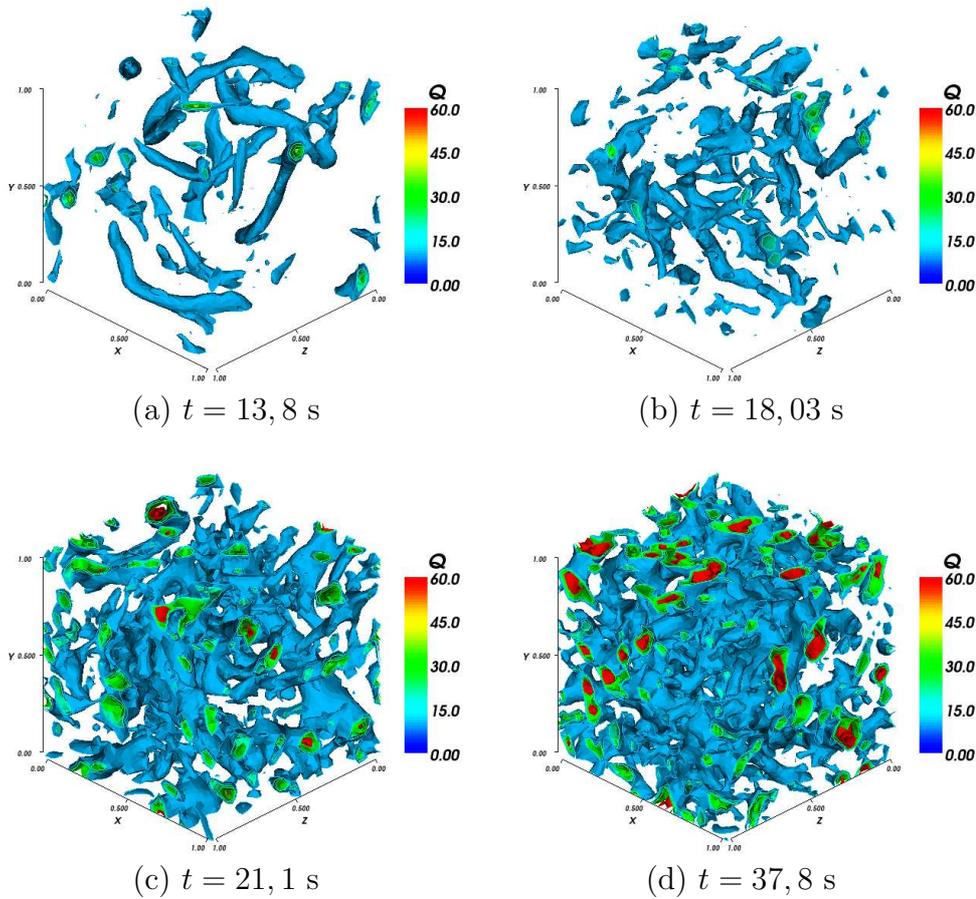


Figura 6.14: Evolução das estruturas coerentes.

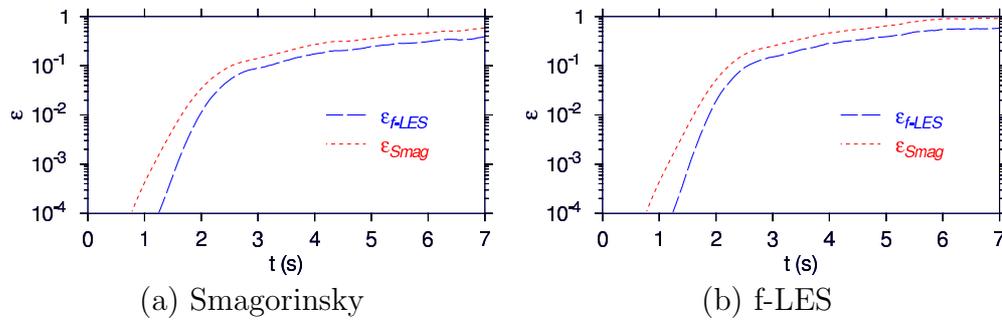


Figura 6.15: Evolução temporal da taxa de dissipação de energia turbulenta: (a) Smagorinsky; (b) f-LES.

É fácil notar nas Figuras 6.15 e 6.16 que, inicialmente, a dissipação de energia é pequena e que, somente após um intervalo de tempo, quando as estruturas de comprimento comparável ao espaçamento de malha são formadas, esta começa a ser importante. Das mesmas figuras, fica evidente que, para o modelo tradicional baseado em viscosidade turbilhonar, no caso, o de Smagorinsky, a dissipação começa a ter efeito antes do que para o modelo proposto. Isso pode significar que o tamanho das estruturas sobre

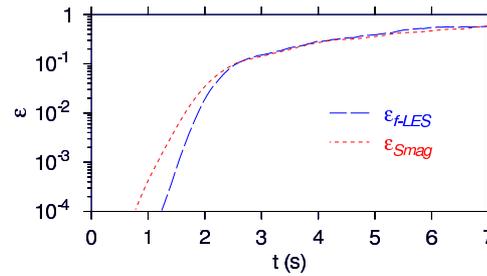


Figura 6.16: Comparação direta entre as dissipações num escoamento previsto com o modelo sub-malha tradicional e com o proposto

as quais a força dissipativa proposta atua é menor do que para o caso de se utilizar o modelo tradicional, o que está de acordo com os objetivos traçados. Além disso, nota-se ainda que a derivada da taxa de dissipação em relação ao tempo é maior para o modelo proposto, o que reforça a idéia de que a diferenciação entre estruturas grandes e pequenas é, também, mais acentuada.

Uma série de resultados são mostrados a seguir, para entender como os parâmetros α_f e β_f influenciam o espectro de energia resultante dos escoamentos turbulentos. Para efeitos de comparação, em todas as figuras que se seguem, são apresentados também o espectro de Kolmogorov (lei de $-5/3$) e o obtido com o modelo de Smagorinsky dinâmico, identificado como “dynSmag”. No total, foram realizadas 25 simulações, com todas as combinações possíveis de $\alpha_f = \{1; 0,75; 0,5; 0,25; 0,125\}$ e $\beta_f = \{0; 0,5; 1,2; 2; 4\}$.

Desta forma, as Fig. 6.17 ilustram, para cada valor de β_f , a influência de α_f na distribuição espectral de energia. Observa-se que o modelo tradicional de Smagorinsky dinâmico apresenta um comportamento razoável para o decaimento de energia, próximo a $-5/3$, para os grandes turbilhões (pequenos comprimentos de onda). Como esperado, uma queda mais acentuada é obtida para os pequenos turbilhões, pois é nessa escala que a energia é dissipada. O modelo proposto também apresenta um comportamento razoável para uma gama de combinações dos parâmetros α_f e β_f . Observa-se ainda que existem diversas combinações dos parâmetros α_f e β_f que resultam num decaimento de energia mais próximo ao esperado de $-5/3$ do que o modelo tradicional. No entanto, analisando-se as Fig. 6.17, percebe-se que quanto menor for o valor de α_f , maiores são os níveis de energia nas altas frequências. Como consequência, constata-se uma redução da energia dos grandes turbilhões e uma inclinação do espectro ainda mais negativa que a lei de $-5/3$. Observa-se ainda muita dissipação nas pequenas escalas, provocada por um valor de α_f desnecessariamente alto, o que se reflete num acúmulo de energia nas grandes escalas, acima do esperado pela lei de $-5/3$.

Estes efeitos não são desejáveis, e não ocorreriam se o esquema numérico base de diferenças centrais não fosse dispersivo.

Nas Figuras 6.18 é examinado o efeito de variações do parâmetro β_f , para cada α_f fixado. Nota-se que um aumento do valor de β_f tem efeitos análogos a diminuições em α_f , analisados anteriormente. Isso é compreensível pois, enquanto β_f determina a partir de que amplitude uma estrutura pequena é considerada indesejável, α_f regula quão rápida é a atenuação dos modos identificados como tal. Sendo assim, tanto um aumento em β_f quanto uma diminuição em α_f resultam em maiores tolerâncias e, conseqüentemente, maiores amplitudes para as menores estruturas, o que é comprovado nas Fig. 6.18.

De acordo, com o apresentado, observa-se que para cada valor de β_f , há um valor de α_f que otimiza o decaimento do espectro de energia, de forma que existem várias combinações desses dois parâmetros capazes de reproduzir o espectro de Kolmogorov. Na Figura 6.19 são mostradas apenas cinco dessas combinações ótimas. Nota-se que, para os valores otimizados selecionados, os espectros resultantes se aproximam bastante da lei de $-5/3$, sendo superiores ao espectro obtido com o modelo dinâmico.

6.3

Conclusões do Capítulo

Através de testes “estáticos” constatou-se que, como desejado, o termo de forçamento proposto realmente só age nos menores modos representáveis por uma determinada malha. Os testes dinâmicos também se mostraram satisfatórios, porém os efeitos dispersivos intrínsecos ao esquema centrado podem prejudicar o desempenho final do esquema proposto, dependendo dos parâmetros α_f e β_f adotados. De acordo com os testes realizados, pode-se concluir que uma distância de dois volumes de controle ($\alpha_f = 0,5$) é adequada para atenuar os modos indesejáveis, enquanto a dependência do espectro de energia ao parâmetro β_f não é muito significativa.

Nos testes de turbulência homogênea e isotrópica, observou-se que, para diversas combinações dos valores de α_f e β_f , os espectros resultantes reproduzem fielmente a lei de $-5/3$. O modelo proposto deveria depender totalmente da escolha dos parâmetros α_f e β_f , de tal forma que os efeitos do termo de forçamento só seriam notados nas últimas freqüências observáveis, enquanto a maior parte do espectro permaneceria inalterada. A independência esperada destes parâmetros não ocorre devido a imperfeições inerentes aos esquemas numéricos utilizados. Acredita-se que um aprimora-

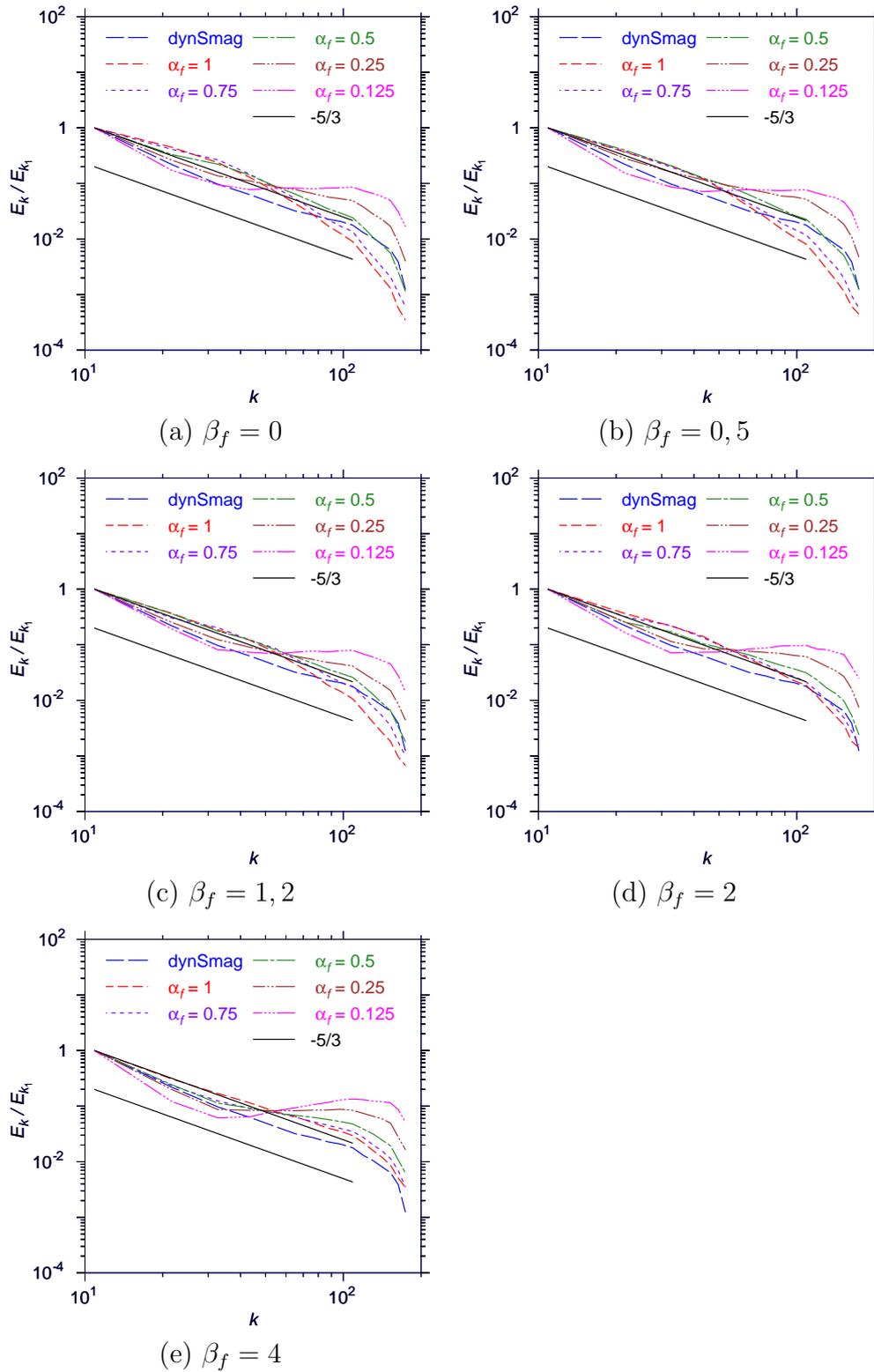


Figura 6.17: Espectros da turbulência homogênea e isotrópica numa caixa periódica de 32^3 elementos: (a) $\beta_f = 0$; (b) $\beta_f = 0,5$; (c) $\beta_f = 1,2$; (d) $\beta_f = 2$; (e) $\beta_f = 4$.

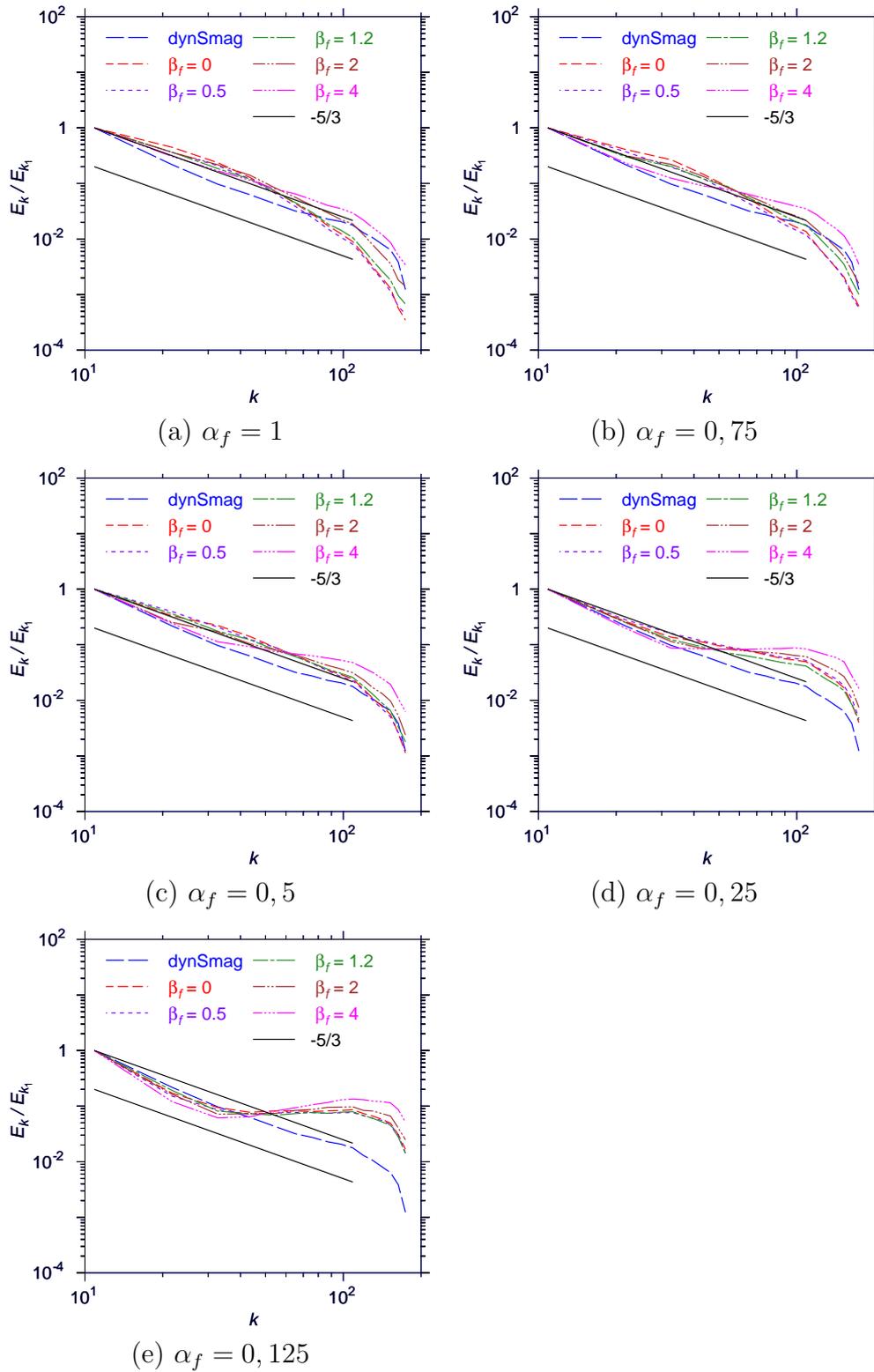


Figura 6.18: Espectros da turbulência homogênea e isotrópica numa caixa periódica de 32^3 elementos: (a) $\alpha_f = 1$; (b) $\alpha_f = 0,75$; (c) $\alpha_f = 0,5$; (d) $\alpha_f = 0,25$; (e) $\alpha_f = 0,125$.

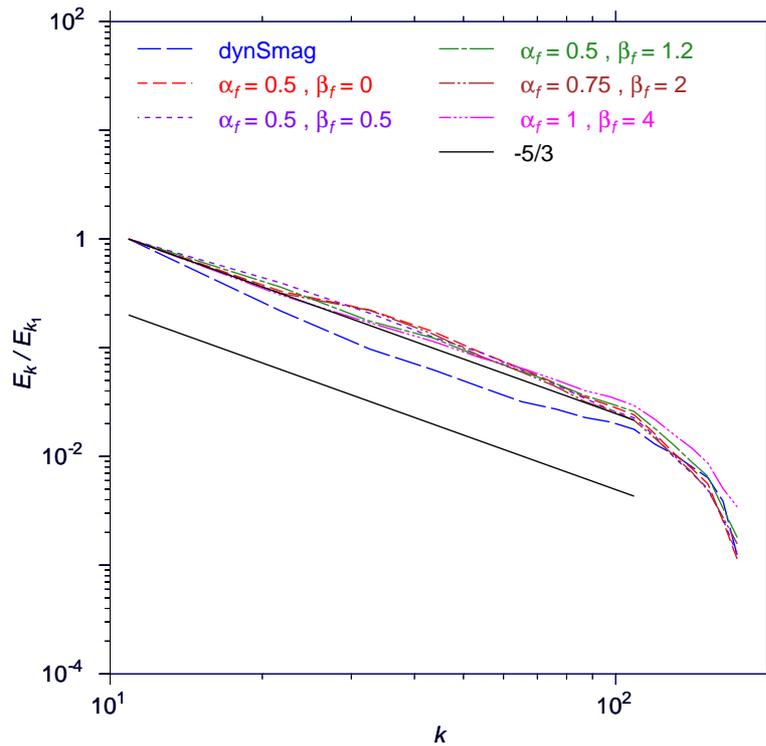


Figura 6.19: Espectros das melhores combinações entre α_f e β_f

mento dos esquemas de discretização tornará o método menos sensível ao parâmetro α_f .

O modelo de forçamento proposto foi desenvolvido para atender a dois objetivos: o primeiro visa eliminar os menores modos indesejáveis, com papel de modelos sub-malha, e o segundo, visa estabilizar a solução, especialmente ao se utilizar malhas não uniformes.

De posse dos resultados satisfatórios dos testes realizados nesta seção, onde se acredita que os dois objetivos foram atingidos, cria-se uma expectativa em torno da possibilidade de sucesso na utilização do modelo proposto em casos mais reais, a serem examinados no próximo capítulo.