

PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA

Editores

Adilandri Mércio Lobeiro

Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR
Campo Mourão, PR, Brasil

Amanda Macedo

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Adriana Fressato

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Cassius Tadeu Scarpim

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Carlos Alberto Rezende de Carvalho Junior

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Carolina Meduna

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Danilo Nakoneczny

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Janaina Rodrigues

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Liliana Madalena Gramani

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Luiz Alkimir de Lacerda

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Klaus de Geus

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Matheus Bazo Nascimento

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Marcos Arndt

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Paulo Henrique Siqueira

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Ricardo Santos

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Volmir Eugênio Wilhelm

Universidade Federal do Paraná - UFPR
Curitiba, PR, Brasil

Agradecimentos

Ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE/UFPR), por essa oportunidade e por ter sido parte fundamental da minha formação; ao Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem Ambiental (Lemma/UFPR), que por muitos anos foi minha segunda casa; a todos os professores que fizeram parte da minha formação na área de *Mecânica dos Fluidos*, e em especial ao meu orientador Marcelo Chamecki, que com muita paciência e dedicação me ensinou tudo que sei sobre *Large Eddy Simulation*.

Conteúdo

Prefácio	ix
1 Introdução	1
1.1 Uma breve introdução aos escoamentos turbulentos	1
1.2 Simulação de escoamentos turbulentos	5
2 <i>Direct Numerical Simulation</i>	7
2.1 Escoamentos homogêneos e isotrópicos	8
2.1.1 O método pseudo-espectral	8
2.2 Escoamentos não-homogêneos	9
2.3 Custo computacional	10
3 <i>Large-Eddy Simulation</i>	11
3.1 Introdução	11
3.2 Filtragem	12
3.3 A equação de Navier-Stokes filtrada	14
3.4 O tensor de cisalhamento residual	15
3.4.1 O modelo de Smagorinsky	15
3.4.2 O modelo dinâmico	16
3.4.3 Considerações finais em modelos <i>subgrid</i>	17
3.5 Solução da equação de Navier-Stokes filtrada	17
3.6 Exemplos	18
3.6.1 Simulação do transporte de partículas na atmosfera [6]	18
3.6.2 Simulação de campo de usina eólica [14]	18
3.6.3 Simulação de pluma de óleo emitida no oceano [2, 15]	18

Prefácio

A grande maioria dos escoamentos naturais e industriais são turbulentos, o que torna o seu estudo de fundamental importância em diversas áreas do conhecimento, incluindo a física, a matemática, as geociências e as engenharias. Devido à falta de soluções analíticas para as equações que governam o problema, o estudo de escoamentos turbulentos é altamente dependente do uso de técnicas numéricas que permitam a representação e visualização do problema. Dentre as técnicas mais utilizadas destacam-se a *Direct Numerical Simulation* (DNS), que corresponde à solução numérica da equação de Navier-Stokes sem nenhuma aproximação (sendo, portanto, o modelo mais fiel à física do problema), e a *Large-Eddy Simulation* (LES), que “filtra” (remove) as menores escalas do escoamento, permitindo a simulação de escoamentos maiores e mais turbulentos (e portanto mais próximos da realidade). Essas duas técnicas correspondem ao escopo do presente mini-curso.

Devido à complexidade teórica e computacional do tema, o estudo completo de DNS e LES requer, no mínimo, uma carga horária equivalente a uma disciplina completa de pós-graduação. O presente mini-curso se limita a uma apresentação introdutória do tema, com o objetivo de proporcionar aos participantes o conhecimento necessário ao aprofundamento no tema e à tomada de decisão sobre o uso das técnicas em suas atividades de pesquisa. Com esse objetivo em mente, esse mini-curso se propõe a introduzir os principais conceitos, nomenclaturas e referências bibliográficas da área.

O material didático apresentado a seguir foi desenvolvido com foco apenas no mini-curso, sendo necessária a busca de referência mais completas para demais fins. Ele foi altamente baseado na segunda parte do livro *Turbulent Flows* de Stephen B. Pope [12], e está dividido em três capítulos. O primeiro capítulo apresenta uma breve introdução aos escoamentos turbulentos, incluindo sua descrição matemática e física. A representação computacional de escoamentos turbulentos é discutida, explicitando as diferenças entre DNS, LES e os modelos que simulam a velocidade média dos escoamentos turbulentos. Os dois capítulos seguintes descrevem, de maneira introdutória, alguns dos detalhes mais importantes dos modelos DNS e LES.

Curitiba, 18 de Agosto de 2018.

Livia S. Freire

Capítulo 1

Introdução

“Turbulência é o último grande problema não resolvido da física clássica.”

Sommerfeld, Einstein e Feynman

1.1 Uma breve introdução aos escoamentos turbulentos

O ponto de partida do estudo de escoamentos turbulentos está na aplicação da segunda lei de Newton a um fluido, resultando em uma equação de balanço de quantidade de movimento. Essa equação vetorial, conhecida como equação de Navier-Stokes, pode ser escrita de diversas maneiras dependendo do problema e das forças envolvidas. Aqui será utilizada a sua forma mais simples, observando que as técnicas descritas nos próximos capítulos também são válidas para diferentes versões da equação (o que em algumas situações requer adaptações ao tratamento computacional). A equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis pode ser escrita como

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (1.1.1)$$

onde $u_i(x_i, t)$ e $p(x_i, t)$ são o vetor velocidade e pressão do fluido em um ponto do espaço x_i (ou \mathbf{x}) e no tempo t , e ρ e ν são a densidade e a viscosidade cinemática do fluido, respectivamente. O lado esquerdo dessa equação representa a aceleração do fluido, e o lado direito representa a soma das forças atuando no fluido por unidade de massa, sendo o primeiro termo correspondente à força devido ao gradiente de pressão (responsável pela aceleração do fluido), e o segundo termo correspondente à difusão de quantidade de movimento devido à viscosidade molecular.

Como a equação vetorial (1.1.1) possui 4 incógnitas (três componentes de velocidade e pressão), é necessário utilizar a lei de conservação de massa para fechar o sistema. Para um fluido incompressível, ela pode ser escrita como

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1.1.2)$$

isto é, o campo de velocidade é não-divergente. É comum reescrever o sistema de equações (1.1.1) e (1.1.2) de forma a obter uma equação de Poisson para a pressão:

$$\frac{1}{\rho} \nabla^2 p = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \quad (1.1.3)$$

Essa equação é obtida através da manipulação algébrica do divergente da equação (1.1.1), simplificada pela equação (1.1.2) [12, p. 19]. A solução da equação (1.1.3),

$$p(\mathbf{x}) = \frac{\rho}{4\pi} \int \int \int \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{d\mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (1.1.4)$$

revela características importantes dos escoamentos incompressíveis: em primeiro lugar, a pressão tem o papel de impor a condição de incompressibilidade ao escoamento, ou seja, do ponto de vista numérico o termo de pressão serve como uma correção ao campo de velocidade, garantindo a sua característica não-divergente ao longo do tempo [12, p. 38]. Em segundo lugar, por ser uma integral no espaço do campo de velocidade, a pressão é uma variável não-local, ou seja, tudo que acontece em um ponto do fluido impacta todo o campo de pressão. Isso é uma consequência da propagação das ondas mecânicas de pressão, que em um fluido incompressível viajam com velocidade infinita [3, p. 18]. Esse efeito é particularmente relevante em escoamentos turbulentos, já que este se caracteriza por um escoamento cheio de “perturbações” locais, com efeitos não-locais.

Em um escoamento incompressível, as equações (1.1.1) e (1.1.2) descrevem totalmente o problema, e de certa forma elas também nos dizem se o escoamento é laminar ou turbulento (e o quanto ele é turbulento). Para isso, a equação (1.1.1) deve ser adimensionalizada utilizando escalas de velocidade U e comprimento L características do escoamento (por exemplo, a velocidade média do fluido e a altura do domínio). Definindo as variáveis adimensionais

$$u_i^* = \frac{u_i}{U}, \quad (1.1.5)$$

$$x_i^* = \frac{x_i}{L}, \quad (1.1.6)$$

$$t^* = t \frac{U}{L}, \quad (1.1.7)$$

a equação de Navier-Stokes pode ser reescrita como

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + u_j^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} = -\frac{1}{U^2 \rho} \frac{\partial p}{\partial x_i^*} + \frac{\nu}{UL} \frac{\partial^2 u_i^*}{\partial x_j^* \partial x_j^*}. \quad (1.1.8)$$

Note que se as escalas escolhidas forem realmente representativas do escoamento, todos os termos do lado esquerdo da equação (1.1.8) serão de ordem 1. O último termo do lado direito, que representa a difusão de quantidade de movimento devido à viscosidade molecular do fluido, será de ordem $\nu/(UL)$. Por sua importância, esse coeficiente recebe um especial: $Re = UL/\nu$ é o número de Reynolds, em homenagem ao matemático e engenheiro Osborne Reynolds [4]. O número de Reynolds é definido como a razão entre as forças inerciais e viscosas do escoamento, e portanto representa a capacidade das forças viscosas em “dissolver” perturbações, comparada à capacidade da perturbação em “crescer” devido à inércia do escoamento (representada pelos termos do lado esquerdo da equação). Em outras palavras, qualquer perturbação no escoamento vai sofrer o efeito competitivo entre as forças inerciais (de ordem 1) e as forças viscosas (de ordem $1/Re$). Quando as forças viscosas “ganham” ($Re \lesssim 1$) o escoamento é laminar; quando as forças viscosas “perdem” ($Re \gg 1$) o escoamento se torna turbulento, sendo a intensidade da turbulência proporcional ao número de Reynolds.

Vamos fazer agora um exercício mental: imagine um escoamento ao longo de um canal de 1 m de altura ($L = 1$ m). Se o escoamento possuir uma velocidade média U tal que $Re = UL/\nu \sim 1$, então o escoamento é laminar. Isso significa que qualquer perturbação será rapidamente “espalhada” e “dissipada” pelas forças viscosas. Se a velocidade do escoamento for aumentada em 1000 vezes, teremos $Re \sim 1000$ e a viscosidade não mais será

capaz de eliminar todas as perturbações. Nessas condições, a diferença de velocidade entre a parede e o meio do canal, por exemplo, poderá criar uma perturbação no formato de um vórtice, que por inércia se “desenvolverá”, podendo “quebrar” em vórtices menores e gerar um escoamento com comportamento aleatório e caótico; nesse momento o escoamento será turbulento.

As escalas de velocidade e comprimento escolhidas para adimensionalizar a equação de Navier-Stokes aparecem quase sempre na forma U/L , representando a ordem de grandeza do gradiente de velocidade do canal como um todo, já que a velocidade do fluido na parede do canal é zero e a velocidade no topo do canal é na ordem de U (veja Figura 1.1). Se imaginarmos as perturbações como vórtices, as escalas U e L podem ser consideradas como a velocidade e o tamanho dos maiores vórtices que se formam no escoamento, aproximadamente. Podemos também imaginar que cada vórtice do escoamento possui uma escala de velocidade e de comprimento que os representam. Note, entretanto, que esse conceito de vórtice é mais auxiliar do que físico: enquanto escoamentos na transição entre laminar e turbulento formam vórtices visíveis (Figura 1.2, lado esquerdo), escoamentos turbulentos são altamente caóticos, não apresentando formas bem definidas (Figura 1.2, lado direito).

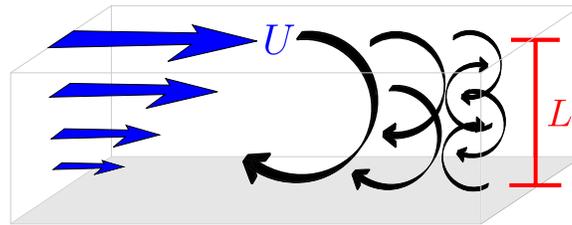


Figura 1.1: Ilustração do escoamento em canais: as escalas de velocidade e comprimento U e L correspondem à velocidade no topo do canal e à altura do canal, respectivamente.

Com esse conceito de escalas de vórtices em mente, é possível reescrever a equação de Navier-Stokes adimensional utilizando outras escalas de velocidade e comprimento, v e η por exemplo, resultando em uma equação semelhante à equação (1.1.8) porém com outro número de Reynolds ($Re_\eta = v\eta/\nu$). Se v e η são a velocidade e o comprimento característicos de vórtices turbulentos, temos que os vórtices cujo $Re_\eta \sim 1$ são rapidamente dissipados pela viscosidade. Ou seja, as escalas v e η correspondentes a $Re_\eta \sim 1$ podem ser consideradas como as escalas dissipativas do escoamento. Essas escalas também recebem um nome especial: escalas de Kolmogorov, em homenagem ao matemático Andrey Kolmogorov [4]. Com essa definição, podemos concluir que quando $(U, L) \sim (v, \eta)$ o escoamento é laminar, pois $Re = UL/\nu \sim 1$; já quando $(U, L) \gg (v, \eta)$ o escoamento é turbulento ($Re = UL/\nu \gg 1$).

Até esse momento podemos listar duas relações características de escoamentos turbulentos: $Re = UL/\nu \gg 1$ e $(U, L) \gg (v, \eta)$. Essas relações nos mostram que, em escoamentos turbulentos, a energia cinética por unidade de volume do fluido ($\sim \rho U^2/2$) só será dissipada após a formação de vórtices com tamanhos na ordem da escala de Kolmogorov (η), pois é nessa escala que a dissipação atua. A transferência de energia entre as escalas L e η se dá através da *casca de energia* das maiores para as menores escalas do escoamento, um conceito primeiramente proposto pelo matemático Lewis Fry Richardson e posteriormente descrito matematicamente por Kolmogorov [4]. Em escoamentos estacionários, para que a turbulência seja mantida constante no tempo deve haver uma injeção constante de energia cinética (algo que mantenha o escoamento do canal com velocidade constante, por exemplo), que será transformada em energia da turbulência através da formação de grandes vórtices do tamanho do canal (L), que se “quebrarão” em vórtices menores numa cascata

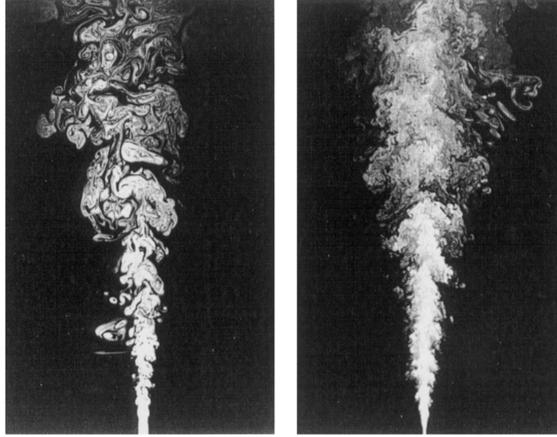


Figura 1.2: Escoamento de jato com um número de Reynolds moderado (lado esquerdo) e alto (lado direito). Adaptado de [3, p. 2] (original de Physics of Fluids e P. E. Dimotakis, California Institute of Technology).

de energia entre escalas até que sejam atingidas as escalas dissipativas do escoamento, η , onde a energia cinética será dissipada na forma de calor. Esse cenário leva à conclusão que a taxa de dissipação de energia ε deve ser igual à taxa de transferência de energia ao longo da cascata, e também igual à taxa de injeção de energia na escala L (para que o escoamento se mantenha estacionário). Por análise dimensional, sabemos que a taxa de injeção de energia na escala L é na ordem de U^3/L . A taxa de dissipação de energia é definida como

$$\varepsilon = 2\nu \langle s_{ij} s_{ij} \rangle, \quad (1.1.9)$$

onde

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.1.10)$$

é o tensor taxa de deformação e “ $\langle \ \rangle$ ” representa média. A taxa de dissipação é, portanto, na ordem de $\nu v^2/\eta^2$, por atuar nas escalas de Kolmogorov. Logo, temos que

$$\varepsilon \sim \nu \frac{v^2}{\eta^2} \sim \frac{U^3}{L}. \quad (1.1.11)$$

Essa relação, combinada com $Re_\eta = v\eta/\nu \sim 1$, pode ser reescrita como:

$$\frac{v}{U} \sim Re^{-1/4}, \quad (1.1.12)$$

$$\frac{\eta}{L} \sim Re^{-3/4}. \quad (1.1.13)$$

Logo, dado um escoamento com viscosidade cinemática ν e escalas de velocidade e comprimento U e L , é possível identificar as escalas onde a dissipação ocorrerá através das relações (1.1.12) e (1.1.13). Elas nos mostram que, quanto mais turbulento o escoamento (ou seja, quanto maior o número de Reynolds), maior a separação entre as escalas L e η . Essa informação é crucial na simulação numérica de escoamentos turbulentos.

1.2 Simulação de escoamentos turbulentos

Como lembrada na frase que abre este capítulo, o estudo de escoamentos turbulentos é um grande desafio para a comunidade científica, principalmente devido à falta de solução analítica das equações que governam o problema (equações (1.1.1) e (1.1.2)). Por esse motivo, o uso de simulações computacionais se tornou uma das principais ferramentas de estudo do fenômeno. Naturalmente, o desenvolvimento de modelos computacionais de turbulência ocorreu em paralelo ao desenvolvimento dos computadores em si, sendo inicialmente desenvolvidos modelos que apresentavam um alto grau de aproximações e simplificações, de forma a reduzir o custo computacional, enquanto que o modelo mais simples conceitualmente só foi possível de ser aplicado a partir dos anos 70, devido ao seu alto custo computacional. Aqui será seguida a ordem de simplicidade conceitual, oposta à ordem cronológica.

A forma mais direta, simples e completa de simulação de escoamentos turbulentos está na solução numérica da equação de Navier-Stokes (equações (1.1.1) e (1.1.2)), ou seja, na simulação da evolução temporal do vetor velocidade e da pressão no espaço tridimensional. Para isso, é necessário discretizar numericamente as derivadas no espaço e no tempo, propor condições iniciais e de contorno, e deixar o computador fazer o resto do trabalho. Esse procedimento, conhecido como *Direct Numerical Simulation*¹ (DNS), é relativamente simples quando se trata da simulação de escoamentos laminares, sendo necessário apenas os cuidados relacionados à estabilidade numérica. Entretanto, na simulação de escoamentos turbulentos, o custo computacional cresce com Re^3 [12, p. 336], o que restringe a técnica à escoamentos com turbulência de baixa a moderada intensidade e com domínios pequenos, muito distintos da maioria dos escoamentos de interesse prático. Esse alto custo computacional se deve ao fato de que, para uma solução correta da equação de Navier-Stokes, é necessário resolver todas as escalas do escoamento, incluindo as escalas dissipativas (escalas de Kolmogorov), que, como demonstrado anteriormente, são tão menores que o tamanho do domínio quanto maior o número de Reynolds. Em outras palavras, para que o escoamento evolua de maneira correta, é necessário que a dissipação de energia seja calculada com um baixo erro numérico, o que requer uma grade com resolução na ordem de η , de forma a permitir uma boa aproximação dos gradientes de velocidade na ordem de v/η (responsáveis pela dissipação de energia). Apesar da limitação no tamanho do domínio e na intensidade da turbulência, essa técnica tem sido muito utilizada no estudo dos problemas fundamentais da turbulência, como o decaimento de turbulência isotrópica e a evolução de escoamentos canônicos. No capítulo 2 o modelo DNS é apresentado e discutido com mais detalhes.

A necessidade de simular escoamentos com Re elevado em comparação ao atingível com DNS levou ao desenvolvimento da técnica de *Large-Eddy Simulation* (LES). Nela, uma parte significativa da turbulência (o equivalente a $\sim 80\%$ da energia) é resolvida em um domínio tri-dimensional, enquanto que as menores escalas são filtradas e o seu efeito nas escalas resolvidas é parametrizado através de um modelo *subgrid*. Com seu desenvolvimento, se tornou possível simular escoamentos realistas, como o escoamento em rios e na atmosfera, e desde então muito tem sido aprendido sobre o impacto da turbulência no transporte de matéria e energia em fluidos geofísicos e industriais. No capítulo 3 as etapas necessárias ao desenvolvimento do modelo LES são apresentadas.

Por fim, os modelos mais “leves” computacionalmente são os que simulam a velocidade média do escoamento turbulento e, em alguns casos, outras estatísticas como variância e covariância. Nesses modelos, conhecidos como *Reynolds-averaged Navier-Stokes* (RANS), o

¹Em português esse método é traduzido como Simulação Numérica Direta, enquanto que o método *Large-Eddy Simulation* é traduzido como Simulação de Grandes Vórtices. Devido à popularização das siglas em inglês DNS e LES no Brasil, no presente texto serão utilizados os nomes das técnicas em inglês.

escoamento é matematicamente separado entre a sua parte média e as flutuações em torno da média, ou seja, toda a turbulência (refletida nas flutuações) é removida da simulação, e seu efeito no escoamento médio é parametrizado através de modelos de turbulência. Apesar da “leveza” computacional, em geral esses modelos são mais complexos conceitualmente, por serem baseados na simplificação de um fenômeno tão complexo quanto a turbulência, o que muitas vezes exige muito conhecimento e criatividade. Além disso, existem diversos tipos de modelos RANS, com abordagens conceituais e numéricas das mais variadas, dependendo do problema a ser simulado. Por esse motivo, o modelo RANS está fora do escopo do presente mini-curso.

Capítulo 2

Direct Numerical Simulation

*“Grandes vórtices têm pequenos vórtices
que se alimentam de sua velocidade
e vórtices pequenos têm vórtices ainda menores
e assim vai até a viscosidade”*

Lewis F. Richardson

Direct Numerical Simulation (DNS) consiste na solução numérica da equação de Navier-Stokes sem nenhuma aproximação ou parametrização da turbulência. Para isso, todas as escalas do escoamento devem ser resolvidas, desde os vórtices do tamanho do domínio até as escalas de dissipação de energia. Cada simulação produz uma realização do escoamento, e dada a natureza caótica da turbulência os resultados devem ser analisados estatisticamente através de médias no tempo, espaço ou entre realizações. A Figura 2.1 apresenta exemplos de resultado de simulações de DNS.

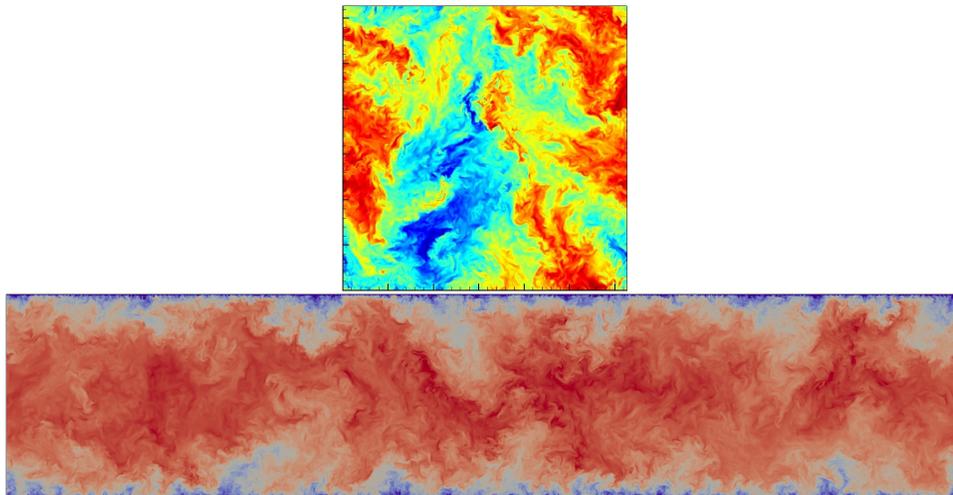


Figura 2.1: Campo de velocidade em um plano 2D de DNS de escoamento homogêneo e isotrópico, em um cubo periódico com 1024^3 pontos de grade e $Re_\lambda = 433$ (imagem superior); e escoamento em canal com $10240 \times 1536 \times 7680$ pontos de grade e $Re_\tau = 5200$ (imagem inferior). Dados, imagens e vídeo disponíveis em *Johns Hopkins University Turbulence Databases* (<http://turbulence.pha.jhu.edu/>)

Devido ao seu alto custo computacional, o DNS é tipicamente utilizado em estudos fundamentais de mecânica dos fluidos, através da simulação de escoamentos canônicos e idealizados. As primeiras simulações só foram possíveis na década de 70, e desde então muitas das teorias de turbulência tem sido descobertas e testadas utilizando DNS. A seguir, dois tipos de escoamentos canônicos são discutidos sob o ponto de vista do DNS.

2.1 Escoamentos homogêneos e isotrópicos

A turbulência é um fenômeno que, ao perder a sua fonte de energia, naturalmente decai e deixa de existir. Pense no ato de misturar açúcar no café: tornamos o líquido turbulento para acelerar o processo de mistura, mas ele volta rapidamente ao seu estado laminar ao paramos de mexer a colher. Isso se deve ao fato de que a energia da turbulência, fornecida pela rotação da colher, é transferida para a escala de Kolmogorov através da cascata de energia, quando então é dissipada pela viscosidade molecular do fluido. Logo, ao cessar a fonte de energia, a turbulência também cessa. Esse fenômeno de decaimento da turbulência foi um dos primeiros a ser estudado matematicamente [1], devido à possibilidade de se assumir condições homogêneas (quando as estatísticas do escoamento não variam no espaço) e isotrópicas (quando elas não são afetadas pela rotação do eixo de coordenadas). Como as fontes de energia tendem a tornar o escoamento não-homogêneo e não-isotrópico, é somente no fenômeno de decaimento da turbulência, após “desligar” a fonte de energia, que essas hipóteses podem ser assumidas, simplificando significativamente a matemática do problema.

Enquanto que no mundo real os escoamentos homogêneos e isotrópicos existem apenas após o “desligamento” da fonte de energia, e portanto sempre apresenta decaimento da turbulência, no “mundo computacional” é possível criar um escoamento homogêneo, isotrópico e estacionário, através de uma fonte de energia homogênea e isotrópica artificial. Esses dois tipos de escoamento homogêneo e isotrópico (em decaimento e forçado) foram os primeiros a serem investigados utilizando a técnica de DNS, devido à possibilidade de se resolver a equação de Navier-Stokes na sua forma espectral, o que aumenta a acurácia da simulação. O método numérico mais utilizado neste caso é o método pseudo-espectral, apresentado a seguir.

2.1.1 O método pseudo-espectral

Em simulações de DNS com o método pseudo-espectral, o escoamento é simulado em um domínio cúbico de lado L , e o campo de velocidade $u_i(\mathbf{x}, t)$ é representado por uma série de Fourier finita

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{u}_i(\mathbf{k}, t), \quad (2.1.1)$$

onde \mathbf{k} é o vetor número de onda e \hat{u}_i é o coeficiente ou modo de Fourier, a contrapartida da velocidade no domínio da frequência. Em uma simulação com N pontos de grade em cada direção, (ou seja, com um espaçamento $\Delta x = \Delta y = \Delta z = L/N$), N^3 números de onda são representados, sendo o menor número de onda igual a $2\pi/L$ e o maior igual a $\pi N/L$.

Um método numérico é considerado *espectral* quando ele resolve no tempo e espaço os coeficientes de Fourier \hat{u}_i , ao invés do vetor velocidade no domínio físico u_i . Para isso, é utilizada a equação de Navier-Stokes na sua forma espectral, descrita como

$$\left(\frac{d}{dt} + \nu k^2 \right) \hat{u}_i(\mathbf{k}, t) = -ik_l P_{ij}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'} \hat{u}_j(\mathbf{k}', t) \hat{u}_l(\mathbf{k} - \mathbf{k}', t), \quad (2.1.2)$$

onde $P_{ij} = \delta_{ij} - k_i k_j / k^2$ é o tensor projeção, δ_{ij} é a delta de Kronecker e k é o módulo do vetor número de onda \mathbf{k} (ou k_i). Essa equação foi obtida aplicando a transformada de Fourier no domínio do espaço. Note que a grande vantagem de se utilizar um método espectral é que a transformada de Fourier de $\partial u / \partial x$ é $ik_x \hat{u}$, ou seja, a derivada de u no domínio espectral passa a ser um produto que pode ser calculado exatamente, sem precisar de uma aproximação numérica. Logo, a equação de Navier-Stokes, que antes era uma equação diferencial parcial em (\mathbf{x}, t) , na sua forma espectral passa a ser uma equação diferencial ordinária em t , o que torna a sua solução numérica mais simples e acurada.

O termo do lado esquerdo da equação (2.1.2) é a combinação da derivada no tempo com o termo de força viscosa, e é linear em \hat{u}_i . Já o termo do lado direito é uma convolução de \hat{u}_i com ele mesmo, resultado da transformada de Fourier do termo não-linear da equação de Navier-Stokes. O lado esquerdo da equação demanda N^3 operações (uma pra cada modo); já o lado direito da equação demanda N^6 operações (N^3 operações pra cada modo), devido à soma em \mathbf{k} . Por esse motivo, o custo computacional da simulação da equação de Navier-Stokes em sua forma espectral é muito alto, motivo pela qual foi desenvolvido o método *pseudo-espectral*.

No método pseudo-espectral, o termo não-linear é calculado no domínio físico. Em cada passo de tempo, é aplicada a transformada inversa de Fourier ao modo de Fourier \hat{u} e sua derivada no espaço $ik_x \hat{u}$, quando então o termo não-linear da equação de Navier-Stokes ($u \partial u / \partial x$) é calculado, e o resultado é finalmente transformado novamente para o domínio da frequência e “devolvido” à equação de Navier-Stokes na forma espectral (substituindo a convolução). Esse método híbrido se tornou viável devido ao desenvolvimento da técnica *Fast Fourier Transform* (FFT), que realiza a transformada numérica de Fourier utilizando $N^3 \log N$ operações. Desse forma, a simulação do escoamento turbulento ganha em termos de acurácia ao custo de $N^3 \log N$ operações por passo de tempo. É necessário observar, entretanto, que há um erro de *aliasing* introduzido na transformada de Fourier do termo não-linear que deve ser removido.

Em resumo, ao se utilizar a técnica de DNS com o método pseudo-espectral, deve-se escolher as melhores estratégias de discretização da derivada no tempo, remoção dos erros de *aliasing*, e de processamento paralelo. Este último em particular é o mais desafiador, já que a transformada de Fourier requer o uso de todo o *array* $u(x)$ em suas operações, o que limita a distribuição dos cálculos entre diferentes processadores. Entretanto, atualmente há códigos disponíveis de FFT que foram otimizados para uso em processamento paralelo. Por fim, é importante ressaltar que as condições de contorno do escoamento devem ser periódicas, devido ao uso da transformada de Fourier. Uma boa revisão sobre o uso de DNS em estudos de turbulência homogênea e isotrópica é encontrada em [8].

2.2 Escoamentos não-homogêneos

A principal diferença na utilização de DNS em escoamentos não-homogêneos é que a representação de Fourier não pode ser aplicada na direção da não-homogeneidade, o que reduz a acurácia nas derivadas espaciais devido ao uso de outros métodos de discretização (diferenças finitas, por exemplo). Tipicamente, a não-homogeneidade se manifesta em apenas uma direção, permitindo que as demais direções sejam simuladas com o método pseudo-espectral descrito anteriormente.

Um dos exemplos de escoamento não-homogêneo mais estudado, devido à sua importância prática, é o escoamento em canais. Nele, assume-se condições periódicas nas duas direções horizontais, como se fosse um escoamento de tamanho infinito que se repete nas escalas L_x e L_y do canal. Uma parede no chão e outra no topo do domínio cria uma não-homogeneidade na direção vertical, e a condição de não-escorregamento (*no-slip*) é

aplicada (ou seja, $u_i(\mathbf{x}, t) = 0$ nas paredes). Neste caso, a equação de Navier-Stokes é resolvida em sua forma original (equação (1.1.1)), através da evolução temporal do vetor velocidade $u_i(\mathbf{x}, t)$, mas as derivadas horizontais são calculadas no domínio da frequência, ou seja, a cada passo de tempo é calculada a transformada de Fourier de u , a multiplicação $ik_x \hat{u}$ e a transformada inversa do resultado, resultando em uma versão mais acurada de $\partial u / \partial x$ (o mesmo para a derivada em y). Já a derivada em z é realizada a través de uma discretização da derivada no domínio do espaço físico. Maiores detalhes sobre simulação de canais com DNS pode ser encontrado em [9].

2.3 Custo computacional

Como mencionado anteriormente, o DNS produz uma realização do escoamento, e portanto é necessário gerar uma simulação com convergência estatística no tempo ou no espaço para que os resultados sejam avaliados corretamente. Além disso, para uma boa representação da turbulência, é indicado que o domínio tenha um tamanho $D = 8L$, onde L é a escala dos maiores vórtices do escoamento, e uma resolução $\Delta x \approx 2.1\eta$, onde η é a escala de Kolmogorov. Isso corresponde a $N \sim 1.6(L/\eta) = 1.6Re^{3/4}$ ou $N \sim 4.4Re^{9/4}$. O número de Courant indicado é aproximadamente 1/20, e o número de operações de ponto-flutuante necessário é aproximadamente $160Re^3$ [12].

Capítulo 3

Large-Eddy Simulation

“Quando eu encontrar Deus, perguntarei duas coisas: porque relatividade? E porque turbulência? Eu realmente acredito que ele terá uma resposta para a primeira pergunta.”

Werner Heisenberg

3.1 Introdução

Devido ao alto custo computacional da técnica de DNS, e à necessidade de se investigar o comportamento de escoamentos mais realistas, com domínio grande e turbulência intensa, a técnica de *Large-Eddy Simulation* (LES) foi desenvolvida. Nela, as maiores escalas do escoamento são resolvidas, e as menores escalas são modeladas. O LES tem permitido grandes avanços nas áreas de escoamentos geofísicos (atmosfera, oceano, rios e lagos), e o sucesso de seu uso se dá ao alto grau de confiabilidade nos resultados do modelo, o que só é possível devido a uma característica muito interessante da turbulência: quase toda a energia da turbulência se concentra nas maiores escalas, enquanto que quase toda a dissipação de energia se concentra nas menores. Você pode pensar nas escalas como sendo vórtices de tamanhos diferentes, cada um com uma quantidade de energia e taxa de dissipação; neste caso, os maiores vórtices possuem mais energia, e os menores são responsáveis por dissipá-la. Há uma transferência de energia entre os maiores e os menores vórtices através da cascata de energia, a uma taxa constante e igual à taxa de dissipação do escoamento, em média. Em DNS, todos esses vórtices devem ser resolvidos, o que força a grade do modelo a ser do tamanho dos vórtices dissipativos. No LES isso não é necessário: uma grade de tamanho intermediário entre as maiores e as menores escalas do escoamento é utilizada, e tudo que existe de tamanho menor que a grade, e que portanto não é resolvido, é parametrizado por um modelo *subgrid*. Para que essa opção funcione corretamente, é necessário que a grade do modelo se encontre na região da cascata de energia (conhecida como faixa inercial), pois essa faixa possui características universais bem definidas, e foi baseado nessas características que os modelos *subgrid* foram desenvolvidos (Figura 3.1).

O sucesso do uso do LES em estudos de interesse prático está no fato de que as peculiaridades de cada tipo de escoamento (a geometria do escoamento e o tipo de fonte de energia que alimenta a turbulência – cisalhamento, empuxo, etc., por exemplo) impactam somente as maiores escalas, que são resolvidas pelo LES e portanto possíveis de serem investigadas utilizando essa técnica. Durante o processo de cascata de energia, o escoamento tende a “esquecer” o que aconteceu nas maiores escalas, tornando a turbulência isotrópica e universal, o que permite a utilização de modelos *subgrid* no LES que são comuns a qualquer

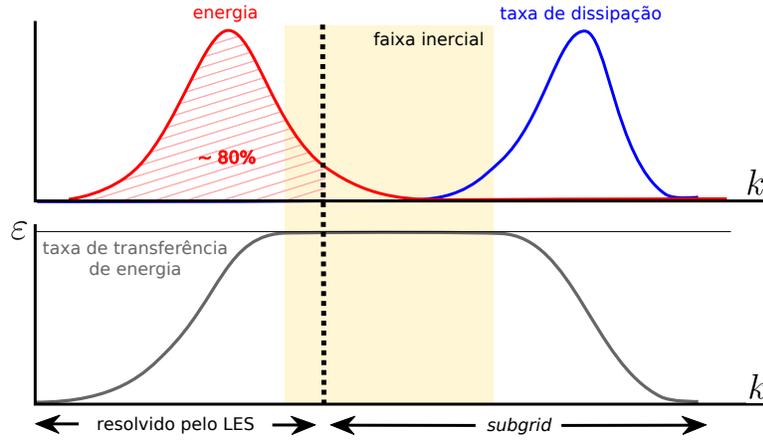


Figura 3.1: Ilustração da distribuição da energia (vermelho), taxa de dissipação de energia (azul) e taxa de transferência de energia (cinza) em função da escala do escoamento (número de onda k , em escala logarítmica). Enquanto a energia se concentra nas maiores escalas (menores k), a taxa de dissipação de concentra nas menores escalas (maiores k). Entre elas, há uma região de transferência de energia a uma taxa constante e igual à taxa de dissipação ε , em média, conhecida como faixa inercial. Adaptado de [12, fig. 6.28]

escoamento turbulento. Além disso, em geral o interesse dos estudos em escoamentos turbulentos está no *transporte* gerado pela turbulência, um processo dominado pelas maiores escalas (que são mais energéticas) e portanto bem representado no LES.

As quatro etapas que compõem o desenvolvimento do modelo LES são:

1. a *filtragem* do escoamento turbulento, que separa a turbulência em uma parte resolvida e outra não-resolvida;
2. a obtenção da equação de Navier-Stokes filtrada, que governa o escoamento resolvido pelo LES;
3. a modelagem (parametrização) do termo de cisalhamento *subgrid*, um dos termos da equação de Navier-Stokes filtrada; e
4. a discretização numérica da equação de Navier-Stokes filtrada.

Essas etapas do modelo são detalhadas a seguir.

3.2 Filtragem

Para separar o escoamento resolvido pelo LES do não-resolvido, um filtro de passa-baixa é aplicado. A escala do filtro é escolhido de forma que a maior parte da energia do escoamento ($\sim 80\%$) seja preservada (Figura 3.1). De maneira geral, o campo do vetor velocidade resolvido pelo LES $\tilde{u}_i(\mathbf{x}, t)$ é definido como

$$\tilde{u}_i(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{x}, \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.2.1)$$

onde “ $\tilde{}$ ” representa variável filtrada na escala Δ . A função filtro $G(\mathbf{r})$ satisfaz a condição

$$\int G(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1. \quad (3.2.2)$$

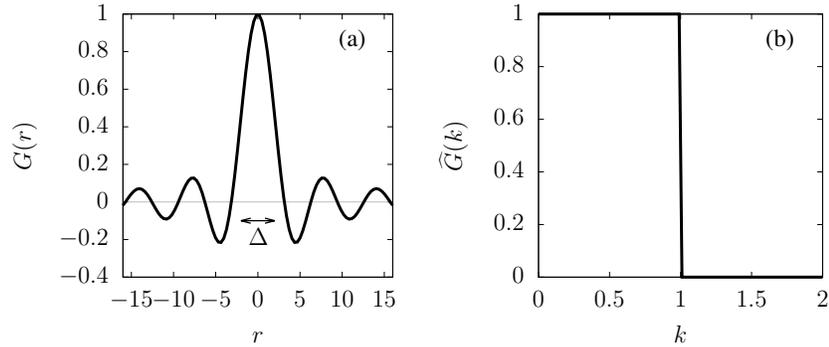


Figura 3.2: Exemplo de função filtro $G(r)$ (a) correspondente ao filtro espectral $\widehat{G}(k)$ (b).

Note que a equação (3.2.1) corresponde a uma convolução no domínio do espaço, o que é equivalente à multiplicação por $\widehat{G}(k)$ no domínio da frequência, onde $\widehat{G}(k)$ é 2π vezes a transformada de Fourier de $G(r)$ (Figura 3.2).

A velocidade de um escoamento turbulento pode então ser definida como a soma entre a velocidade resolvida e um resíduo, na forma

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \tilde{u}_i(\mathbf{x}, t) + u'_i(\mathbf{x}, t). \quad (3.2.3)$$

Uma ilustração do método de filtragem é dado na Figura 3.2.

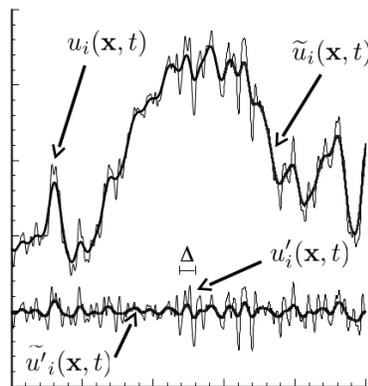


Figura 3.3: Ilustração do método de filtragem com tamanho Δ . Curvas superiores: exemplo de série de velocidade original $u_i(\mathbf{x}, t)$ (linha fina) e filtrada $\tilde{u}_i(\mathbf{x}, t)$ (linha grossa). Curvas inferiores: resíduo da filtragem $u'_i(\mathbf{x}, t)$ (linha fina) e resíduo filtrado $\tilde{u}'_i(\mathbf{x}, t)$ (linha grossa). Adaptado de [12, fig. 13.2]

Para aqueles que estão familiarizados com a teoria de turbulência, note que a equação (3.2.3) se parece com a separação de Reynolds, mas elas são diferentes por definição. Enquanto a separação de Reynolds decompõe a velocidade instantânea em uma velocidade média e uma flutuação com média zero, o filtro separa a velocidade instantânea em uma parte resolvida (mas ainda com características turbulentas) e uma não-resolvida, sendo que em geral $\tilde{u}'_i \neq 0$.

3.3 A equação de Navier-Stokes filtrada

Para obter as equações que governam o LES, o próximo passo é a filtragem das equações (1.1.1) e (1.1.2), que governam o problema. Note que o termo não linear da equação (1.1.1) pode ser reescrito como

$$u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} - u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} \quad (3.3.4)$$

devido à hipótese de incompressibilidade. A equação

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (3.3.5)$$

é conhecida como Navier-Stokes na forma conservativa, e essa será a forma utilizada neste capítulo.

Como o filtro $G(\mathbf{r})$ não é função de \mathbf{x} e t , a operação de filtragem comuta com as derivadas, gerando

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (3.3.6)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.3.7)$$

O que diferencia as equações filtradas (3.3.6) e (3.3.7) das suas versões originais é o fato de que $\widetilde{u_i u_j} \neq \tilde{u}_i \tilde{u}_j$. A diferença entre esses dois termos é o *tensor de cisalhamento residual*

$$\tau_{ij}^R \equiv \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j, \quad (3.3.8)$$

e seu traço define a energia cinética residual, na forma

$$e^R = \frac{1}{2} \tau_{ii}^R, \quad (3.3.9)$$

o que permite definir o *tensor de cisalhamento residual anisotrópico*

$$\tau_{ij}^r \equiv \tau_{ij}^R - \frac{2}{3} e^R \delta_{ij}. \quad (3.3.10)$$

A separação do tensor de cisalhamento residual em uma parte isotrópica e outra anisotrópica é vantajosa devido à semelhança entre a parte isotrópica e a variável pressão do escoamento, o que permite definir uma pressão modificada

$$\tilde{p}^r \equiv \tilde{p} + \frac{2}{3} \rho e^R, \quad (3.3.11)$$

resultando numa equação de Navier-Stokes filtrada na forma

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}^r}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^r}{\partial x_i}. \quad (3.3.12)$$

A equação (3.3.12), que governa o LES, é muito semelhante à equação de Navier-Stokes original, exceto pelas variáveis, que agora são os campos do vetor velocidade filtrada $\tilde{u}_i(\mathbf{x}, t)$ e de pressão modificada $\tilde{p}^r(\mathbf{x}, t)$, e pelo fato de que há um termo extra que não existia na equação original: o gradiente do tensor de cisalhamento residual (último termo da equação (3.3.12)). Este novo termo, que representa os efeitos da turbulência filtrada na turbulência resolvida, deve ser modelado em função de \tilde{u}_i para que o sistema de equações seja fechado.

3.4 O tensor de cisalhamento residual

3.4.1 O modelo de Smagorinsky

Existem diversas formas de se modelar o tensor de cisalhamento residual. O método mais simples, e talvez o mais utilizado, é o método da viscosidade turbulenta, em analogia ao efeito da viscosidade molecular no tensor de cisalhamento do fluido. Nesse modelo, o tensor de cisalhamento residual é escrito como

$$\tau_{ij}^r = -2\nu_t \tilde{s}_{ij}, \quad (3.4.13)$$

onde ν_t é um coeficiente de proporcionalidade conhecido como viscosidade turbulenta, e

$$\tilde{s}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.4.14)$$

é o tensor taxa de deformação resolvido. Na teoria cinética dos gases, ν é proporcional a uma escala de comprimento vezes uma escala de velocidade (hipótese do comprimento de mistura). Para a viscosidade turbulenta, [13] propôs um modelo parecido:

$$\nu_t = \ell_s^2 \tilde{s} = (C_s \Delta)^2 \tilde{s}, \quad (3.4.15)$$

onde ℓ_s é uma escala de comprimento, definida como $C_s \Delta$ (Δ é o tamanho do filtro e C_s é uma constante de proporcionalidade, conhecida como constante de Smagorinsky) e $\tilde{s} \equiv (2\tilde{s}_{ij}\tilde{s}_{ij})^{1/2}$.

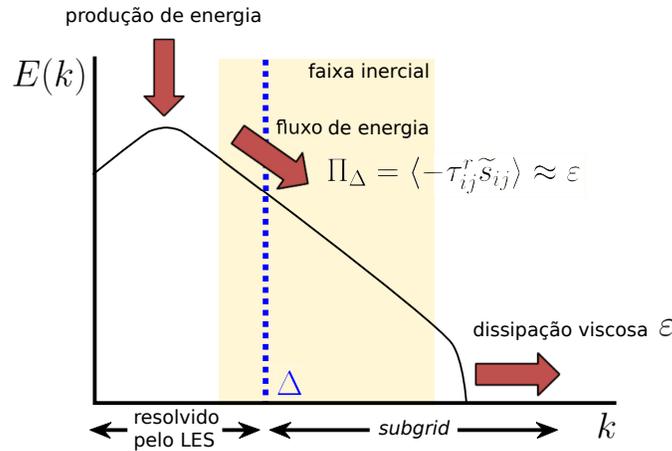


Figura 3.4: Ilustração do modelo Smagorinsky. Linha preta representa o espectro de energia $E(k)$ em função do número de onda k em escala logarítmica nos dois eixos. Linha tracejada azul representa a escala Δ do filtro. No modelo Smagorinsky, o fluxo de energia da escala resolvida pelo LES para a escala *subgrid* $\Pi_\Delta = \langle -\tau_{ij}^r \tilde{s}_{ij} \rangle \approx \epsilon$.

O modelo de Smagorinsky, por ser um modelo de viscosidade turbulenta, parametriza a parte não-resolvida do escoamento como uma força viscosa. Em termos de energia, esse modelo transfere a dissipação de energia das escalas de Kolmogorov para a escala Δ . Isso é possível porque, em média, na faixa inercial há uma transferência de energia das maiores para as menores escalas a uma taxa igual à taxa de dissipação. Entretanto isso é um efeito médio; naturalmente, em um escoamento real, há trocas de energia entre as maiores e as menores escalas que não podem ser capturadas por um simples modelo de viscosidade

turbulenta. Apesar disso, devido à sua robustez, esse modelo se tornou a primeira e mais utilizada ferramenta de parametrização para LES.

Note que, em comparação com a viscosidade turbulenta, a viscosidade molecular é desprezível (lembre-se que estamos falando de escalas muito maiores que as de Kolmogorov). Portanto, ao fechar a equação (3.3.12) com o modelo de Smagorinsky, pode-se desprezar o termo de viscosidade molecular.

Dado que o filtro se encontra na faixa inercial, e utilizando a hipótese de turbulência isotrópica e mais algumas aproximações, é possível chegar ao valor de $C_s \approx 0.165$ (obtido pela primeira vez por [10]). Em simulações de escoamento isotrópico, esse resultado é bem robusto. Em outras situações onde a hipótese de isotropia é menos válida, valores de C_s diferentes são necessários para que a simulação não fique super ou supra-dissipativa. Em simulações de canais, por exemplo, a função proposta por [11]

$$\frac{1}{C_s \Delta} = \frac{1}{C_{s,0} \Delta} + \frac{1}{\kappa(z - z_0)} \quad (3.4.16)$$

permite que a escala de comprimento da viscosidade molecular seja reduzida à medida que se aproxima da parede, compensando a dissipação excessiva que o modelo de Smagorinsky causaria se utilizado $C_s \approx 0.165$ ($C_{s,0} = 0.1$, $\kappa = 0.4$ é a constante de Von Kàrmàn, z é a altura e z_0 é a altura da rugosidade da parede).

3.4.2 O modelo dinâmico

Um dos problemas do modelo de Smagorinsky é que o valor do coeficiente C_s é diferente em diferentes escoamentos ou partes do escoamento (próximo à parede, por exemplo, como citado anteriormente). Por isso, o coeficiente C_s acaba se tornando um parâmetro de ajuste do LES, o que não é desejável. O ideal seria que o modelo fosse independente de qualquer ajuste, gerando um resultado mais robusto e confiável. Para superar esse problema, [7] propôs uma forma dinâmica e local de estimativa de um campo $C_s(\mathbf{x}, t)$, conhecida como *modelo dinâmico*. Para isso, é definido um tensor de cisalhamento *subgrid* em uma segunda escala de filtragem $\alpha\Delta$ (representada pelo “—”) na forma

$$T_{ij} = \overline{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}, \quad (3.4.17)$$

que pode ser reescrito na seguinte forma (conhecida como *identidade de Germano*)

$$T_{ij} = \overline{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j} + (\overline{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) \quad (3.4.18)$$

$$= \underbrace{(\overline{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j})}_{\overline{\widetilde{r_{ij}}}} + \underbrace{(\overline{\widetilde{u_i u_j}} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j})}_{L_{ij}}. \quad (3.4.19)$$

Note que o termo L_{ij} , conhecido como *cisalhamento resolvido*, é conhecido durante a simulação. Já os termos T_{ij} (tensor de cisalhamento *subgrid* na escala $\alpha\Delta$) e $\overline{\widetilde{r_{ij}}}$ (tensor de cisalhamento *subgrid* na escala Δ , filtrado na escala $\alpha\Delta$) não são conhecidos. Podemos, então, rearranjar os termos e parametrizar os dois termos não conhecidos utilizando o modelo de Smagorinsky, na forma

$$L_{ij} - (T_{ij} - \overline{\widetilde{r_{ij}}}) = 0 \quad (3.4.20)$$

$$L_{ij} - [-2(C_s \alpha \Delta)^2 \widetilde{s} \widetilde{s}_{ij} + 2(C_s \Delta)^2 \widetilde{s} \widetilde{s}_{ij}] = 0. \quad (3.4.21)$$

A partir da equação (3.4.21), é possível achar o valor de C_s que minimiza o erro dos modelos de Smagorinsky, ou seja,

$$C_s^2(\mathbf{x}, t) = \frac{\langle L_{ij} M_{ij} \rangle}{\langle M_{kl} M_{kl} \rangle}, \quad (3.4.22)$$

onde $M_{ij} = 2\Delta^2(\overline{\widetilde{s} \widetilde{s}_{ij}} - \alpha^2 \overline{\widetilde{s}} \overline{\widetilde{s}_{ij}})$ e “ $\langle \ \rangle$ ” representa médias no tempo (usando trajetórias lagrangeanas) ou no espaço (utilizando direções homogêneas do escoamento). Note que tanto L_{ij} quanto M_{ij} são funções de \mathbf{x} e t , tornando o valor de C_s dinâmico no sentido em que ele evolui com a simulação e se ajusta às diferentes condições do escoamento. Utilizando a equação (3.4.22), é possível fechar o sistema de equações e eliminar o único parâmetro de ajuste existente, o que torna a simulação mais robusta e universal. Resta somente escolher as escalas de filtragem Δ e $\alpha\Delta$, que devem ambas estar na faixa inercial do escoamento. Na prática, Δ é o tamanho da grade do modelo e o valor de $\alpha = 2$ é utilizado.

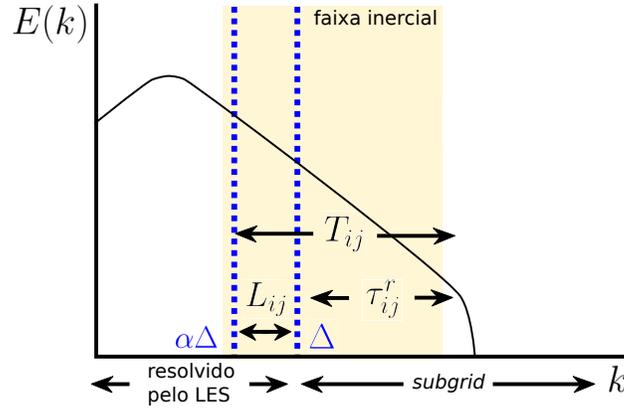


Figura 3.5: Ilustração do modelo dinâmico. Linha preta representa o espectro de energia $E(k)$ em função do número de onda k em escala logarítmica nos dois eixos. Linhas tracejadas azuis representam as escalas Δ e $\alpha\Delta$ do filtro. No modelo dinâmico, o coeficiente de Smagorinsky C_s é estimado através do uso do modelo de Smagorinsky nos tensores de cisalhamento *subgrid* nas escalas Δ (τ_{ij}^r) e $\alpha\Delta$ (T_{ij}), sendo minimizado o erro da relação $L_{ij} = T_{ij} - \tau_{ij}^r$, já que L_{ij} é calculado durante a simulação.

3.4.3 Considerações finais em modelos *subgrid*

É importante salientar que os dois modelos descritos acima formam a base dos primeiros LES desenvolvidos, e ainda muito utilizados até hoje. Entretanto, diversos outros modelos *subgrid* existem, inclusive variações e “evoluções” do modelo dinâmico. Naturalmente, por ser apenas uma parametrização da realidade, não há limite para o desenvolvimento de modelos *subgrid*. Dependendo do tipo de escoamento, alguns modelos se comportam melhor do que outros. Na hora de escolher um modelo, é importante conhecer sua origem e motivação para o seu desenvolvimento, suas hipóteses e aproximações, e o seu desempenho para as aplicações de interesse. Uma vasta coleção de artigos científicos nesta área existe ao seu dispor, e a linha de pesquisa de desenvolvimento de modelos *subgrid* para LES ainda se encontra ativa, dados os novos desenvolvimentos computacionais e o surgimento de novos problemas de interesse prático.

3.5 Solução da equação de Navier-Stokes filtrada

Após a definição do filtro e do modelo *subgrid*, o último passo para a execução do LES é a discretização numérica da equação (3.3.12). Novamente, assim como no caso do DNS, é necessária a escolha de métodos de discretização das derivadas no tempo e espaço.

Costuma-se dar preferência ao método pseudo-espectral para as derivadas espaciais em direções homogêneas (novamente devido à sua acurácia), e outros métodos tradicionais (como diferenças finitas) nas direções não-homogêneas. Métodos tradicionais também são utilizados para as derivadas no tempo, como o método de Runge-Kutta e Adam-Bashforth, por exemplo. Detalhes desses métodos numéricos estão fora do escopo do presente texto.

O custo computacional de simulações de LES depende do problema a ser resolvido, já que há muita liberdade na escolha do tamanho do domínio, do modelo *subgrid*, dos métodos numéricos, etc. A nível de comparação, é possível simular 80% da energia de escoamentos homogêneos e isotrópicos com um número de Reynolds alto com apenas 40^3 pontos de grade [12, p. 636], o que nos dias de hoje possui um custo computacional relativamente baixo (na ordem de horas, dependendo do computador).

Para simular escoamentos em canais, o custo computacional se torna mais elevado devido à necessidade de se refinar a resolução do modelo próximo à parede, já que as escalas mais energéticas nessa região são menores que as escalas do escoamento como um todo. Por esse motivo, o custo computacional de LES de escoamento em canais aumenta com $Re^{1.8}$ [12, p. 636], o que restringe o seu uso em escoamentos muito turbulentos. Essa restrição levou ao desenvolvimento de modelos (parametrizações) de parede, de forma a permitir uma simulação com a mesma resolução do escoamento como todo próximo à parede, e que portanto não resolve os vórtices mais energéticos nessa região, que por sua vez são representados por uma parametrização extra.

3.6 Exemplos

A seguir são apresentados alguns trabalhos que utilizaram LES para a simulação de escoamentos geofísicos. Note que a mesma configuração numérica foi utilizada pelos três trabalhos, demonstrando a versatilidade do modelo.

3.6.1 Simulação do transporte de partículas na atmosfera [6]

No trabalho desenvolvido por [6], o LES foi utilizado para testar uma equação simplificada de perfil médio de concentração de partículas na atmosfera, sob condições estacionárias e homogêneas na horizontal, e dado um fluxo de partículas na superfície. A Figura 3.6 apresenta dois campos de concentração de partículas em um plano 2D da simulação, o primeiro para um escoamento neutro (sem fluxo de calor na superfície) e o segundo para um escoamento instável (com fluxo de calor positivo na superfície). Neste exemplo é possível observar as diferenças entre as estruturas turbulentas presentes em cada tipo de escoamento, demonstrando a capacidade de representação do LES.

3.6.2 Simulação de campo de usina eólica [14]

O impacto na produção de energia causado por diferentes configurações de turbinas em uma usina eólica foi investigado utilizando LES por [14]. A Figura 3.7 mostra uma visualização tri-dimensional do escoamento simulado. Este exemplo explicita a capacidade do LES em representar escoamentos heterogêneos com grande aplicação prática.

3.6.3 Simulação de pluma de óleo emitida no oceano [2, 15]

O acidente de derramamento de óleo da empresa *Deep Horizon* no Golfo do México foi a motivação do trabalho desenvolvido por [2] e [15], que utilizou LES para simular o desenvolvimento da pluma de óleo após o seu vazamento no fundo do oceano através do es-

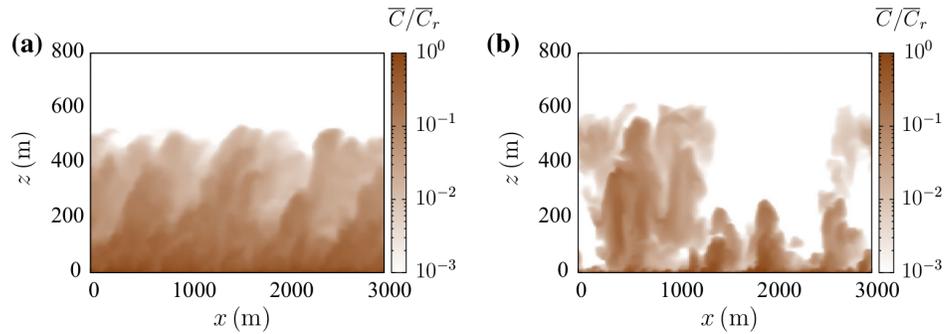


Figura 3.6: Campo de concentração de partículas em um plano 2D do LES representando a atmosfera neutra (a) e instável (b). As simulações foram realizadas com $160 \times 160 \times 320$ pontos de grade, em um código que utiliza o método pseudo-espectral na horizontal (condições de contorno periódicas), de diferenças-finitas centrado de segunda ordem na vertical e Adam-Bashforth de segunda ordem no tempo.

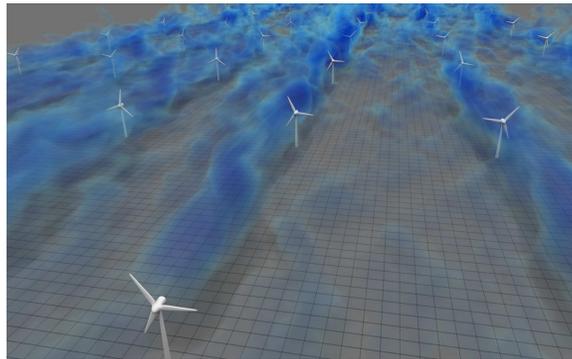


Figura 3.7: Visualização tri-dimensional de uma simulação de usina eólica. A cor azul representa o campo de velocidade longitudinal (quanto mais azul menor a velocidade). As turbinas são simuladas no LES com um modelo que imita o efeito das turbinas no escoamento, isto é, elas não são incluídas como um corpo físico na simulação (a imagem é apenas ilustrativa). A simulação foi realizada com $1024 \times 128 \times 256$ pontos de grade, com um código com a mesma configuração numérica das simulações com partícula realizadas por [5].

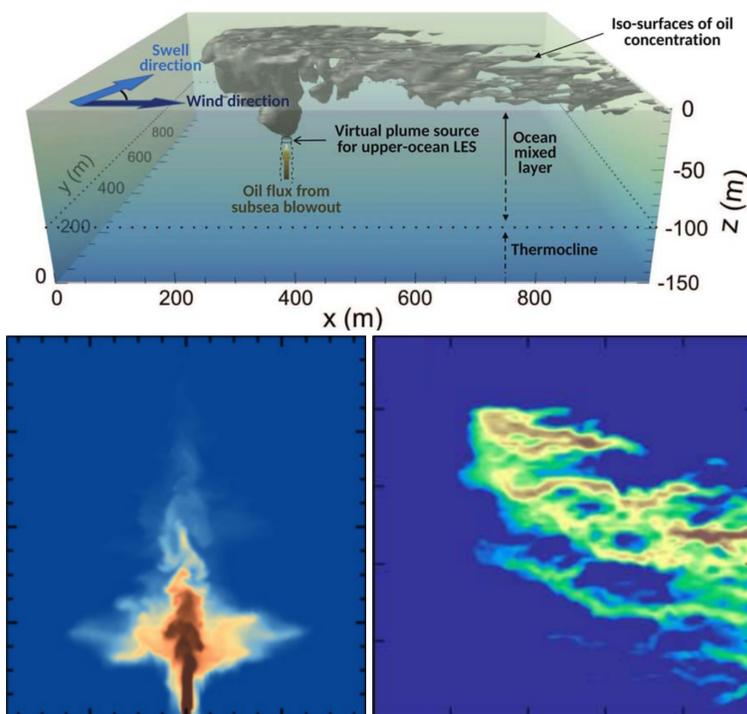


Figura 3.8: Figura superior: desenho esquemático da simulação da pluma de óleo no LES. Figuras inferiores: campo de concentração de óleo em um plano 2D do LES da pluma logo após o derramamento (lado esquerdo) e visão da pluma na superfície do oceano (lado direito). O mesmo código das simulações de partículas de [6] foi utilizado.

coamento estratificado do oceano, e seu comportamento ao atingir a superfície do oceano (Figura 3.8). Com essas simulações foi possível demonstrar, por exemplo, como partículas de tamanhos diferentes respondem ao escoamento turbulento, se espalhando ou se aglomerando, um fenômeno importante para a tomada de decisão à respeito das técnicas de remoção do óleo.

Bibliografia

- [1] BATCHELOR, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. ISBN 9780511800955. Disponível em: <<https://www.cambridge.org/core/books/an-introduction-to-fluid-dynamics/18AA1576B9C579CE25621E80F9266993>>.
- [2] CHEN, B. et al. Effects of swell on transport and dispersion of oil plumes within the ocean mixed layer. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, v. 121, n. 5, p. 3564–3578, 2016. Disponível em: <<https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2015JC011380>>.
- [3] DAVIDSON, P. *Turbulence, an Introduction for scientists and engineers*. [S.l.]: Oxford University Press, 2004.
- [4] DAVIDSON, P. A. et al. (Ed.). *A voyage through turbulence*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011.
- [5] FREIRE, L. S.; CHAMECKI, M. A one-dimensional stochastic model of turbulence within plant canopies. In: *American Geophysical Union Fall Meeting*. [S.l.: s.n.], 2014.
- [6] FREIRE, L. S.; CHAMECKI, M.; GILLIES, J. A. Flux-profile relationship for dust concentration in the stratified atmospheric surface layer. *Boundary-Layer Meteorology*, v. 160, n. 2, p. 249–267, 2016. ISSN 1573-1472. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10546-016-0140-2>>.
- [7] GERMANO, M. et al. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A*, v. 3, n. 7, p. 1760–1765, 1991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.857955>>.
- [8] ISHIHARA, T.; GOTOH, T.; KANEDA, Y. Study of high-reynolds number isotropic turbulence by direct numerical simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 41, n. 1, p. 165–180, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.010908.165203>>.
- [9] LEE, M.; MOSER, R. D. Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau \approx 5200$. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, v. 774, p. 395–415, 007 2015. Disponível em: <<https://www.cambridge.org/core/article/direct-numerical-simulation-of-turbulent-channel-flow-up-to-mathit-re-it-tau-approx-5200/3AE84A5A48F83AF294F6CB042AF92DA8>>.
- [10] LILLY, D. K. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In: *Proc. IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences*. [S.l.: s.n.], 1967. p. 195.

- [11] MASON, P. J.; THOMSON, D. J. Stochastic backscatter in large-eddy simulations of boundary layers. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 242, p. 51–78, 9 1992. ISSN 1469-7645. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/S0022112092002271>>.
- [12] POPE, S. B. *Turbulent Flows*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000.
- [13] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations i. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, v. 91, n. 3, p. 99–164, march 1963. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493\(1963\)091;0099:GCEWTP;2.3.CO;2](http://dx.doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091;0099:GCEWTP;2.3.CO;2)>.
- [14] STEVENS, R. J.; GAYME, D. F.; MENEVEAU, C. Effects of turbine spacing on the power output of extended wind-farms. *Wind Energy*, v. 19, n. 2, p. 359–370, 2015. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/we.1835>>.
- [15] YANG, D. et al. Large-eddy simulation and parameterization of buoyant plume dynamics in stratified flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 794, p. 798–833, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/jfm.2016.191>>.