Capítulo 6

Simulação Numérica Direta e de Grandes Escalas de Escoamentos Transicionais e Turbulentos

Jorge H. Silvestrini

Departamento de Engenharia Mecânica e Mecatrônica
Faculdade de Engenharia
Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul
90619-900 Porto Alegre RS, Brasil,
e-mail: *jorgehs@em.pucrs.br*

Texto apresentado na II Escola Brasileira de Primavera Transição e Turbulência ETT 2000, Uberlândia, 11 a 15 de dezembro de 2000

Conteúdo

1 Introdução

A turbulência é um dos fenômenos da física que mais tem atraído a atenção de cientistas e engenheiros nestes últimos trinta anos. O motivo é bem conhecido. Por um lado a grande maioria das aplicações práticas nas mais diversas áreas de interesse, sejam em meios industriais ou geofísicos, têm que lidar com escoamentos turbulentos. Desde a mistura cotidiana do açúcar em uma xícara de café à dispersão de poluentes na atmosfera, desde a formação de galáxias à convecção térmica em estrelas, desde os escoamentos ao redor de obstáculos (automóveis, barcos, aviões) ao estudo da combustão turbulenta, todas essas áreas têm necessidade da compreensão da turbulência. A isto tem que somar a natural fascinação que a pesquisa de um fenômeno altamente complexo desperta em inúmeros pesquisadores no mundo. Por outro lado, chama a atenção que, enquanto estamos convencidos que o estudo da turbulência é de uma abrangência enorme nas mais diversas áreas de conhecimento, nos encontramos hoje ainda com uma bibliografia que insiste em nos ensinar as características, soluções e utilidades da mecânica de fluidos de escoamentos laminares, quando a realidade é muito mais complexa e as aplicações podem assim confirmar.

O escoamento laminar deve, na realidade, ser considerado como a exceção, enquanto que o turbulento é a regra, e isso é valido para praticamente todas as aplicações em meios industriais e geofísicos. Nas aplicações biológicas, por exemplo, no estudo do fluxo sanguíneo em artérias e veias, o escoamento turbulento está concentrado principalmente na aorta [73]. Nas outras artérias e veias, o escoamento é basicamente laminar, porém com zonas de recirculação e formação de vórtices estacionários nas diferentes bifurcações que ocorrem, como por exemplo, na carótida [12]. É evidente assim a necessidade de prever o comportamento de tais escoamentos.

Quando começamos a estudar os escoamentos turbulentos, nos encontramos com várias contradições, incertezas e problemas a superar. Em primeiro lugar, um grande paradoxo: as equações que regem a dinâmica dos escoamentos turbulentos, as equações de *Navier-Stokes* (NS), são perfeitamente conhecidas há mais de 150 anos [91, 120], porém nenhuma solução exata estável pode ainda ser obtida (mesmo com o significativo incentivo de um milhão de dólares ... [1]). Ou seja, nós dispomos de um modelo matemático determinístico completo de alta qualidade, o qual, em princípio, contém toda a turbulência para um escoamento considerado [39], porêm encontramos um grande número de dificuldades quando pretendemos resolvê-lo mesmo nos casos mais simplificados. Deve-se acrescentar também que as equações de NS têm uma ampla faixa de aplicação que permite modelizar a grande maioria dos escoamentos geofísicos e industriais, sejam eles turbulentos ou não.

As principais dificuldades que se apresentam no estudo dos escoamentos turbulentos é a característica não-linear das equações governantes, a complexidade da solução procurada e a complexidade do fenômeno físico associado.

Para o caso de fluidos incompressíveis de massa específica constante, as equações de Navier-Stokes, em notação indicial, são:

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

[1] ver http://www.claymath.org.

às quais deve se acrescentar a equação de continuidade,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \tag{2}$$

eventualmente, uma equação de conservação de um escalar passivo,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\theta u_j) = \kappa \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_j \partial x_j}, \tag{3}$$

e correspondentes condições iniciais e de contorno (ν é a viscosidade cinemática molecular e κ a difusividade molecular). O sistema que formam as equações (1),(2) e (3), para o caso tridimensional, será composto de 5 equações e 5 incógnitas, a saber: o campo de velocidade u_i, a pressão p e o escalar θ, e, portanto, o sistema é fechado (no sentido de igual número de equações e incógnitas).

Para ilustrar o rol dos termos não-lineares, consideremos o caso simplificado da equação de onda não-linear unidimensional

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

sujeita à condição inicial

$$u(x, t_0) = A \ \cos kx.$$

Fazendo um desenvolvimento em série de Taylor, temos:

$$\begin{aligned}
u(x,t) &= u(x,t_0) + (t - t_0) \ \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{t=t_0} + O(t-t_0)^2 \\
&= u(x,t_0) + (t - t_0) \ \left(-u\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{t=t_0} + O(t-t_0)^2 \\
&= u(x,t_0) + (t - t_0) \ A^2 \ k \ \cos kx \ \sin kx + O(t-t_0)^2 \\
&= u(x,t_0) + (t - t_0) \ \frac{A^2}{2} \ k \ \sin \underline{\underline{2}}kx + O(t-t_0)^2,
\end{aligned}$$

ou seja, a não-linearidade faz aparecer um harmônico superior na solução. Em geral, em um escoamento tridimensional não estacionário, os termos não-lineares provocam harmônicos e sub-harmônicos. Assim, a não linearidade pode ser interpretada não somente como um mecanismo de geração de escalas em um escoamento turbulento, senão como a responsável pela transferêrencia de energia entre diferentes escalas.

Outra questão amplamente discutida e sem consenso definitivo na comunidade científica, é referente à escolha de uma definição apropriada para a turbulência. Uma delas [69] exige que para um escoamento ser considerado turbulento deve,

- ser imprevisível no sentido que uma incerteza no conhecimento de sua condição inicial deve se amplificar, tornando impossível a predição exata de sua evolução posterior,

- tender a aumentar as propriedades de mistura,

- envolver uma ampla gama de escalas.

Um escoamento turbulento é por natureza instável. Uma perturbação infinitesimal, sob determinadas condições, geralmente se amplificará primariamente por um processo linear e, a posteriori, devido às não linearidades presentes. Quando o escoamento, através de sua força de dissipação, é capaz de conter as amplificações de pequenas pertubações, estamos na presença de um escoamento laminar, no caso contrário um mecanismo complexo de transição se colocará em jogo, amplificando as perturbações. Este é o objetivo do estudo da estabilidade hidrodinâmica que será apresentado neste mesmo volume (ver capítulo 5 e 10).

O parâmetro que define a relação entre as forças de inércia responsáveis pelo movimento do fluido e as forças de dissipação devido à viscosidade, é o número de Reynolds

$$Re = \frac{UL}{\nu}, \tag{4}$$

onde U e L sãs escalas características de velocidade e comprimento, respectivamente. O mesmo Reynolds, em sua célebre experiência de transição laminar-turbulenta em tubos cilíndricos [104], deu o passo inicial para tratar os problemas de escoamentos turbulentos através da decomposição que leva seu nome. Essa proposta pretendeu, de alguma forma, resolver o problema do tratamento de valores instantâneos, mas criou outra, o denominado *problema de fechamento*, os termos não-lineares acrescentam novas incógnitas ao sistema de equações original. A partir desse momento a única saída possível, durante mais de 80 anos, foi a procura de modelos capazes de relacionar as novas incógnitas introduzidas pela decomposição de Reynolds a valores conhecidos, geralmente valores médios dos escoamentos considerados.

A partir dos anos sessenta, uma nova tendência para o tratamento numérico da turbulência, apontada pelo espectacular crescimento da capacidade de cálculo computacional, começou a se gestar. Fazem parte desta corrente as técnicas de Simulação Numérica Direta (ou DNS por "Direct Numerical Simulation") e de Simulação de Grandes Escalas (ou LES por "Large-Eddy Simulation") que são os temas centrais deste capítulo.

Apesar do grande esforço da comunidade científica em desvendar as características íntimas da turbulência, uma teoria para a mesma ainda tem que ser desenvolvida. Evidentemente houve progressos no entendimento da física envolvida nos escoamentos turbulentos, porém muito caminho fica ainda por percorrer. Dois resultados importantes devem ser ressaltados:

- a verificação experimental do fenômeno da cascata de energia cinética proposto por Kolmogorov [56, 57];
- a constatação da organização dos escoamentos turbulentos nos denominados vórtices (ou estruturas) coerentes.

A Fig. 1 mostra dois espectros de energia cinética medidos: o primeiro no tunel S1 da ONERA [40] e o segundo em um canal natural (Knight channel, British Columbia) [69]. Ambos os espectros mostram três décadas de região inercial caracterizada por um espectro $E(k) \sim k^{-5/3}$, desde as escalas energéticas, representadas pela escala integral, às escalas dissipativas, representadas pela escala de Kolmogorov.

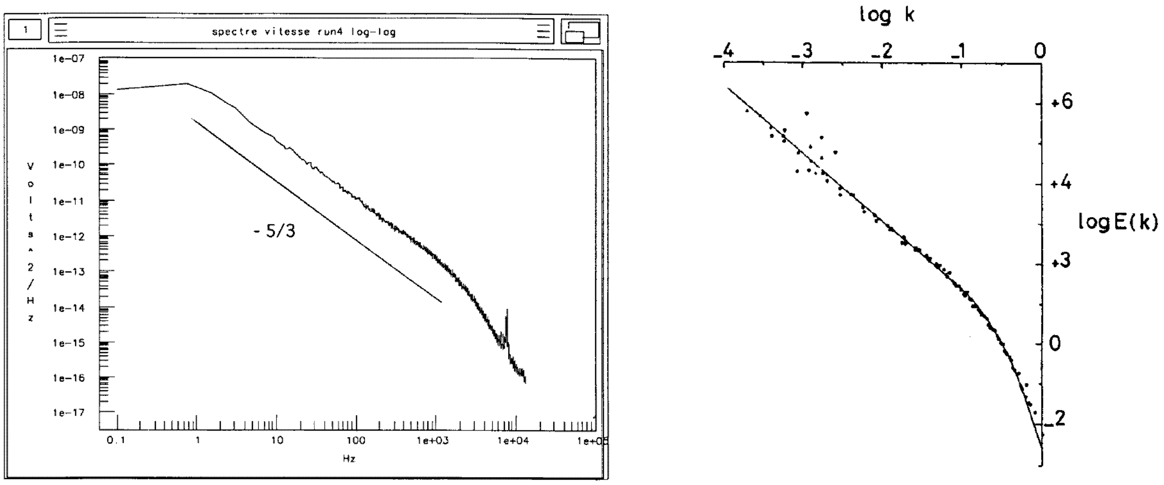

Figura 1: Verificações da lei de Kolmogorov: à esquerda, experiência de laboratório [40], à direita em um canal natural [69].

Recordemos que, em turbulência homogênea, e considerando um espectro tridimensional de energia cinética seguindo uma lei de Kolmogorov,

$$E(k) = C_K \epsilon^{2/3} k^{-5/3}, \tag{5}$$

onde ϵ é a taxa de dissipação da turbulência e C_K uma constante, a escala integral [69] é :

$$\ell \sim \frac{v^3}{\epsilon}, \tag{6}$$

onde v é uma escala caraterística de velocidades, enquanto que a escala de Kolmogorov para turbulência isotrópica 3D é :

$$\eta \sim \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}. \tag{7}$$

Ambas as escalas de comprimento podem ser vistas como uma representação do tamanho das maiores (escala integral) e menores (escala de Kolmogorov) estruturas presentes em um escoamento turbulento.

A organização do escoamento turbulento em vórtices e/ou estruturas coerentes foi constatada a partir de trabalhos realizados nos anos 60 e 70 para escoamentos parietais e livres [54, 55, 7, 5]. Estas contribuições, principalmente a ligada ao estudo da dinâmica da camada de mistura heterogênea (Fig. 2) e, posteriormente, com os primeiros resultados obtidos de simulações numéricas diretas (ver Fig. 3), certamente mudou a visão que a comunidade científica tinha da turbulência em escoamentos livres.

Várias monografias foram escritas com o objetivo de revisar o estado da arte em DNS e LES (ver [105, 80, 36, 70, 98]). No Brasil, o primeiro trabalho (em português) foi apresentado durante a Primeira Escola de Transição e Turbulência [111]. A presente monografia visa complementar a

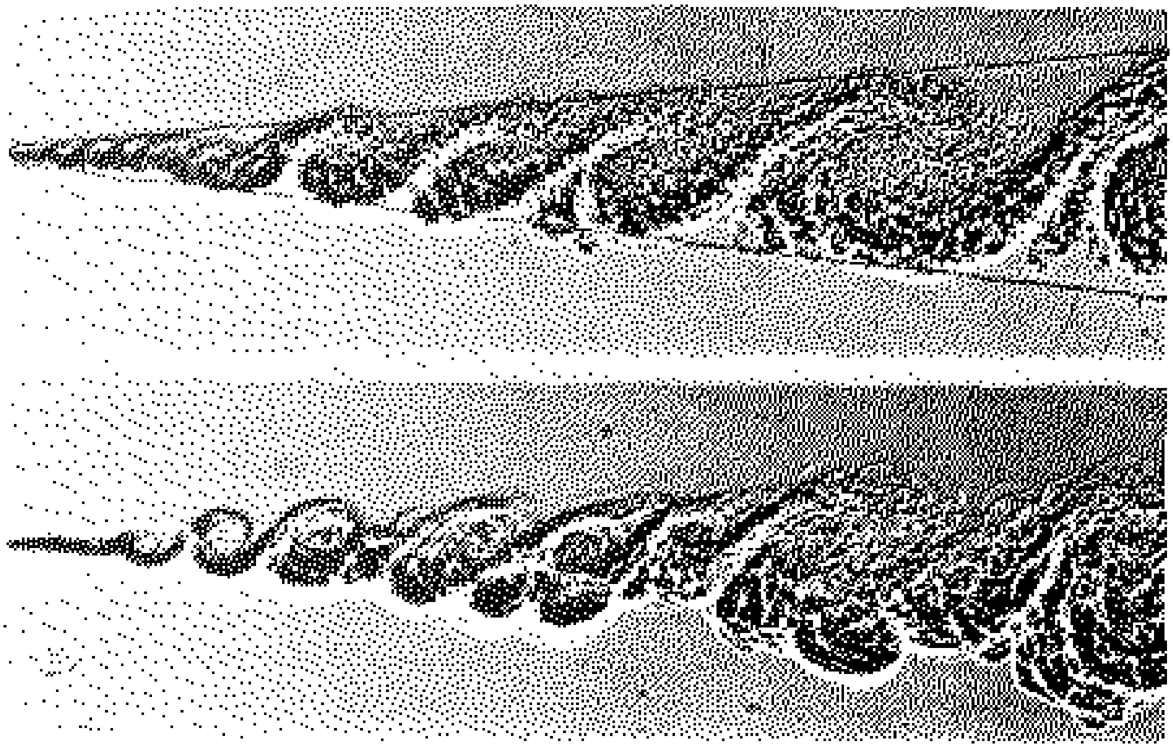

Figura 2: Organização da grande escala em uma camada de mistura turbulenta [7].

primeira incorporando novos desenvolvimentos em modelos sub-malha, introduzindo o formalismo da simulação de grandes escalas para escoamentos compressíveis, apresentando técnicas numéricas apropriadas para simulações numéricas de turbulência e analizando resultados obtidos de novas simulações. Nos limitaremos à análise da turbulência em escoamentos incompressíveis e compressíveis (a baixo número de Mach), sem levar em conta outras complexidades, como, por exemplo, os escoamentos reativos, a presença de forças de campo, a interação turbulência-acústica, etc.

O presente capítulo foi organizado da seguinte forma. Na seção 2, serão analisadas criticamente as diferentes metodologias numéricas para resolver problemas de escoamentos turbulentos. A Simulação Númerica Direta é apresentada na seção 3. Na seção 4, apresentamos o formalismo da Simulação de Grandes Escalas aplicadas a escoamentos incompressíveis no espaço físico e de Fourier. Uma introdução à LES para escoamentos compressíveis é descrita na seção 5. Na seção 6, concentramos a apresentação e análise de alguns modelos sub-malha para LES. Uma introdução aos métodos numéricos de comportamento espectral para DNS e LES é apresentada na seção 7. Na seção 8, se apresentam alguns resultados recentes de DNS e LES e, finalmente, na seção 9 propõem-se desafios para DNS e LES.

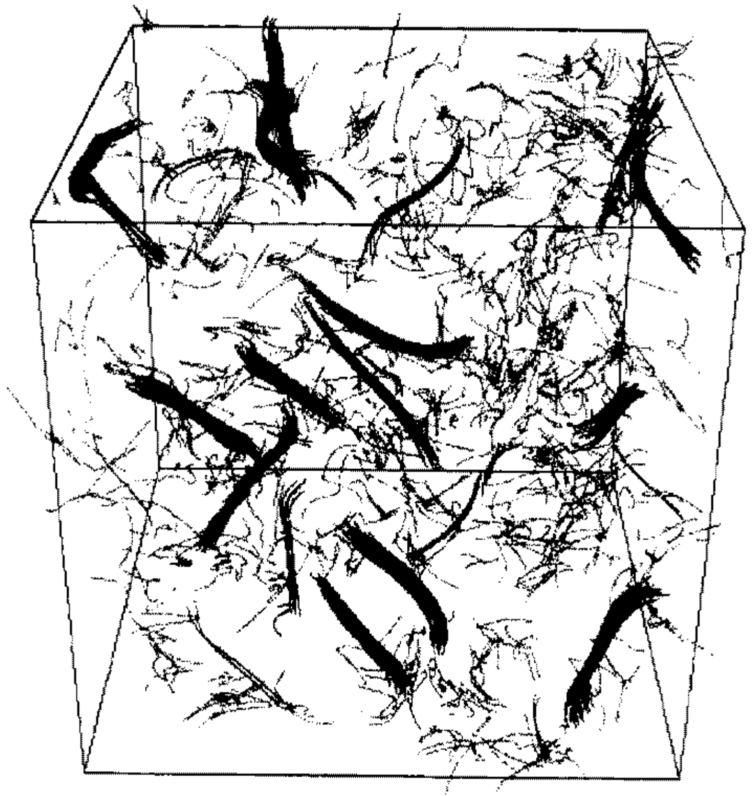

Figura 3: Filamentos de vorticidade em uma DNS de turbulência homogênea isotrópica [110].

2 Abordagens numéricas para o estudo da turbulência

É importante saber diferenciar entre as técnicas numéricas que dispomos para calcular um escoamento turbulento e, assim, inferir sobre a dinâmica do mesmo, principalmente quanto aos objetivos para os quais foram desenvolvidas e, portanto, aos resultados esperados. As técnicas de modelização e simulação da turbulência podem ser catalogadas em cinco categorias :

- métodos baseados na decomposição de Reynolds ou de fechamento em um ponto;
- métodos de fechamento em dois pontos;
- simulação tridimensional (ou bidimensional) das equações completas de Navier-Stokes;
- simulação numérica direta;
- simulação de grandes escalas.

Os modelos de turbulência baseados na decomposição de Reynolds, denominados também modelos de fechamento em um ponto ou ainda, modelos RANS (por "Reynolds-averaged Navier-Stokes"), têm sido largamente utilizados como ferramenta de cálculo de escoamentos turbulentos. Esta abordagem visa modelar as tensões de Reynolds, originadas pela não-linearidade das equações, por diferentes equações, sejam diferenciais ou algébricas, mas em todos os casos relacionadas aos valores médios do escoamento considerado. Uma apresentação completa do tema foi abordada na Primeira Escola de Transição e Turbulência [27] e uma comparação crítica dos diferentes modelos aplicados ao canal turbulento foi recentemente realizada por Chaouat [13]. O sucesso desta técnica depende não somente da configuração do escoamento, mas também da ordem estatística que se pretende atingir no resultado. Os modelos de turbulência devem ser vistos como correlações ou aproximações de "engenharia" e não como leis científicas, permitindo assim a calibração de constantes para ajustar a casos específicos. É justamente essa falta de consistência que levou ao desenvolvimento de novas técnicas, tal como a simulação de grandes escalas.

Os modelos estocásticos de fechamento em dois pontos, chamados assim dado que as grandezas consideradas são definidas em dois pontos diferentes no espaço físico (ou dois números de onda diferentes no espaço de Fourier), foram desenvolvidos principalmente para o caso da turbulência homogênea e, em muitos casos, isotrópica [52, 72, 94, 106, 69]. O fato de considerar dois pontos no espaço físico (ou no de Fourier) dá acesso direto, como incógnita, ao tensor de correlação (ou tensor espectral no espaço de Fourier) e, portanto, à energia cinética da turbulência. Dificilmente com estes modelos pode-se prever o comportamento de escoamentos turbulentos minimamente complicados, porém eles são de grande utilidade para construir modelos sub-malha para simulação de grandes escalas (ver seção 6.1), onde a hipótese de homogeneidade e isotropia pode ser bem aceita [15, 16]. Para os interesados nestes tipos de modelos, uma apresentação completa do modelo *Eddy-Damped Quasi-Normal Markovian* (*E.D.Q.N.M.*) pode ser apreciada em [69].

A simulação tridimensional (ou bidimensional) das equações completas de Navier-Stokes tem sido uma das ferramentas mais utilizadas na comunidade científica que trabalha com os métodos dos elementos e volumes finitos [101, 95]. Estas simulações se caracterizam por serem realizadas a baixa precisão, (máximo 2da ordem) e, portanto, o método numérico faz o trabalho de um "dissipador numérico" que limita o desenvolvimento de uma cascata de energia entre diferentes escalas. Nesta categoria também são considerados as simulações numéricas utilizando métodos de tipo PPM (Piecewise Parabolic Method) [19], no qual toda a dissipação é aportada pelo esquema numérico, mesmo assim obtendo resultados compatíveis com a lei de Kolmogorov, *para surpresa geral* [102].

Com o crescimento contínuo da velocidade e do volume de cálculo dos computadores, a simulação numérica direta (DNS) e a simulação de grandes escalas (LES) tem se tornado cada vez mais utilizadas. A simulação numérica direta é um método no qual resolve-se as equações completas de Navier-Stokes para todas as escalas da turbulência considerada. Como veremos na continuação, este requisito define um número de graus de liberdade excessivamente alto para os números de Reynolds de interesse prático, limitando, assim, seu uso a escoamentos com Reynolds moderados. A simulação de grandes escalas veio ao encontro desta dificuldade como técnica que permite aumentar o número de Reynolds a ser simulado. Neste método, as equações completas de Navier-Stokes são resolvidas somente para as escalas energéticas do escoamento considerado. As pequenas escalas, tipicamente as escalas menores que o tamanho do filtro utilizado, são parametrizadas com a incorporação de um modelo *sub-malha*.

Do ponto de vista das flutuações, a LES pode ser situada entre a DNS, onde todas as flutuações são em princípio resolvidas, e a modelização RANS, onde somente os valores médios são resolvidos e as flutuações devem ser todas modelizadas. A vantagem principal da LES é que ela dá acesso às estruturas de vorticidade não estacionárias e, portanto, às flutuações que essas estruturas produzem, contrariamente à RANS que fornece somente os valores médios. Com um método tipo LES, somente as estruturas de mais alta freqüência serão modelizadas. Entre as desvantagem podem ser citadas a não trivial extensão à geometrias complexas.

3 Simulação numérica direta

Em uma simulação numérica direta, todas as escalas da turbulência correspondente ao número de Reynolds considerado devem ser resolvidas. Isto inclui desde as escalas energéticas, representadas pela escala integral, ℓ, às escalas disipativas, representadas pela escala de Kolmogorov, η. Como o número de graus de liberdade, N, necessário para representar um escoamento turbulento é dado pela razão entre as duas escalas, teremos em função de (6, 7) que

$$N \sim \frac{\ell}{\eta} \sim \left(\frac{\ell \upsilon}{\nu}\right)^{3/4} \sim R_\ell^{3/4}. \tag{8}$$

Isto indica que em uma simulação numérica direta de uma turbulência tridimensional é necessário

$$N^3 \propto R_\ell^{9/4} \tag{9}$$

graus de liberdade, onde R_ℓ é o número de Reynolds turbulento baseado na escala integral. Consideremos um domínio de cálculo de dimensões $L_x \times L_y \times Lz$, discretizado em $n_x \times n_y \times n_z$ pontos de malha com

$$\Delta x = \frac{L_x}{n_x}, \quad \Delta y = \frac{L_y}{n_y}, \quad \Delta z = \frac{L_z}{n_z}.$$

A fim de representar todas as escalas espaciais, deveremos verificar que

$$L_x > \ell, \quad L_y > \ell, \quad L_z > \ell \quad \text{e} \quad \Delta x < \eta, \quad \Delta y < \eta, \quad \Delta z < \eta,$$

assim temos que,

$$n_x n_y n_z > \left(\frac{l}{\eta}\right)^3,$$

e o número de pontos da malha de cálculo para a representação espacial de um escoamento turbulento desenvolvido deve verificar a condição :

$$n_x n_y n_z \propto R_\ell^{9/4}. \tag{10}$$

Por questões de estabilidade numérica (conseqüência da condição de Courant), o passo de tempo $\Delta t = T/n_t$, onde T é tempo total da simulação e n_t o número de passos de tempo, está relacionado à discretização espacial $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, na forma

$$n_t \propto \max(n_x, n_y, n_z).$$

O tempo de cálculo por uma DNS, T_{cal}, será então

$$T_{cal} \propto n_t \; n_x \; n_y \; n_z$$

ou ainda

$$T_{cal} \propto R_\ell^3. \tag{11}$$

Isto significa que se desejamos aumentar o número de Reynolds de uma simulação por um fator **10**, necessitaremos dispor de espaço de memória **178** vezes maior e um tempo de cálculo **1000** vezes superior. Como dado de referência, para a simulação direta de um jato turbulento em desenvolvimento espacial a $R_\ell = 1000$, é necessária uma malha aproximadamente de 10^7 pontos com um tempo de cálculo de 50 h em uma Fijitsu VPP300 (2.2 Gflops) e uma ocupação de memoria de 1 Gb. Estas restrições são aproximadas, porém elas poderiam ser ainda mais fortes no caso de escoamentos parietais, simulação da transição completa e escoamentos compressíveis (devido a fenômenos acústicos).

Na práctica, normalmente é justificado não calcular as escalas suficientemente próximas da escala de Kolmogorov, adotando assim um "cut-off" de, por exemplo, 5η (ver [86]). Outra técnica usada para definir o número de graus de liberdade necessário para uma DNS, é analizar o espectro de energia cinética tridimensional (se está disponível) quanto à forma da curva para grandes números de onda. Por exemplo, se a curva segue uma determinada lei de potência e a partir de um certo número de onda verificamos uma acumulação de energia, isto poderia ser um sinal que não temos suficientes graus de liberdade para o número de Reynolds simulado. No caso contrário, quando a curva cai de forma mais rápida que a lei de potência, poderia indicar um número excessivo de pontos da malha para o escoamento considerado.

Notamos aqui que, no caso de uma DNS bidimensional, é considerando uma cascada de enstrofia onde o espectro de energia cinética é dado por $E(k) \sim \beta^{2/3} k^{-3}$ (β é a taxa de dissipação da enstrofia, e lembrando que a enstrofia é definida como a variança da vorticidade, $1/2 < \vec{\omega}^2 >$), o número de graus de liberdade necessário é proporcional a R_ℓ [69]. Assim, é importante notar que, no caso de uma simulação numérica direta bidimensional, não existiria impedimentos físicos quanto ao número de graus de liberdade necessário em função dos computadores existentes hoje em dia (exceto casos extremos de turbulências com números de Reynolds excessivamente altos, como, por exemplo, a turbulência atmosférica ou planetária).

A limitação imposta no caso 3D, porém, reduz a utilização da simulação numérica direta a escoamentos com números de Reynolds moderados. Mesmo assim, pelo fato de uma DNS resolver diretamente as equações de Navier-Stokes sem a influência de modelos, ela se torna uma ferramenta importante para "visualizar" a turbulência, estudar a dinâmica dos vórtices coerentes, sendo também um excelente meio de teste de códigos de cálculo. Assim, uma simulação numérica direta deve ser interpretada como uma ferramenta de pesquisa [87] e não como de cálculo de engenharia, e pode ser considerada como uma realização de um escoamento equivalente a uma experiência de laboratório de curta duração.

Notemos, finalmente, que a partir de uma DNS pode-se desenvolver os denominados testes *a priori*, de grande utilidade para testar diferentes modelos para LES. A forma tradicional de testar os resultados de uma simulação é de comparar a solução obtida com dados experimentais ou de outras simulações (principalmente DNS) para o mesmo escoamento. Este seria o método *a-posteriori* de verificação de resultados. Nos testes a priori, a partir dos resultados obtidos em uma DNS e considerando a DNS uma representação exata de um escoamento turbulento, pode-se filtrar os dados e assim comparar com as previsões dos diferentes modelos sub-malha.

4 Simulação de grandes escalas de escoamentos incompressíveis

A técnica da simulação de grandes escalas permite aumentar o número de Reynolds a simular, com respeito à DNS, através da introdução de um filtro apropriado que separa as "grandes" das "pequenas" escalas. Esta operação visa, basicamente, diminuir a parte do espectro de energia cinética a simular (*i.e.* diminuir o número de graus de liberdade), com a esperança que o movimento a pequena escala seja menos sensível às anisotropias impostas ao escoamento e, portanto, mais fácil de modelar.

Nesta seção, serão apresentados os formalismos da simulação de grandes escalas para escoamentos incompressíveis no espaço físico e espectral.

Um esclarecimento a respeito da notação utilizada é aconselhável fazer. A variável filtrada, escalar ou vetorial, é indicada pelo símbolo, $\overline{(.)}$, sobre a variável correspondente. No formalismo LES, para escoamentos incompressíveis ou compressíveis no espaço físico, utiliza-se a notação indicial com soma sobre os índices repetidos, exceto quando é especificado. Variáveis escalares definidas no espaço de Fourier, são denotadas por $\hat{(.)}$ e para vetores $\underline{\hat{(.)}}$.

4.1 Formalismo no espaço físico

Para separar as "grandes" e "pequenas" escalas utiliza-se a definição de filtros. Em simulação de grandes escalas, uma variável filtrada (ou resolvida, ou de grande escala) é definida através da operação de convolução :

$$\overline{f}(x_i,t) = \int f(x_i,t)\, G_{\Delta_c}(x_i - x_i')\, dx_i', \tag{12}$$

onde f é uma variável instantânea escalar ou vetorial e $G_{\Delta_c}(x_i)$ é um filtro apropriado, escolhido com o objetivo de eliminar as flutuações nas escalas menores que sua largura Δ_c. As operações de diferenciação e filtragem comutam se o filtro tem largura uniforme. No caso contrário, obtem-se erros de comutação da ordem Δ_c^2 [46], o que, a priori, limitaria o uso de filtros de largura variáveis à precisão de segunda ordem, porém algumas correções foram propostas para diminuir os erros de comutação à quarta ordem [46].

É importante salientar que, em geral, Δ_c pode ser maior ou igual ao tamanho da malha, Δ. Com o objetivo de diminuir o custo das simulações, em muitos casos é escolhido $\Delta_c = \alpha\Delta$, com $\alpha = 1$. Porém, existem modelos sub-malha que trabalham com filtros, onde $\alpha = 2$, como na modelização sub-malha dinâmica apresentada na seção 6.3 e no Capítulo 1 do presente volume. Uma alternativa ao uso de diferentes filtros, definidos no espaço de Fourier será apresentada na seção 6.3.2.

O filtro é as vezes definido pelo método numérico usado na resolução das equações governantes. Se, por exemplo, o método de diferenças ou volumes finitos é usado, a opção mais natural é adotar o filtro "top hat" definido, em unidimensional, como

$$G(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } |x| \leq \Delta_c/2 \\ 0 & \text{senão.} \end{cases} \tag{13}$$

Outra opção, é utilizar o filtro gaussiano, definido por

$$G(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-2\frac{x^2}{{\Delta_c}^2}\right), \tag{14}$$

ou ainda o filtro de corte no espaço de Fourier utilizado conjuntamente com métodos espectrais, definido por

$$\hat{G}(k) = \begin{cases} 1 & \text{se } |k| \leq k_c \\ 0 & \text{senão,} \end{cases} \tag{15}$$

onde $\hat{G}(k)$ é a transformada de Fourier espacial do filtro $G(x)$, e k_c é o número de onda de corte $(= \pi/\Delta_c)$.

Uma comparação entre os três filtros mostra que enquanto os filtros "top hat" e o gaussiano têm comportamentos semelhantes no que se refere ao filtragem das menores escalas resolvidas na vizinhança de k_c, o filtro de corte no espaço de Fourier filtra somente para $k > k_c$ [98].

As equações para simulação de grandes escalas de escoamentos incompressíveis, são obtidas aplicando a operação de filtragem (12) às equações de Navier-Stokes (1,2,3), obtendo :

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u}_i \overline{u}_j) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\nu\left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i}\right) + T_{ij}\right\}, \tag{16}$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0, \tag{17}$$

$$\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\theta}\overline{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\kappa \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} + Q_j\right\}. \tag{18}$$

Devido à não linearidade das equações, a operação de filtragem introduz duas novas incógnitas; o tensor de cisalhamento sub-malha T_{ij} e o fluxo de escalar sub-malha Q_j definidos por

$$T_{ij} = \overline{u}_i \overline{u}_j - \overline{u_i u_j}, \tag{19}$$

$$Q_j = \overline{\theta}\overline{u}_j - \overline{\theta u_j}. \tag{20}$$

No pasado, optou-se por decompor o tensor $T_{i,j}$ em diferentes componentes [17], considerando $u'_i = u_i - \overline{u}_i$, na forma :

$$T_{ij} = L_{ij} + C_{ij} + R_{ij}, \tag{21}$$

dando origem aos termos de Leonard, $L_{ij} = \overline{\overline{u}_i\overline{u}_j} - \overline{u}_i\overline{u}_j$, calculáveis explicitamente a partir do campo filtrado, os termos cruzados, $C_{ij} = \overline{\overline{u}_i u'_j} + \overline{u'_i\overline{u}_j}$, que representam interações entre escalas filtradas e não filtradas e o tensor sub-malha de Reynolds, $R_{ij} = \overline{u'_i u'_j}$, que envolve interações entre escalas não filtradas. Esta técnica foi finalmente abandonada devido à falta de invariância com respeito à transformação Galileana dos tensores cruzados e de Leonard [42], optando-se por modelar diretamente o termo T_{ij}.

O tensor de cisalhamento sub-malha é similar ao termo que aparece nas equações RANS, mas o significado físico é bem diferente. A energia turbulenta sub-malha em LES é menor que a energia turbulenta em RANS, assim sua modelização será mais crucial em RANS que em LES.

Como o sistema (16), (17) e (18) não é mais fechado (temos mais incógnitas que equações), deve-se introduzir modelos de turbulência sub-malha para avaliar T_{ij} e Q_j.

Duas possibilidades podem se apresentar:

- modelar diretamente o tensor de cisalhamento sub-malha T_{ij} e o fluxo de escalar sub-malha Q_j;
- utilizar a hipótese de Boussinesq e introduzir o conceito de viscosidade e difusividade turbulenta.

Neste último caso, teremos que o tensor sub-malha pode ser calculado como

$$T_{ij} = 2\nu_t\overline{S}_{ij} + \frac{1}{3}T_{ll}\delta_{ij}, \tag{22}$$

$$Q_j = \frac{\nu_t}{Pr^{(t)}}\frac{\partial\overline{\theta}}{\partial x_j}, \tag{23}$$

onde $\overline{S}_{ij}$ é o tensor de taxa de deformação do campo filtrado

$$\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u}_j}{\partial x_i}\right), \tag{24}$$

e $Pr^{(t)}$ é o número de Prandtl turbulento, muitas vezes considerado constante.

Na seção 6.2 serão apresentados modelos sub-malha para determinar $\nu_t(x_i, t)$ no espaço físico. Modelos baseados no cálculo direto de T_{ij} serão discutidos na seção 6.3 (ver também Capítulo 1 do presente volume).

4.2 Formalismo no espaço espectral

Para a apresentação do formalismo LES aplicado a escoamentos incompressíveis no espaço espectral, consideraremos dois casos particulares: o primeiro, onde o domínio é periódico nas três direções, denominado 3D periódico, e o segundo, denominado parcialmente periódico, no qual somente duas direções do escoamento são periódicas. Isto responde à necessidade de simulações de escoamentos livres e parietais em aproximação temporal ou em desenvolvimento espacial. Quando a periodicidade pode ser assumida nas três direções, isto permite realizar simulações de escoamentos livres em aproximação temporal, enquanto que para escoamentos livres desenvolvendo-se espacialmente ou escoamentos parietais temporais, somente duas direções podem ser consideradas como periódicas.

Sejam $\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)$ e $\hat{\theta}(\vec{k},t)$ as transformadas de Fourier espaciais dos campos de velocidade $\vec{u}(\vec{x},t)$ e de escalar $\theta(\vec{x},t)$ de um escoamento incompressível, definidas por

$$\underline{\hat{f}}(\vec{k},t) = \left(\tfrac{1}{2}\right)^3 \int \vec{f}(\vec{x},t)\ e^{-\imath\vec{k}\cdot\vec{x}}\ d\vec{x}, \tag{25}$$

e admitindo a transformação inversa :

$$\vec{f}(\vec{x},t) = \int \underline{\hat{f}}(\vec{k},t)\ e^{\imath\vec{k}\cdot\vec{x}}\ d\vec{k}. \tag{26}$$

As integrais são definidas sobre dois espaços:

- o espaço físico caracterizado por $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ com $d\vec{x} = dx_1 dx_2 dx_3 = d^3x$;
- o espaço espectral (ou de Fourier) caracterizado por $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ com $d\vec{k} = dk_1 dk_2 dk_3$.

$\vec{k}$ é o denominado vetor número de onda e seu módulo $k = \|\vec{k}\|$ é o número de onda. O número de onda tem dimensões de inversa do comprimento, assim um pequeno número de onda caracteriza uma grande comprimento de onda e viceversa.

Simbolicamente notamos as transformadas direta e inversa na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left[\vec{u}(\vec{x},t)\right] &\longrightarrow \underline{\hat{u}}(\vec{k},t) \\ \mathcal{F}^{-1}\left[\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)\right] &\longrightarrow \vec{u}(\vec{x},t), \end{aligned} \tag{27}$$

onde $\mathcal{F}$ é o operador transformada de Fourier espacial. Assim temos as seguintes regras para as transformadas

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[f] &\longrightarrow \hat{f} \\ \mathcal{F}\left[\frac{\partial f}{\partial x_i}\right] &\longrightarrow \imath k_i \hat{f} \\ \mathcal{F}\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_i}\right] &\longrightarrow -k^2 \hat{f} \\ \mathcal{F}\left[\nabla \cdot \vec{u}\right] &\longrightarrow \imath\vec{k} \cdot \underline{\hat{u}} \\ \mathcal{F}\left[\nabla \times \vec{u}\right] &\longrightarrow \imath\vec{k} \times \underline{\hat{u}} \\ \mathcal{F}[f\ g] &\longrightarrow \hat{f} * \hat{g} \end{aligned} \tag{28}$$

A transformada de Fourier de um produto de funções no espaço físico é um produto de convolução no espaço de Fourier definido por :

$$[\hat{f} * \hat{g}](\vec{k},t) = \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}} \hat{f}(\vec{p},t)\ g(\vec{q},t) d\vec{p}.$$

4.2.1 Equações de Navier-Stokes no espaço espectral

Considerando periodicidade nas três direções principais e utilizando as relações (28), as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e de escalar (1,2,3) são escritas no espaço espectral, em notação indicial, como :

$$\hat{u}_i k_i = 0, \tag{29}$$

$$\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial t} + \iota k_j \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}} \hat{u}_i(\vec{p},t)\hat{u}_j(\vec{q},t)d\vec{p} = -\frac{\iota}{\rho} k_i \hat{p} - \nu k^2 \ \hat{u}_i, \tag{30}$$

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} + \iota k_j \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}} \hat{u}_j(\vec{p},t)\hat{\theta}(\vec{q},t)d\vec{p} = -\kappa k^2 \ \hat{\theta}. \tag{31}$$

A equação de continuidade (29) indica que as soluções procuradas, $\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)$, são ortogonais ao vetor número de onda $\vec{k}$. Chamamos $P_{ij}(\vec{k})$ o operador de projeção em um plano π ortogonal a $\vec{k}$, definido por :

$$P_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}, \tag{32}$$

tal que a projeção de um vetor $\vec{a}$ no plano π seja

$$\vec{a}_\pi = \vec{a} - \frac{\vec{a}\cdot\vec{k}}{k^2}\vec{k}. \tag{33}$$

Aplicando o operador (32) na eq. (30) temos

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2) \ \hat{u}_i(k_i,t) = -\iota k_m P_{ij} \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}} \hat{u}_i(\vec{p},t)\hat{u}_m(\vec{q},t)d\vec{p}. \tag{34}$$

Como resultado da projeção no plano π ortogonal a $\vec{k}$ imposta pela equação de continuidade, a pressão foi eliminada da equação de quantidade de movimento, dado que seu rol é simplesmente assegurar que $\underline{\hat{u}} \perp \vec{k}$, operação realizada pelo operador P_{ij}. Uma outra característica destacada da equação de Navier-Stokes no espaço espectral é que, como resultado da transformação de Fourier, os termos não lineares colocam em evidência as interações entre diferentes vetores $\underline{\hat{u}}$ para diferentes $\vec{k}$. Essas interações, na forma de tríadas $(\vec{k},\vec{p},\vec{q})$, são tais que

$$\vec{k} = \vec{p} + \vec{q}. \tag{35}$$

Fala-se assim de *interações não lineares* ou *interações triádicas.* Pode-se distinguir também as *interações locais*

$$|\vec{k}| \approx |\vec{p}| \quad \text{e} \quad |\vec{k}| \approx |\vec{q}|$$

e as *interações não-locais*

$$|\vec{k}| \ll |\vec{p}| \quad \text{e} |\vec{k}| \ll |\vec{q}|.$$

A resolução numérica das eqs. (34) e (31) pode-se realizar eficientemente através de métodos pseudo-espectrais [2] (ver também [11]), nos quais o termo não linear é calculado no espaço físico de forma a evitar o cálculo de produtos de convolução.

Assim, trabalhando com a forma rotacional das equações de Navier-Stokes, as eqs. (30) e (31) são escritas na forma

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2)\ \underline{\hat{u}}(\vec{k},t) = F[F^{-1}(\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)) \times F^{-1}(\underline{\hat{\omega}}(\vec{k},t))] - \iota\vec{k}\widehat{p^*}, \tag{36}$$

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \kappa k^2)\ \hat{\theta}(\vec{k},t) = -\iota\vec{k}.F[F^{-1}(\hat{\theta}(\vec{k},t))F^{-1}(\underline{\hat{u}}(\vec{k},t))]. \tag{37}$$

onde F é o operador transformada de Fourier discreta, calculada pelo algoritmo da transformada de Fourier rápida (FFT),

$$\underline{\hat{\omega}} = \iota\vec{k} \times \underline{\hat{u}},$$

é o vetor vorticidade no espaço de Fourier e

$$p^* = \frac{p}{\rho} + \frac{\vec{u}\cdot\vec{u}}{2},$$

é a pressão generalizada. Seguindo o mesmo procedimento que para o caso contínuo, se decompõe a equação dinâmica em um plano ortogonal a $\vec{k}$:

$$\begin{aligned}(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2)\ \underline{\hat{u}}(\vec{k},t) &= F[F^{-1}(\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)) \times F^{-1}(\underline{\hat{\omega}}(\vec{k},t))]_{\perp\vec{k}}, \\ &= \Pi \circ \{F[F^{-1}(\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)) \times F^{-1}(\underline{\hat{\omega}}(\vec{k},t))]\},\end{aligned} \tag{38}$$

e paralelo a $\vec{k}$:

$$-\iota\vec{k}\widehat{p^*} + F[F^{-1}(\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)) \times F^{-1}(\underline{\hat{\omega}}(\vec{k},t))]_{\|\vec{k}} = 0, \tag{39}$$

onde Π é a forma discreta do operador de projeção P_{ij}. Verifica-se mais uma vez que a pressão foi isolada do problema dinâmico (38), podendo ser determinada pela eq. (39)

$$\widehat{p^*} = -\frac{\iota}{k^2}\vec{k}\cdot F[F^{-1}(\underline{\hat{u}}(\vec{k},t)) \times F^{-1}(\underline{\hat{\omega}}(\vec{k},t))]_{\|\vec{k}}, \tag{40}$$

uma vez obtido o campo de velocidades no espaço de Fourier.

4.2.2 Formalismo LES para o problema periódico 3D

O formalismo da simulação de grandes escalas no espaço spectral introduz a operação de filtragem :

$$\overline{\hat{f}}(\vec{k}) = \hat{G}(\vec{k})\hat{f}(\vec{k}), \tag{41}$$

[2] ver Capítulo 9 do presente volume

que nada mais é que a transformada de Fourier da eq. (12), onde $\hat{G}(\vec{k}) = F\left[G(\vec{x})\right]$. Quando utilizamos métodos espectrais ou pseudo-espectrais, o mais natural é escolher o filtro de corte no espaço de Fourier definido pela eq. (15).

Considerando a operação de filtragem (41) e o filtro espectral (15), as equações de quantidade de movimento e conservação de escalar passivo (38) e (37) são escritas, no sentido LES, na forma :

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2)\ \overline{\underline{\hat{u}}}(\vec{k},t) = \Big\{\Pi \circ \{F[F^{-1}(\overline{\underline{\hat{u}}}(\vec{k},t)) \times F^{-1}(\overline{\underline{\hat{\omega}}}(\vec{k},t))]\}\Big\}_{k<k_c} + t_{sg}(\vec{k},t), \tag{42}$$

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \kappa k^2)\ \overline{\hat{\theta}}(\vec{k},t) = \Big\{-\imath\vec{k}.F[F^{-1}(\overline{\hat{\theta}}(\vec{k},t))F^{-1}(\overline{\underline{\hat{u}}}(\vec{k},t))]\Big\}_{k<k_c} + t^{\theta}_{sg}(\vec{k},t). \tag{43}$$

Os dois primeiros termos no membro da direita das equações (42) e (43) denotam as transferências "supra-malha" e correspondem às interações triádicas de números de onda tais que $k < k_c$. Esses termos podem ser calculados explicitamente em uma simulação de grandes escalas. Os termos de transferência sub-malha, $t_{sg}(\vec{k},t)$ e $t^{\theta}_{sg}(\vec{k},t)$, originados da não-linearidade das equações de Navier-Stokes, devem ser modelados. Seguindo idéias originalmente expostas por Kraichnan [59], foi proposto modelar essas transferências sub-malha introduzindo a viscosidade e a difusividade espectrais (com dependência em k) [16], definidas como :

$$t_{sg}(\vec{k},t) = -\nu_t(k,k_c,t)\ k^2\overline{\hat{u}}_i(\vec{k},t), \tag{44}$$

$$t^{\theta}_{sg}(\vec{k},t) = -\kappa_t(k,k_c,t)\ k^2\overline{\hat{\theta}}(\vec{k},t)). \tag{45}$$

Na seção 6.1 serão apresentados modelos para calcular $\nu_t(k,k_c,t)$ e $\kappa_t(k,k_c,t)$.

4.2.3 Formalismo LES para o problema parcialmente periódico

Nas simulações numéricas de escoamentos livres em desenvolvimento espacial, o caso típico que se apresenta em uma experiência de laboratório, ou de escoamentos parietais em aproximação temporal, o canal turbulento temporal, por exemplo [62], a aproximação periódica 3D não é mais válida. Neste caso uma das direções do escoamento (a direção longitudinal para os escoamentos livres ou a vertical para os parietais) deve ser tratada no espaço físico introduzindo as correspondentes condições de contorno dependendo do fluxo considerado.

Seja x a direção no espaço físico, define-se assim $\underline{\hat{u}}(x,\vec{k}_{2D},t)$ e $\hat{\theta}(x,\vec{k}_{2D},t)$ como as transformadas bidimensionais de Fourier do campo de velocidades e o escalar passivo, onde $\vec{k}_{2D} = (k_y,k_z)$ é o vetor número de onda bidimensional.

Neste caso, as equações de conservação de quantidade de movimento e de escalar passivo, se escrevem na forma :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \nu(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k^2)\right]\hat{u}_i = \widehat{\vec{u}\times\vec{\omega}} - \nabla P, \tag{46}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \kappa(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k^2)\right]\hat{\theta} = -\nabla\cdot\widehat{\vec{u}\theta}, \tag{47}$$

onde $\nabla = (\partial/\partial x, \imath k_y, \imath k_z)$ e $k = \|\vec{k}_{2D}\|$.

A principal diferença entre o sistema de eqs. (46) e (47) e o sistema para o caso periódico 3D eqs. (30) e (31), é que a pressão não pode ser mais eliminada pela projeção em um plano ortogonal a $\vec{k}$ utilizando a equação de continuidade no espaço de Fourier. Neste caso deverá-se resolver uma equação de Poisson para o sistema parcialmente periódico que surge da aplicação de $\nabla\cdot$ na eq. (46) :

$$\nabla \cdot \nabla \hat{P} = \nabla \cdot \widehat{\vec{u} \times \vec{\omega}}. \tag{48}$$

O formalismo LES do problema parcialmente periódico deverá introduzir um novo filtro para a eliminação das flutuações menores que Δx. As possibilidades são várias; na prática opta-se quase sempre por incorporar um filtro top-hat para a direção x e o um filtro espectral bidimensional para as direções no espaço espectral.

A introdução destes filtros ao sistema de eqs. (46), (47) e (48) conduz às equações filtradas no sentido LES, a resolver para o caso parcialmente periódico. Os modelos sub-malha a utilizar podem ser definidos no espaço físico ou no espaço de Fourier expandindo o conceito de viscosidade e difusividade espectral para o problema bidimensional.

5 Introdução à simulação de grandes escalas de escoamentos compressíveis

O formalismo da simulação de grandes escalas aplicada a escoamentos compressíveis tem suas próprias particularidades e "aproximações", em comparação com o formalismo LES para escoamentos incompressíveis. Apresenta-se a continuação, as equações governantes para escoamentos compressíveis, o formalismo LES e o fechamento das equações correspondente. Para maiores detalhes as seguintes referências podem ser consultadas [22, 30, 32, 33, 88, 113, 122, 125].

5.1 Equações governantes para escoamentos compressíveis

As equações completas de continuidade, quantidade de movimento e energia para um gás perfeito (C_v, C_p constantes), são escritas na forma conservativa

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = 0, \tag{49}$$

com

$$U = {}^T(\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho e), \tag{50}$$

onde ρe é a energia total definida para um gás ideal como

$$\rho e = \rho\, C_v\, T + \tfrac{1}{2}\rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2), \tag{51}$$

e os fluxos F_i são, $\forall i \in \{1,2,3\}$

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 - \sigma_{i1} \\ \rho u_i u_2 - \sigma_{i2} \\ \rho u_i u_3 - \sigma_{i3} \\ \rho e u_i - u_i \sigma_{ij} - k \dfrac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix}, \tag{52}$$

onde $k(T) = \rho C_p \kappa(T)$ é a conductividade térmica e $\kappa(T)$ é a difusividade térmica.

As componentes do tensor de tensões σ_{ij} são dadas pela lei de Newton

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= -p\ \delta_{ij} + \mu(T)\ S_{ij} \\ &= -p\ \delta_{ij} + \mu(T)\ \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3}(\vec{\nabla}.\vec{u})\delta_{ij} \right], \end{aligned} \tag{53}$$

sendo S_{ij} a parte simétrica do tensor de taxa de deformação. As variáveis ρ, p e T estão ligadas através da equação dos gases perfeitos :

$$p = \rho\ R\ T, \tag{54}$$

onde $R = C_p - C_v$. Substituindo a eq. (53), os fluxos F_i são finalmente expressos na forma :

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p\delta_{i1} - \mu S_{i1} \\ \rho u_i u_2 + p\delta_{i2} - \mu S_{i2} \\ \rho u_i u_3 + p\delta_{i3} - \mu S_{i3} \\ (\rho e + p) u_i - \mu S_{ij} u_j - k \dfrac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix}. \tag{55}$$

A viscosidade molecular pode ser avaliada usando a lei de Sutherland :

$$\mu(T) = \begin{cases} \mu(273.15\ K)\sqrt{\dfrac{T}{273.15\ K}}\ \dfrac{1 + S/273.15\ K}{1 + S/T} & \text{se} \quad T \geq 120K \\ \mu(120\ K) T/120\ K \quad \text{senão,} \end{cases} \tag{56}$$

com $\mu(273.15\ K) = 1.711\ 10^{-5} Pl$ e $S = 110.4K$. A conductividade molecular $k(T)$ se obtém utilizando a aproximação de número de Prandtl constante $Pr = c_p \mu(T)/k(T)$. O sistema de equações compostos por (49),(50),(55), constitue um sistema fechado ao qual deve-se acrescentar apropriadas condições iniciais e de contorno.

5.2 Formalismo LES e fechamento

Consideremos, por simplicidade, malhas cúbicas de tamanho Δ, e o filtro "top-hat" definido por (13), com $\Delta_c = \Delta$. Neste caso o operador $\overline{(.)}$ (eq. 12), comuta com as derivadas com respeito ao tempo e espaço, obtendo as seguintes equações de conservação filtradas :

$$\frac{\partial \overline{U}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \overline{F}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \overline{F}_3}{\partial x_3} = 0, \tag{57}$$

com

$$\overline{\rho e} = \overline{\rho \ c_v \ T} + \tfrac{1}{2}\overline{\rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)}, \tag{58}$$

e

$$\overline{p} = \overline{\rho \ R \ T}. \tag{59}$$

Neste momento, é conveniente introduzir a média ponderada pela massa específica ou média de Favre $\widetilde{(.)}$, especialmente adaptada a escoamentos compressíveis [35] e definida por :

$$\widetilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}}. \tag{60}$$

Aplicando a média de Favre na eq. (57) obtemos o sistema de equações filtradas, onde :

$$\overline{U} = \ ^T(\overline{\rho}, \overline{\rho}\widetilde{u}, \overline{\rho}\widetilde{v}, \overline{\rho}\widetilde{w}, \overline{\rho}\widetilde{e}), \tag{61}$$

os fluxos filtrados são escritos como :

$$\overline{F}_i = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}_i \\ \overline{\rho u_i u_1} + \overline{p}\delta_{i1} - \overline{\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho u_i u_2} + \overline{p}\delta_{i2} - \overline{\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho u_i u_3} + \overline{p}\delta_{i3} - \overline{\mu S_{i3}} \\ \overline{(\rho e + p) u_i} - \overline{\mu S_{ij} u_j} - \overline{k \frac{\partial T}{\partial x_i}} \end{pmatrix}, \tag{62}$$

a energia total filtrada é definida como :

$$\overline{\rho}\widetilde{e} = \overline{\rho} \ c_v \ \widetilde{T} + \tfrac{1}{2}\overline{\rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)}, \tag{63}$$

e a equação de gases perfeitos filtrada é :

$$\overline{p} = \overline{\rho} \ R\widetilde{T}. \tag{64}$$

É importante salientar que até o presente momento, não foi realizada nenhuma simplificação às equações originais, e portanto as equações (57), (61) e (62) podem ser consideradas como as equações exatas, no sentido LES, a resolver.

Porém, a operação de filtragem introduz novas incógnitas, algumas das quais específicas aos escoamentos compressíveis, que precisam ser modeladas. O fechamento das equações de Navier-Stokes para escoamentos compressíveis não é um problema simples. Isto se deve, principalmente, ao uso de diferentes tipos de filtros; o filtro de Favre $\widetilde{(.)}$ e o top-hat $\overline{(.)}$, enquanto que o cálculo dá acesso a uma única variável filtrada (em particular, $\overline{u}_i$, não é acessível).

O fechamento que apresentamos a continuação é o mais simples que possa se imaginar e é baseado nas teorias de turbulência incompressível, a qual pode ser aceita se o número de Mach não é muito elevado.

Para os termos inerciais, é introduzido o tensor de tensões sub-malha, $\mathcal{T}_{ij}$, definido como ;

$$\mathcal{T}_{ij} = -\overline{\rho u_i u_j} + \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j, \tag{65}$$

o qual pode ser descomposto em duas partes :

$$\mathcal{T}_{ij} = \underbrace{\mathcal{T}_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll}\delta_{ij}}_{\tau_{ij}} + \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll}\delta_{ij}. \tag{66}$$

Assim temos que

$$\overline{\rho u_i u_j} = \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j - \tau_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll}\delta_{ij}. \tag{67}$$

Desta forma os fluxos filtrados se escrevem :

$$\overline{F}_i = \begin{pmatrix} \overline{\rho}\widetilde{u}_i \\ \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_1 + (\overline{p} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll})\delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_2 + (\overline{p} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll})\delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_3 + (\overline{p} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{ll})\delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{\mu S_{i3}} \\ \overline{(\rho e + p)u_i} - \overline{\mu S_{ij} u_j} - \overline{k\frac{\partial T}{\partial x_i}} \end{pmatrix}, \tag{68}$$

e a equação de energia filtrada

$$\overline{\rho e} = \overline{\rho}\ C_v\ \widetilde{T} + \tfrac{1}{2}\overline{\rho}(\widetilde{u}_1{}^2 + \widetilde{u}_2{}^2 + \widetilde{u}_3{}^2) - \tfrac{1}{2}\mathcal{T}_{ll}. \tag{69}$$

Para o tratamento do termo (não calculável) $\mathcal{T}_{ll}$, duas opções são possíveis:

- modela-lo em uma forma consistente com τ_{ij} [125, 88];
- desprezá-lo [33], dado que $\mathcal{T}_{ll} = \gamma\ M_{\mathrm{sgs}}^2\overline{p}$, onde M_{sgs} é o número de Mach sub-malha, baseado na velocidade rms, que deve ser pequeno quando M_∞ é moderado.

Consideraremos a segunda opção, dando mais um argumento. No formalismo LES para escoamentos incompressíveis é normalmente introduzida uma *macro-pressão* ou *pressão modificada* na forma

$$\varpi = \overline{p} - \tfrac{1}{3}\mathcal{T}_{ll}. \tag{70}$$

Assim, pode-se reconsiderar a equação (69) como

$$\overline{\rho e} = \overline{\rho}\ C_v\ \left(\widetilde{T} - \frac{1}{2C_v\overline{\rho}}\mathcal{T}_{ll}\right) + \tfrac{1}{2}\overline{\rho}(\widetilde{u}_1{}^2 + \widetilde{u}_2{}^2 + \widetilde{u}_3{}^2), \tag{71}$$

e introduzir uma *macro-temperatura*

$$\vartheta = \widetilde{T} - \frac{1}{2C_v\overline{\rho}}\mathcal{T}_{ll}, \tag{72}$$

calculável a partir da eq. (71). Assim, a equação de estado filtrada toma a forma :

$$
\begin{aligned}
\varpi &= \overline{\rho} R\vartheta + \left(\frac{R}{2C_v} - \frac{1}{3}\right)\mathcal{T}_{ll} \\
&= \overline{\rho} R\vartheta + \frac{3\gamma - 5}{6}\mathcal{T}_{ll}.
\end{aligned} \tag{73}
$$

Constata-se que para gases como argônio ou hélio onde $\gamma \approx 5/3$ a $T = 300K$, a contribuição de $\mathcal{T}_{ll}$ à eq. (73) é praticamente nula. Para outros gases, pode ser considerado

$$
\varpi \simeq \overline{\rho} R\vartheta \tag{74}
$$

dado que $\frac{3\gamma-5}{5}\gamma M_{\text{sgs}}^2 \ll 1$ quando $\gamma M_{\text{sgs}}^2 \ll 1$ [33].

Uma vez que ϖ é calculável, o fluxo de calor sub-malha Q_i pode ser definido na forma :

$$
Q_i = \overline{-(\rho e + p)u_i} + (\overline{\rho}\widetilde{e} + \varpi)\widetilde{u}_i. \tag{75}
$$

Invocando a hipótese de Boussinesq, ou seja, introduzindo a viscosidade e difusividade turbulenta para o tensor sub-malha τ_{ij} e para o fluxo de calor sub-malha Q_i respectivamente, temos que :

$$
\begin{aligned}
\tau_{ij} &\simeq \overline{\rho}\nu_t\,\widetilde{S_{ij}} \\
Q_i &\simeq \overline{\rho}\frac{\nu_t}{Pr^{(t)}}\frac{\partial\vartheta}{\partial x_i}.
\end{aligned} \tag{76}
$$

Os termos que contém coeficientes de viscosidade ou difusividade molecular são fechados da forma mais elementar

$$
\overline{\mu S_{ij}} \cong \mu(\vartheta)\widetilde{S_{ij}}, \quad \overline{\mu S_{ij} u_j} \cong \mu(\vartheta)\widetilde{S_{ij}}\widetilde{u_j} \quad \text{e} \quad \overline{k\frac{\partial T}{\partial x_i}} \cong k(\vartheta)\frac{\partial\vartheta}{\partial x_i}, \tag{77}
$$

o que é justificado para altos números de Reynolds e onde a viscosidade molecular é calculada pela lei de Sutherland, eq. (56), substituindo T por ϑ e a difusividade molecular a través do número de Prandtl na forma $\widetilde{k} = C_p\mu(\vartheta)/Pr$.

Introduzindo as eqs. (76) e (77) na eq. (68), os fluxos filtrados têm a forma final :

$$
\overline{F}_i = \begin{pmatrix}
\overline{\rho}\widetilde{u}_i \\
\overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_1 + \varpi\,\delta_{i1} - (\widetilde{\mu} + \overline{\rho}\nu_t)\,\widetilde{S_{i1}} \\
\overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_2 + \varpi\,\delta_{i2} - (\widetilde{\mu} + \overline{\rho}\nu_t)\,\widetilde{S_{i2}} \\
\overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_3 + \varpi\,\delta_{i3} - (\widetilde{\mu} + \overline{\rho}\nu_t)\,\widetilde{S_{i3}} \\
(\overline{\rho}\widetilde{e} + \varpi)\widetilde{u}_i - \widetilde{\mu}\widetilde{S_{ij}}\widetilde{u}_j - (\widetilde{k} + \rho C_p\kappa_t)\dfrac{\partial\vartheta}{\partial x_i}
\end{pmatrix}, \tag{78}
$$

onde o tensor de taxa de deformação filtrado é definido como

$$
\widetilde{S_{ij}} = \left[\frac{\partial\widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3}(\vec{\nabla}.\vec{\widetilde{u}})\delta_{ij}\right]. \tag{79}
$$

Na seção 6 serão introduzidos modelos de viscosidade e difusividade turbulenta que permitem fechar totalmente o sistema (57), (61) e (78) para simulações de grandes escalas.

6 Modelos sub-malha

Não se pretende neste capítulo descrever todos os modelos sub-malha e suas *inúmeras* variantes, vamos nos concentrar principalmente em alguns modelos (que foram testados pelo autor), sobre os quais possamos fazer uma análise crítica. Esta presentação será em grande parte, porém não exclusivamente, influenciada pelos trabalhos desenvolvidos no equipo MOST (Modelisation et Simulation de la Turbulence) em Grenoble, França. Outros desenvolvimentos, principalmente os vindos da escola americana de LES, são apresentados no capítulo 1 deste volume.

Os modelos sub-malha que permitem fechar completamente as equações de conservação de quantidade de movimento e de energia para escoamentos incompressíveis e compressíveis podem ser esquematicamente classificados em :

- os que utilizam o conceito de viscosidade turbulenta, que ainda podem ser subdivididos em
  - modelos de viscosidade turbulenta espectral (com dependência em k),
  - modelos de viscosidade turbulenta definida no espaço físico, apartir da hipótese de Boussinesq (22),
- os que procuram modelizar diretamente cada componente do tensor de tensões sub-malha e do fluxo do escalar sub-malha, às vezes, utilizado conjuntamente com um modelo de viscosidade turbulenta, o que configura a denominada modelagem mista,
- modelos baseados no procedimento denominado "dinâmico" no espaço físico e de Fourier, no qual as "constantes" dos modelos são avaliadas localmente em função do campo de velocidade filtrado.

Em LES as escalas dissipativas são pobremente resolvidas, assim o principal rol dos modelos sub-malha é o de remover energia das grandes escalas, de forma a "realizar o trabalho" proposto pela cascata de energia. De um ponto de vista teórico, os modelos baseados na determinação do tensor sub-malha são conceitualmente mais rigorosos. Não existe a priori necessidade de localizar o filtro em uma zona onde a turbulência seja homogênea e isotrópica (como veremos, será o caso nos modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta). Na prática, a determinação do tensor sub-malha se mostrou difícil e em muitos casos deve se recorrer a utilizá-lo conjuntamente com um modelo de viscosidade turbulenta que assegure a estabilidade do cálculo.

Em geral, os modelos baseados no conceito de viscosidade turbulenta são caracterizados pela avaliação das escalas de comprimento ℓ, e de velocidade υ, tais que :

$$\nu_t \sim \ell \, \upsilon \tag{80}$$

A diferença entre vários modelos está na escolha das escalas ℓ e υ. A escala de comprimento ℓ é normalmente determinada a partir da largura do filtro utilizado. Se a malha é regular e uniforme sua determinação não apresenta problemas, $\ell \sim \Delta_c$. Porém no caso de malhas irregulares, várias possibilidades são disponíveis envolvendo interações entre filtros de diferentes larguras. A solução adotada neste caso depende do grau de deformação da malha, medida pela relação de aspecto. Consideremos, por simplicidade, que o tamanho do filtro seja igual ao tamanho da malha. Para malhas com deformações não muito grandes, digamos, $\Delta x/\Delta y < 2$, a escala de comprimento pode ser determinada pela forma

$$\ell = \Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}. \tag{81}$$

Para os casos de malhas mais deformadas, típicas de escoamentos em geometrias complexas, a escala de comprimento ℓ pode ser determinada em diferentes formas :

$$l = \Delta = \begin{cases} max\,(\Delta x, \Delta y, \Delta z)\,, & \text{ou} \\ min\,(\Delta x, \Delta y, \Delta z)\,, & \text{ou} \\ (\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2)^{1/2} \end{cases} \tag{82}$$

Outra alternativa mais rigorosa, para grandes relações de aspecto, foi proposta considerando funções analíticas da relação de malhas como escala de comprimento característica na formulação (80) [109].

Antes de passar à descrição dos modelos sub-malha, apresentamos a continuação o princípio de incerteza [65], de fundamental importância para a compreensão do comportamento dos modelos no espaço físico e de Fourier. Consideremos para simplificar um domínio unidimensional, onde uma variável $\phi(x,t)$ periódica de período Δ_L, admite sua transformada de Fourier discreta $\hat{\phi}(k,t)$, definida para todo tempo t em um domínio de cálculo Δ_K. O princípio de incerteza limita a redução dos suportes de Δ_L e Δ_K, a :

$$\Delta_L \Delta_K \geq 1 \quad . \tag{83}$$

A interpretação mais simplista da eq. (83) é que não se pode ter uma descrição local no espaço físico e no espaço de Fourier ao mesmo tempo. Dito de outra forma,

- toda localidade no espaço físico, importante para captar fenômenos de intermitência nas pequenas escalas, será tranportada a todo o espectro de Fourier, ou

- toda localidade no espaço de Fourier, importante para caracterizar as escalas de dissipação na qual deve atuar um modelo sub-malha, terá seu suporte sobre todo o espaço físico.

Esta análise pode ser estendida a domínios tridimensionais introduzindo o vetor $\vec{k}$. Este conceito, introduzido por Heisenberg e emprestado da Mecânica Quântica, é de vital importância para comprender como deve "trabalhar" um modelo sub-malha em simulação de grandes escalas.

6.1 A viscosidade turbulenta espectral

Para introduzir o conceito de viscosidade turbulenta espectral, consideramos o caso simplificado da turbulência homogênea e isotrópica. A partir das equações de Navier-Stokes escritas no espaço de Fourier, é possível derivar [69] uma equação de evolução da energia cinética $E(k,t)$ na forma

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + 2\nu k^2 \right) E(k,t) = T_{<k_c}(k,t) + T_{>k_c}(k,t), \tag{84}$$

onde $T_{<k_c}(k,t)$ e $T_{>k_c}(k,t)$ representam as transferências de energia para o número de onda k resultante das interações triádicas (k,p,q). Se considerarmos os números de onda tais que $k < k_c$, $T_{<k_c}(k,t)$ caracteriza a transferência associada às tríadas p e $q \leq k$, enquanto $T_{>k_c}(k,t)$ caracteriza a transferência para as tríadas restantes (p e/ou $q > k_c$).

A teoria E.D.Q.N.M. de fechamento em dois pontos permite escrever uma equação *exata* para o termo de transferência $T_{>k_c}$ através de um desenvolvimento asintótico de k/k_c quando $k \ll k_c$. Esta expressão (que pode ser consultada em [69]) se simplifica consideravelmente assumindo que $E(k_c) < E(k)$, e introduzindo uma viscosidade espectral [59] temos

$$T_{>k_c} = -2\ \nu_t(k,k_c,t)\ k^2\ E(k,t). \tag{85}$$

Desta forma a equação de evolução para a energia cinética $E(k,t)$ para, $k \leq k_c$, se escreve

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + 2\ (\nu + \nu_t)\ k^2\right] E(k,t) = T_{<k_c}(k,t), \tag{86}$$

É importante salientar que a equação (86) é exata, porém sua resolução requer da determinação de $\nu_t(k,k_c,t)$ que necessita de uma hipótese de fechamento. Assim, assumindo um comportamento inercial (5) para $k > k_c$, a viscosidade espectral normalizada por $\epsilon^{2/3}{k_c}^{-4/3}$ apresenta um "plateau" pour $k/k_c < 0.3$ e depois crece exponencialmente na vizinhança de k_c [59]. Chollet e Lesieur [16] propuseram normalizar a viscosidade espectral por $[E(k_c,t)/k_c]^{1/2}$, na forma

$$\nu_t(k,k_c,t) = \nu_t^+(k/k_c)\left[\frac{E(k_c,t)}{k_c}\right]^{1/2}. \tag{87}$$

Isto é razoável dado que se considerarmos que $\nu_t \sim \upsilon\ell$, onde $\ell \sim k_c^{-1}$ e υ representam as escalas características de comprimento e velocidade, com υ determinado por

$$\frac{1}{2} < \overline{u}^2 > = \int_0^{k_c} E(k)\, dk\ \propto\ k_c\, E(k_c) \quad \rightarrow \quad \upsilon \propto \sqrt{k_c\ E(k_c)}\ , \tag{88}$$

obtemos finalmente (87), onde $\nu_t^+(k,k_c)$ é uma viscosidade turbulenta adimensional. Se ν_t^+ é limitada pode-se garantir que

$$\nu_t = 0 \Longleftrightarrow E(k_c,t) = 0. \tag{89}$$

Eq. (89) representa uma propriedade altamente atrativa para a simulação de escoamentos em transição; a viscosidade turbulenta espectral será nula enquanto a energia cinética na escala da malha de cálculo for nula. Dito de outra forma, se o processo de cascateamento de energia cinética ainda não conseguiu acumular suficiente energia cinética em k_c, não teriamos energia cinética sub-malha a dissipar.

Chollet [15] propos ajustar empiricamente a forma da função $\nu_t^+(k/k_c)$ pela expressão

$$\nu_t^+(k/k_c) = {\nu_t}^{+\infty}(1 + 34.5\ e^{-3.03(k_c/k)})\ , \tag{90}$$

com ${\nu_t}^{+\infty} = 0.267$ obtido, com a ajuda da teoria E.D.Q.N.M. e supondo a existência de uma zona inercial seguindo a lei de Kolmogorov (eq. 5). A forma desta curva é mostrada na Fig. 4.

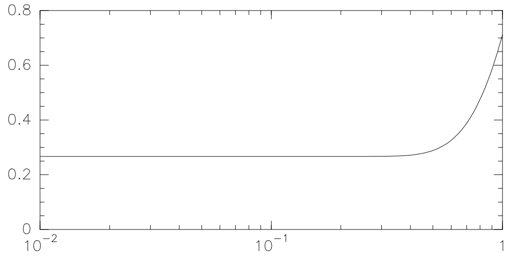

Figura 4: Curva mostrando $\nu_t^+/\nu_t{}^{+\infty}$ em função de (k/k_c) dado pela eq. (90)

Observa-se na figura o plateau de $\nu_t^+(k/k_c)$ que caracteriza a importância das interações não locais $(k/k_c < 0.3)$. O aumento da viscosidade espectral proximo a k_c, denominado efeito de "cusp", é devido às interações locais e semi-locais resultados do balanço entre as transferências direta e inversa de energia, entre os modos tais que $0.3 < k < k_c$ e as escalas sub-malhas. Este balanço é positivo, o que significa que, como resultado final, a ação das escalas sub-malha é dissipativa. Os modelos de viscosidade turbulenta apresentam sempre esta característica. Algums intentos de levar em conta os efeitos da remontada de energia proveniente das escalas não resolvidas para o canal plano turbulento foram propostos com diferente sucesso [99].

A implementação do modelo de viscosidade espectral em um código de LES no espaço espectral se faz simplesmente acrescentando os termos $\nu_t(k, k_c, t)k^2\hat{u}_i(\vec{k}, t)$ e $\kappa(k, k_c, t)k^2\hat{\theta}(\vec{k}, t)$ (com $\nu_t/\kappa_t = Pr_t = 0.6$ [14, 69]), para avaliar as transferências sub-malha de quantidade de movimento e energia, como foi indicado nas eqs. (44) e (45).

O modelo de viscosidade turbulenta definido no espaço de Fourier tem as seguintes limitações :

- o modelo não leva em conta na sua avaliação a organização em fase do escoamento;
- devido a sua localidade no espaço espectral, o modelo não pode representar fenômenos localizados no espaço físico como, por exemplo, a intermitência a pequena escala;
- o modelo não considera as diferenças com respeito ao comportamento gaussiano para a distribuição estatística das variáveis na qual toda a teoria de fechamento em dois pontos do modelo E.D.Q.N.M. é baseada;
- sua utilização é restrita a escoamentos em geometrias simples, envolvendo periodicidade 3D ou, pelo menos 2D, que permitam o uso de métodos pseudo-espectrais.

Apesar destas reservas o modelo de viscosidade espectral se mostrou apto para simular turbulência isotrópica [16, 71], escoamentos cisalhantes livres [20, 117] e turbulência em estratificação estável [81].

6.2 Modelos de viscosidade turbulenta no espaço físico

Os modelos sub-malha mais conhecidos e utilizados na atualidade são os modelos que supõem a existência de um escalar $\nu_t(\vec{x}, t)$, a viscosidade turbulenta, que permite calcular o tensor sub-malha através da hipótese de Boussinesq (22). Sendo um escalar, o modelo supõe que existe um alinheamento entre o tensor de tensões e o tensor de taxa de deformação. É importante salientar que esta hipótese mostrou-se incorreta mesmo para escoamentos a grandes números de Reynolds [77].

Substituindo assim, a eq. (22) nas eqs. (16) e (18), as equações para simulação de grandes escalas de escoamentos incompressíveis com massa específica, viscosidade e difusividade molecular constantes, são :

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0, \tag{91}$$

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{u}_i \overline{u}_j) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\nu_t \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i}\right)\right\}, \tag{92}$$

$$\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\theta}\overline{u}_j) = \kappa \frac{\partial^2 \overline{\theta}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\kappa_t \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j}\right\}, \tag{93}$$

onde foi introduzida a pressão modificada $P = p - (1/3)\rho T_{ll}$. Para avaliar a viscosidade e a difusividade turbulenta, dois modelos sub-malha são apresentados a continuação: o modelo de Smagorinsky [119] e o modelo da função de estrutura [82], dos quais existem um certo número de variantes.

6.2.1 Modelo de Smagorinsky

Foi o primeiro modelo sub-malha para LES desenvolvido no contexto de circulação geral da atmosfera [119]. Considerando a equação (80), a escala de velocidade υ é determinada pela escala de comprimento $\ell(=\Delta)$ e o tensor taxa de deformação filtrado $\overline{S}_{ij}$ [3]. Desta forma, o modelo de Smagorinsky é definido por

$$\nu_t^{SM}(\vec{x}, t) = (C_S \Delta)^2 \, |\overline{S}|, \tag{94}$$

onde $|\overline{S}| = \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ij}}$, $\overline{S}_{ij}$ é definido na eq. (24) e C_S uma constante. É importante notar que a constante C_s não é uma constante de "ajuste". Seu valor pode ser determinado considerando uma turbulência homogênea e isotrópica seguindo uma lei de Kolmogorov de extensão infinita [74], obtendo :

$$C_S \approx \frac{1}{\pi}\left(\frac{3}{2}C_K\right)^{-3/4} \quad , \tag{95}$$

ou seja $C_S = 0.18$ para $C_K = 1.4$. Na prática foi constatado que para simular um canal turbulento o valor de C_S deveria ser diminuido a 0.1, e ainda multiplicar ν_t^{SM} por uma função empírica de amortecimento $[1 - \exp(y^+/25)]$ para ter o bom comportamento assintótico na parede do canal [26, 85]. Sem função de amortecimento, a dissipação ocasionada pelo modelo chega a 35% da dissipação molecular, enquanto que com função de amortecimento, é reduzida a 7% o que é ainda excessivo [100]. Seu caráter dissipativo não permite simular as diferentes etapas da transição em camada limite exceto nos casos fortemente perturbados, denominados "by-pass transition" [121].

[3] $\widetilde{S_{ij}}$ para os escoamentos compressíveis

6.2.2 Modelo da função de estrutura

Este modelo foi concebido como a transposição no espaço físico do modelo de viscosidade turbulenta espectral ampliando assim sua utilização para escoamentos complexos onde métodos pseudo-espectrais não podem ser usados. É importante notar que a parte do "plateau" no modelo de viscosidade espectral corresponde ao clássico modelo de viscosidade turbulenta, o qual assume, de fato, uma separação de escalas entre as escalas resolvidas e as sub-malha. Isto é certamente incorreto e fixa, portanto, o limite dos modelos de viscosidade turbulenta definidos no espaço físico. A parte do "cusp" no modelo de viscosidade espectral é importante dado que contém efeitos que não podem ser considerados nos modelos de viscosidade turbulenta.

Para determinar $\nu_t(\vec{x},t)$, a energia cinética na menor escala resolvida $E(\vec{x},k_c,t)$ deve ser determinada (lembrando que a menor escala resolvida é $\Delta = \pi/k_c$). Este "espectro local" pode ser calculado introduzindo a *função de estrutura de ordem dois de velocidade resolvida* $\overline{F}_2(\vec{x},t)$, definida como :

$$\overline{F}_2(\vec{x},t) = \left\langle \|\overline{u}_i(\vec{x}+\vec{r},t)) - \overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 \right\rangle_{\|\vec{r}\|=\Delta}. \tag{96}$$

onde $\langle\rangle$ indica média de realizações. Em turbulência homogênea isotrópica, o espectro de energia cinética é relacionado a função de estrutura [3] por

$$F_2(\vec{x},t) = 4\int_0^{k_c} E(k,t)\left(1-\frac{\sin k\Delta}{k\Delta}\right)dk, \tag{97}$$

e considerando um espectro de Kolmogorov de extensão infinita, obtemos

$$E(\vec{x},k_c,t) = \frac{1}{4.82}\pi^{-5/3}\ \Delta\ \overline{F}_2(\vec{x},\Delta,t). \tag{98}$$

Assim, o modelo de função de estrutura [82] se escreve como :

$$\nu_t^{SF}(\vec{x},t) = C_{sf}\ \Delta\ \sqrt{\overline{F}_2(\vec{x},t)}, \tag{99}$$

onde $C_{sf} = 0.105\ C_K^{-3/2}$.

Como envolve incrementos de velocidades em vez de derivadas, o modelo da função de estrutura tem a vantagem de ser definido independentemente do esquema numérico usado. Na pratica, não sempre se tem acesso à medias de realizações, e na maioria dos casos devemos nos contentar com médias locais. Assim $\langle\rangle$ em (96) é determinado considerando os pontos vizinhos do ponto $\vec{x}$. Por exemplo, para malhas cúbicas, a média pode se fazer sobre os seis pontos vizinhos na forma :

$$\begin{aligned}\overline{F}_2(\vec{x},t) = \frac{1}{6}\Big[&\|\overline{u}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_1,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \|\overline{u}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_1,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \\ &\|\overline{u}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_2,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \|\overline{u}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_2,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \\ &\|\overline{u}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_3,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \|\overline{u}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_3,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2\Big]\quad ,\end{aligned} \tag{100}$$

onde $\Delta\vec{x} = \Delta x_i \vec{e}_i$ é passo de espaço orientado na direção i.

Nos escoamentos cisalhantes em geral e nos escoamentos parietais em particular, é importante que a função de estrutura não contenha informação sobre o movimento das grandes escalas; depois de (96) e (97) a função de estrutura é definida sobre o espectro de energia cinética em k_c. No caso de escoamentos temporais (periódicos) temos acesso às velocidades médias e assim podemos calcular a função de estrutura sem levar em conta o escoamento médio. No caso dos escoamentos em desenvolvimento espacial, no qual não temos acesso às velociades médias, foi proposto de avaliar a função de estrutura sobre o plano perpendicular ao gradiente de velocidades médio [92] na forma :

$$\overline{F}_2(\vec{x},t) = \frac{1}{4}\left[\|\overline{u}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_1,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \|\overline{u}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_1,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \right.$$
$$\left. \|\overline{u}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_3,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2 + \|\overline{u}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_3,t)-\overline{u}_i(\vec{x},t)\|^2\right] \quad . \tag{101}$$

O modelo da função de estrutura foi utilizado na simulação numérica de vários escoamentos em diferentes configurações: turbulência homogênea isotrópica e turbulência estratificada [82], o degrau descendente [112], esteiras em desenvolvimento espacial [48], turbulência isotrópica sujeita a rotação [2], camada limite compressível [92, 29]. Apesar dos resultados razoáveis obtidos com o modelo, seu comportamento não é melhor que o modelo de Smagorinsky. Em camada limite, por exemplo, as flutuações de velocidade de baixos números de onda correspondente a modos instáveis, dão valores de $\nu_t(\vec{x},t)$ grandes demais, afetando assim a taxa de crecimento de instabilidades bidimensionais como as ondas de Töllmien-Schlichting.

Em geral, pode-se dizer que o modelo se comporta de forma equivalente ao modelo de Smagorinsky, a pesar das diferenças na teoria de ambos modelos (ver discusão na seção 6.5). Os dois modelos dissipam excessivamente na zonas de transição e nas regiões próximas à parede. O comportamento semelhante dos dois modelos não é de surpreender. De fato, pode-se mostrar que [22], a primeira ordem, o modelo da função de estrutura se escreve

$$\nu_t^{SF}(\vec{x},t) = 0.777\ (C_S\ \Delta)^2\ \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ij} + \overline{\omega_i\omega_i}} \quad , \tag{102}$$

assim o modelo da função de estrutura será menos dissipativo que o modelo de Smagorinsky nas regiões de vorticidade fraca, enquanto será mais dissipativo no centro dos turbilhões.

O problema principal do modelo da função de estrutura é que na transposição ao espaço físico do modelo espectral se perdeu a propriedade dada por (89), muito importante na simulação de escoamentos em transição. O modelo da função de estrutura, sendo local no espaço físico, não pode ser local no espaço espectral devido à restrição imposta pelo princípio de incerteza (83). Apresentaremos a seguir duas modificações do modelo da função de estrutura com o objetivo de aumentar o suporte do modelo no espaço espectral em detrimento de sua localidade no espaço físico.

Modelo da função de estrutura seletiva. Neste modelo, a função de estrutura é calculada somente se o escoamento é localmente tridimensional [25]. O critério de tridimensionalidade a pequena escala é baseado sobre o ângulo que forma em cada ponto $(\vec{x},t)$, o vetor vorticidade filtrado $\overline{\omega}_i(\vec{x},t)$ com uma média sobre uma certa vizinhança de $\vec{x}$. Um valor elevado deste ângulo, indicado $\langle\alpha\rangle_\Delta(\vec{x},t)$, significa que a direção de $\overline{\omega}_i$ varia na região de $\vec{x}$ o que pode ser interpretado como um indicador de turbulência de pequena escala. Neste caso se introduz um filtro, $\Phi = 1$, que indica que função de estrutura deve ser calculada. Pelo contrário, se o valor do ângulo é pequeno, pode-se interpretar como a tendência de alinhamento da vorticidade com sua vizinhança, o escoamento então é laminar ou em início de transição ou bidimensional (neste caso o filtro $\Phi = 0$ e a viscosidade turbulenta é nula). Na prática, calcula-se o vetor vorticidade médio $\langle\overline{\omega}_i\rangle_\Delta(\vec{x},t)$ como a média centrada de $\overline{\omega}_i$ em $\vec{x}$ e seus seis pontos vizinhos :

$$\langle\overline{\omega}_i\rangle_\Delta(\vec{x},t) = \frac{1}{6}\Big[\overline{\omega}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_1,t)+\overline{\omega}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_1,t)+\overline{\omega}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_2,t)+\overline{\omega}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_2,t)+ \\ \overline{\omega}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_3,t)+\overline{\omega}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_3,t)\Big]. \quad (103)$$

O ângulo $\langle\alpha\rangle_\Delta(\vec{x},t)$ é definido por

$$\langle\alpha\rangle_\Delta(\vec{x},t) = \arcsin\frac{\|\overline{\omega}_i(\vec{x},t)\ \times\ \langle\overline{\omega}_i\rangle_\Delta(\vec{x},t)\|}{\|\overline{\omega}_i(\vec{x},t)\|\ \|\langle\overline{\omega}_i\rangle_\Delta(\vec{x},t)\|} \quad , \quad (104)$$

e a viscosidade turbulenta é assim calculada por

$$\nu_t^{SSF}(\vec{x},t) = C_{ssf}\ \Phi_{\alpha_0}(\vec{x},t)\ \Delta\ \sqrt{\overline{F}_2(\vec{x},t)} \quad , \quad (105)$$

com $C_{ssf} = 0.104$ e

$$\Phi_{\alpha_0}(\vec{x},t) = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad \langle\alpha\rangle_\Delta(\vec{x},t) \geq \alpha_0 \\ 0 & \text{senão} \end{cases} \quad . \quad (106)$$

O valor de α_0 foi escolhido em função de simulações de grandes escalas de turbulência homogênea isotrópica incompressível, realizada com o modelo da função de estrutura (98) para resoluções de 32^3 e 48^3 modos de Fourier. Uma vez atingido o estado autosimilar, as funções de densidade de probabilidade do ângulo $\langle\alpha\rangle_\Delta(\vec{x},t)$ indicavam um pico para $\alpha_0 = 20°$ [25]. O problema principal deste modelo é a variabilidade de α_0 com a resolução ($\alpha_0 \to 0$ quando $\Delta \to 0$, a partir de (104)), assim uma formulação definitiva deve ainda ser desenvolvida. Mesmo assim, o modelo com $\alpha_0 = 20°$, forneceu bons resultados em simulações de turbulência homogênea isotrópica, camada limite com transferência de calor, rampas de compressão [25] e degrau descendente inclinado [89].

Modelo da função de estrutura filtrada. Uma outra tentativa de tornar $\overline{F}_2$ mais local no espaço espectral foi proposta [28], aplicando um filtro laplaciano iterado m vezes sobre o campo de velocidades filtrado antes de calcular a função de estrutura, tornando-a menos sensível ao movimento de grandes escalas. O filtro laplaciano é discretizado em segunda ordem com um esquema centrado na forma :

$$\mathcal{L}^m(\overline{u}_i) = \underbrace{[\mathcal{L}\circ\mathcal{L}\cdots\circ\mathcal{L}]}_{m \text{ vezes}}(\overline{u}_i) \quad (107)$$

onde

$$\mathcal{L}(\overline{u}_i) = \sum_j\left[\overline{u}_i(\vec{x}-\Delta\vec{x}_j,t) - 2\overline{u}_i(\vec{x},t) + \overline{u}_i(\vec{x}+\Delta\vec{x}_j,t)\right] \quad , \quad (108)$$

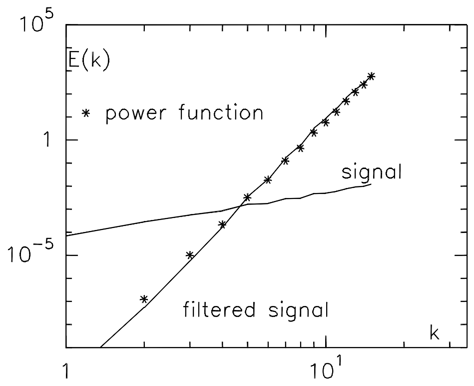

Figura 5: Relação entre entre $E(\overline{u}_i)$ e $E[\mathcal{L}^3(\overline{u}_i)]$ em função da eq. (109).

$j \in \{1,2,3\}$ para escoamentos livres e $j \in \{1,3\}$ para escoamentos parietais. O melhor resultado foi obtido com $m = 3$ [30]. Simulações realizados em um domínio cúbico com condições de contorno periódicas nas três direções permitiram obter a relação seguinte :

$$\frac{E[\mathcal{L}^3(\overline{u}_i)]}{E(\overline{u}_i)} \approx a\pi^b \left(\frac{k}{k_c}\right)^b \quad , \quad \forall k \in [0, k_c[\tag{109}$$

com $a = 0.57$ e $b = 10.1$, independente do campo de velocidades filtrado $\overline{u}_i$ e da resolução. A Fig. 5 mostra o efeito da filtragem quando o sinal de entrada $\overline{u}_i$ é um ruído branco discretizado com 32^3 modos de Fourier. Considerando agora um espectro de energia cinética seguindo uma lei de Kolmogorov (5) obtem-se :

$$\nu_t^{FSF}(\vec{x},t) = C_{fsf}\ \Delta\ \sqrt{\widetilde{\overline{\mathcal{F}}}_2(\vec{x},t)} \quad , \tag{110}$$

onde

$$\widetilde{\overline{\mathcal{F}}}_2(\vec{x},t) = \left\langle \| [\mathcal{L}^3(\overline{u}_i)](\vec{x}+\vec{r},t)) - [\mathcal{L}^3(\overline{u}_i)](\vec{x},t) \|^2 \right\rangle_{\|\vec{r}\|=\Delta} \quad , \tag{111}$$

e $C_{fsf} = 0.0014\ C_K^{-3/2}$. Com este modelo foi possível simular uma camada limite fracamente compressível (a Mach $= 0.5$) em desenvolvimento espacial sem forçagem forte, entre $Re_x = 3.3\ 10^5$ e $1.14\ 10^6$, o que envolve todas as etapas de transição.

6.3 Modelos baseados no procedimento "dinâmico"

Considereramos aqui os modelos do segundo e terceiro tipo classificados na relação introduzida na início da seção 6. Ao respeito dos modelos denominados "dinâmicos", será brevemente descrito o procedimento no espaço físico e no espaço de Fourier.

6.3.1 Modelos dinâmicos no espaço físico

Devido a uma certa insatisfação com o comportamento próximo da parede dos modelos sub-malha baseados na conceito da viscosidade turbulenta, novos métodos que permitem ajustar a "constante" dos modelos tradicionais foram desenvolvidos. Estes métodos têm suas origens nos trabalhos de Germano [42] e foram batizados com o nome de modelos baseados no procedimento dinâmico ou, diretamente, modelos dinâmicos. Este procedimento foi utilizado para desenvolver novos modelos sub-malha principalmente a partir de trabalhos realizados no CTR (Center of Turbulence Research) em Stanford, USA [43, 97].

A idéia deste método é a de aproveitar o conhecimento dos movimentos a grande escala para determinar a constante apropriada. A hipótese subjacente do método é que o comportamento das *menores escalas resolvidas* apresenta similaridade com o comportamento das escalas *sub-malhas* a modelizar (hipótese de similaridade entre escalas introduzida por Bardina [1]). A partir de este trabalho houve uma sucessão de artigos sobre diferentes formas de calcular o tensor T_{ij} e os problemas relativos a estabilidade dos cálculos respectivos. Em geral, estes modelos se mostraram pouco dissipativos como para estabilizar o cálculo, necessitando assim ser usado conjuntamente com um modelo de viscosidade turbulenta, o que deu origem à formulação mista.

O procedimento dinâmico introduz um segundo filtro, chamado filtro teste $\widehat{(.)}$ (não confundir com a variável definida no espaço de Fourier) de largura $\alpha\Delta$ (tipicamente $\alpha = 2$). A aplicação deste segundo filtro nas equações já filtradas (eq. 16) [4] faz aparecer um novo tensor de tensões sub-malha

$$\mathcal{T}_{ij} = \widehat{\overline{u}}_i \widehat{\overline{u}}_j - \widehat{\overline{u_i u_j}}, \tag{112}$$

comparável ao tensor de tensões sub-malha T_{ij} definido sobre $\overline{u}_i$ em (19). Introduzindo o tensor de tensões filtrado do campo de velocidade $\widehat{\overline{u}}_i$, acessível em uma simulação de grandes escalas como :

$$\mathcal{L}_{ij} = \widehat{\overline{u}}_i \widehat{\overline{u}}_j - \widehat{\overline{u}_i \overline{u}_j}, \tag{113}$$

obtemos a relação

$$\mathcal{L}_{ij} = \mathcal{T}_{ij} - \widehat{T}_{ij}. \tag{114}$$

A equação (114) é denominada identidade de Germano. Nesta igualdade, somente o tensor $\mathcal{L}_{ij}$ pode ser calculado explicitamente enquanto que os outros tensores $\mathcal{T}_{ij}$ e T_{ij} devem ser modelados. Por exemplo, utilizando o modelo de Smagorinsky temos que :

$$\mathcal{T}_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{kk}\delta_{ij} = 2\ C\ (2\Delta)^2 |\widehat{\overline{S}}| \widehat{\overline{S}}_{ij} \quad , \tag{115}$$

$$\widehat{T}_{ij} - \frac{1}{3}\widehat{T}_{kk}\delta_{ij} = 2\ C\ \Delta^2 \widehat{|\overline{S}|\overline{S}_{ij}} \quad , \tag{116}$$

onde $C = C_S^2$, ou com o modelo da função de estrutura :

$$\mathcal{T}_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{T}_{kk}\delta_{ij} = 2\ C_{sf}\ 2\Delta\ \sqrt{\widehat{\overline{F}_2}}\ \widehat{\overline{S}}_{ij} \quad , \tag{117}$$

$$\widehat{T}_{ij} - \frac{1}{3}\widehat{T}_{kk}\delta_{ij} = 2\ C_{sf}\ \Delta\ \widehat{\sqrt{\overline{F}_2}\ \overline{S}_{ij}} \quad . \tag{118}$$

[4] O formalismo do procedimento dinâmico aplicado aos escoamentos compressíveis foi desenvolvido em [88]

Substituindo, por exemplo, as eqs. (117) e (118) na eq. (114), a "constante" C_{sf}, que agora é a variável $C_{sf}(\vec{x},t)$, pode ser determinada a partir de :

$$\widehat{\overline{u}}_i\widehat{\overline{u}}_j - \widehat{\overline{u}_i\overline{u}_j} = 2\ C_{sf}\left[2\Delta\ \sqrt{\widehat{\overline{F}_2}}\ \widehat{\overline{S}}_{ij} - \Delta\ \widehat{\sqrt{\overline{F}_2}\ \overline{S}_{ij}}\right] = 2\ C_{sf}\ M_{ij} \quad . \tag{119}$$

A eq. (119) apresenta um problema de sobre-determinação, temos cinco equações para uma única incógnita. Germano *et al.* (1991) [43] propuseram de tomar o produto escalar de (119) com $\overline{S}_{ij}$ e Lilly (1992) [75] minimizou o erro por mínimos quadrados. Esta última operação é equivalente a fazer o produto escalar de (119) com M_{ij} [36] :

$$C_{sf} = \frac{1}{2}\frac{\mathcal{L}_{ij}M_{ij}}{M_{ij}M_{ij}} \quad . \tag{120}$$

Desta forma, pode-se calcular C_{sf} localmente, em cada ponto $(\vec{x},t)$. É importante notar que (120) pode dar valores negativos (ou seja, viscosidades turbulentas negativas), o que foi interpretado como a possiblidade do modelo de levar em conta o fenômeno "backscatter" ou de cascata inversa [99].

Porém, valores negativos de viscosidade turbulenta, podem ser uma fonte potencial de instabilidades no cálculo, ao ponto de fazer a solução divergir. De fato, isso foi o que ocorreu com (120) quando o modelo de Smagorinsky foi utilizado (e certamente deve também ocorrer com o modelo da função de estrutura). A solução proposta foi de trabalhar com a média de (120) em uma direção homogênea para os escoamentos em desenvolvimento espacial ou em duas direções homogêneas para os escoamentos temporais.

Com o procedimento dinâmico e o modelo de Smagorinsky, foram obtidos bons resultados na simulação do canal plano na sua fase de transição e turbulenta [43, 97]. Porém, a necessidade de calcular médias em uma direção homogênea dificulta sua utlização em escoamentos com geometrias complexas. Uma nova alternativa foi desenvolvida baseada em um problema de otimização de (120) com uma restrição: a viscosidade total $(\nu + \nu_t)$ deve ser positiva em todo o domínio. O modelo assim desenvolvido foi denominado de localização dinâmica [45].

Lembremos, finalmente, que o procedimento dinâmico foi também utilizado em outros tipos de modelos de turbulência tais como: o modelo misto que é um modelo de tipo Bardina [1] mais um modelo de viscosidade turbulenta [126], o modelo de localização dinâmica com uma equação de evolução para a energia cinética sub-malha [45] e o modelo da função de estrutura [31].

Como exemplo da modelagem mista, apresentamos a continuação o modelo de incrementos de velocidade recentemente desenvolvido [10, 9]. Este modelo é baseado na separação do tensor sub-malha em duas contribuições, uma denominada "lenta", relacionada à interação entre pequenas escalas, e a outra "rápida", relacionada à interação devida ao cisalhamento médio do escoamento. Assim da eq. (19) temos

$$T_{ij} = \overline{u}_i\overline{u}_j - \overline{u_iu_j} = T_{ij}^{lenta} + T_{ij}^{rapida}. \tag{121}$$

A parte lenta é modelada usando o conceito de viscosidade turbulenta com o modelo da função de estrutura enquanto que a parte rápida é calculado usando a similaridade entre escalas (hipótese de Bardina [1]) introduzindo o tensor de incrementos de velocidades

$$Q_{ij} = \delta v_i \; \delta v_j. \tag{122}$$

onde

$$\delta v_i = \sum_{k=1}^{3} \left[v_i(x_k + \Delta x_k/2) - v_i(x_k - \Delta x_k/2) \right]. \tag{123}$$

Assim foi proposto a seguinte formulação mista :

$$T_{ij}^{lenta} = 2 \; \nu_t \; \overline{S}_{ij} = 2 \; C_{sf} \; \Delta \; \sqrt{F_2} \; \overline{S}_{ij}, \tag{124}$$

$$T_{ij}^{rapida} = -C_{inc} \; Q_{ij} = -C_{inc} \; \delta v_i \delta v_j. \tag{125}$$

A parte lenta visa representar as pequenas escalas do escoamento, das quais é esperado que exibam um comportamento correpondente à lei de Kolmogorov. Assim, $C_{sf} = 0.105 C_K^{-3/2}$ e sua determinação, é baseado na quantidade de energia transferida das grandes às pequenas escalas em k_c. A parte rápida envolve o cálculo do coeficiente C_{inc}, o qual é determinado localmente em espaço e tempo através do uso do procedimento dinâmico aplicado ao tensor geralizado de Leonard na forma :

$$C_{inc}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4} \frac{\widehat{v_k v_k} - \hat{v}_k \hat{v}_k}{\delta v_l \; \delta v_l}, \tag{126}$$

onde o filtro teste $\widehat{(.)}$ tem uma largura igual a duas vezes a largura do filtro implícito $\overline{(.)}$. A presente formulação do modelo misto *incremento de velocidade - função de estrutura*, foi testada com sucesso em LES de jatos redondos com $Re_D = 3000$ e $Re_D = 25000$ [9] e no escoamento turbulento em tubos circulares para $Re_\tau = 180$ [10].

6.3.2 Modelo espectral dinâmico

A principal crítica ao modelo de viscosidade espectral descrito pela eqs. (87,90) é que na avaliação de $\nu_t^{+\infty}(k_c, t) = 0.267$, foi considerado um espectro de Kolmogorov em k_c. Esta condição não é certamente válida em regiões em transição ou próximas de paredes, mesmo para grandes números de Reynolds. Para evitar esse problema, foi proposto [62, 82] de avaliar a viscosidade $\nu_t^{+\infty}(k_c, t)$ de uma forma menos restritiva, supondo um comportamento para a energia cinética seguindo uma lei de potência do tipo $E(k) \propto k^{-m}$, obtendo assim :

$$\nu_t^{+\infty}(k_c, t) = 0.306 \; C_K^{-\frac{3}{2}} \; \frac{5-m}{m+1} \; (3-m)^{\frac{1}{2}}, \tag{127}$$

válida para $m < 3$. Para espectros com maior declividade a normalização de ν_t é proporcional a $E(k_c)/k_c$, enquanto que para declividades do espectro superior a 5, a viscosidade espectral torna-se negativa [82]. Desta forma o modelo de viscosidade espectral dinâmico pode ser escrito em sua forma completa como:

$$\nu_t(k, k_c, t) = 0.306 \; C_K^{-\frac{3}{2}} \; \frac{5-m}{m+1} \; (3-m)^{\frac{1}{2}} \; (1 + 34.5 \; e^{-3.03(k_c/k)}) \; \left[\frac{E(k_c, t)}{k_c} \right]^{1/2}, \tag{128}$$

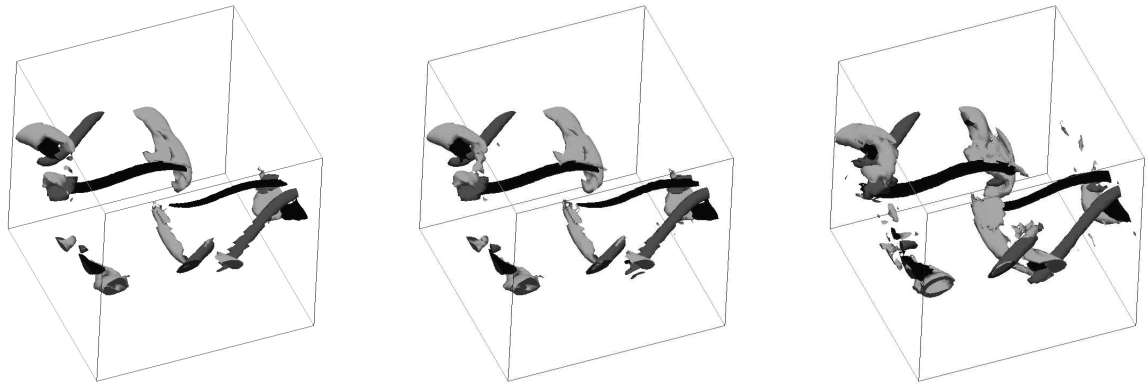

Figura 6: Comparação de modelos sub-malha em uma camada de mistura temporal incompressível - Iso-superfícies de vorticidade longitudinal e lateral em ω_i. Modelos de Smagorinsky (SM), função de estrutura (SF) e função de estrutura em quatro pontos (SF4).

com o número de Prandtl turbulento associado

$$P_r^t = 0.18\ (5 - m)\ . \tag{129}$$

A declividade do espectro de energia cinética $m = m(t)$ pode ser avaliada em cada passo de tempo pelo método dos mínimos quadrados, a partir do espectro de energia cinética entre $k_c/2$ e k_c, por exemplo.

Para escoamentos parietais em aproximação temporal, o modelo foi adaptado para levar em conta a variabilidade vertical da declividade do espectro de energia cinética [62]. Assim, $m = m(y,t)$ foi calculado para espectros de energia cinética bidimensionais a cada posição vertical y. Esta mudança com respeito ao modelo de viscosidade espectral foi vital para ter o bom comportamento próximo de parede, e se traduz em uma previsão das flutuações de velocidades da ordem de 5% dos valores experimentais [62].

6.4 Testes de modelos sub-malha

A continuação analizaremos resultados sobre comportamento de alguns dos modelos sub-malha, basicamente, os baseados no conceito de viscosidade turbulenta espectral e no espaço físico apresentados na seção anterior. Vamos considerar dois escoamentos fundamentais: a camada de mistura temporal e a camada limite fracamente compressível.

No caso da camada de mistura temporal foram escolhidos os seguintes modelos: modelo espectral (SV), modelo espectral dinâmico (DSV), modelo da função de estrutura (SF6) e suas variantes, o modelo da função de estrutura a quatro pontos (SF4), o modelo da função de estrutura seletiva (SSF) e o modelo da função de estrutura filtrada (FSF). O fato de considerar um escoamento livre temporal permite utilizar um código pseudo-espectral, a priori mais preciso que um código de diferenças finitas e onde, portanto, as diferenças observadas serão diretamente imputadas ao modelo sub-malha utilizado, se os outros parâmetros da simulação forem os mesmos.

A resolução escolhida foi 64^3 modos de Fourier, com condições de contorno de deslizamento sem atrito na direção y, condições de periodicidade em x e z e viscosidade molecular nula. O domínio

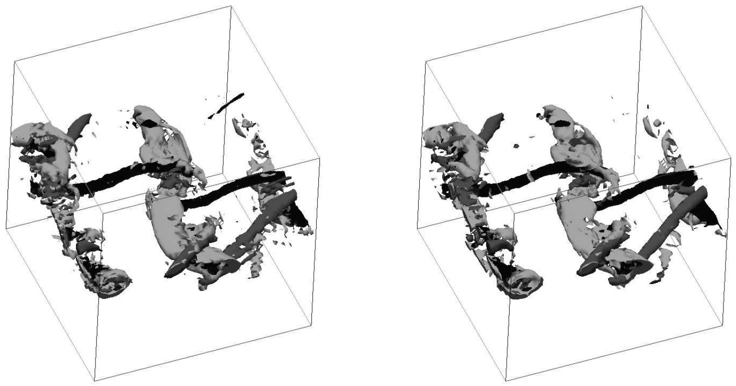

Figura 7: Idem Fig. (6) para os modelos de viscosidade espectral (SV) e espectral dinâmico (DSV).

de cálculo é $L_x = L_y = L_z = 2\ \lambda_a = 14\ \delta_i$ ("cálculo a dois turbilhões"), onde λ_a é o comprimento de onda mais amplificado predito pela teoria de estabilidade linear [6, 84], e δ_i é a espessura de vorticidade inicial da camada de mistura. A condição inicial é dada por um escoamento de base :

$$\overline{u}_i(\vec{x}, t = 0) = U\ \tanh\left(\frac{2y}{\delta_i}\right)\ \vec{e}_2, \tag{130}$$

onde U é a semi-diferença entre as velocidades U_1 e U_2 das duas correntes paralelas. Ao escoamento de base é superposto um ruído de pequena amplitude constituido por perturbações aleatórias isotrópicas de energia cinética εU^2 com $\varepsilon = 10^{-4}$. Todas as simulações foram realizadas com a *mesma* condição inicial e, portanto, as diferenças nos resultados pode ser diretamente imputada ao comportamento dos modelos sub-malhas utilizados.

Figuras 6, 7 e 8 apresentam visualizações instantâneas da vorticidade longitudinal e transversal para os sete modelos no instante $t = 14\ \delta_i/U$; este tempo caracteriza a formação dos vórtices primários ou de Kelvin-Helmholtz (KH). O valor das iso-superfícies de vorticidade evidenciam a intensidade dos vórtices KH e dos vórtices longitudinais.

A Fig. 6 mostra claro o caráter dissipativo dos modelos de Smagorinsky e da função de estrutura; os dois dissipam nas zonas de reconexão entre vórtices longitudinais e vórtices KH, igualmente que a turbulência de pequena escala resolvida. Este resultado fica mais evidente observando os espectros longitudinales de energia cinética (Fig. 9), onde a dissipação na pequena escala resolvida dos modelos SM e FS é mais intensa em comparação com a do modelo espectral. Nesta figura foi acrescentado, como referência, o espectro de energia cinética obtido de uma simulação numérica direta a $Re = 100$. A evolução temporal do máximo da vorticidade $\omega_{3D} = \left({\omega_x}^2 + {\omega_z}^2\right)^{1/2}$ normalizada por ω_i, é apresentada na Fig. 11, onde pode-se apreciar também a atenuação de ω_{3D}/ω_i aportada pelos modelos SM e FS.

As Figs. 7 e 8 mostram os resultados obtidos com os modelos espectral, espectral dinâmico, função de estrutura filtrada e selectiva. Sua semelhança é remarcável. Os quatro modelos reproduzem praticamente a mesma dinâmica turbilhonar, tanto nas grandes quanto nas pequenas escalas, e isto se confirma observando os espectros longitudinais de energia cinética na Fig. 10. Os modelos espectrais têm comportamento muito próximo, porém a versão dinâmica é ligeramente

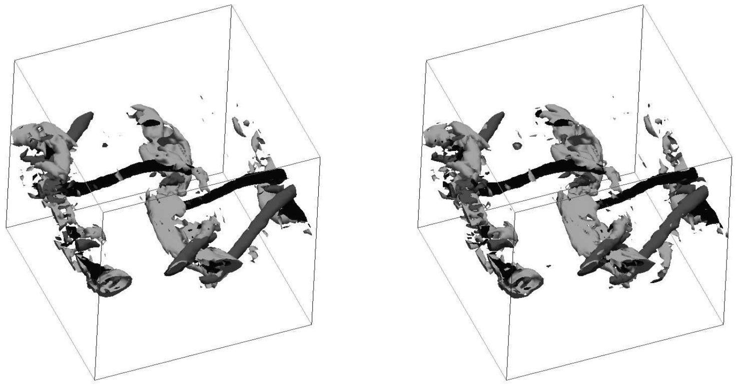

Figura 8: Idem Fig.(6) e (7) para os modelos de função de estrutura filtrada (FSF) e da função de estrutura seletiva (SSF).

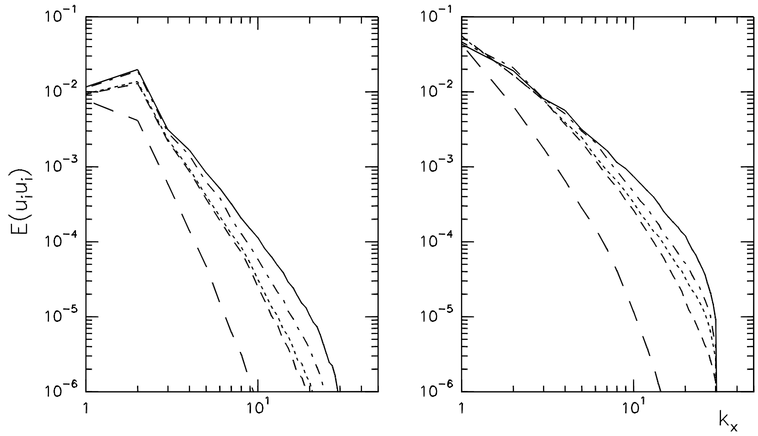

Figura 9: Comparação de espectros longitudinais de energia cinética: à esquerda $t = 14\ \delta_i/U$, à direita $t = 26\ \delta_i/U$. Modelos: SV (—), SM (– – –), SF (- - -) e SF4 (– - - - –). DNS a $Re = 100$ (— — —).

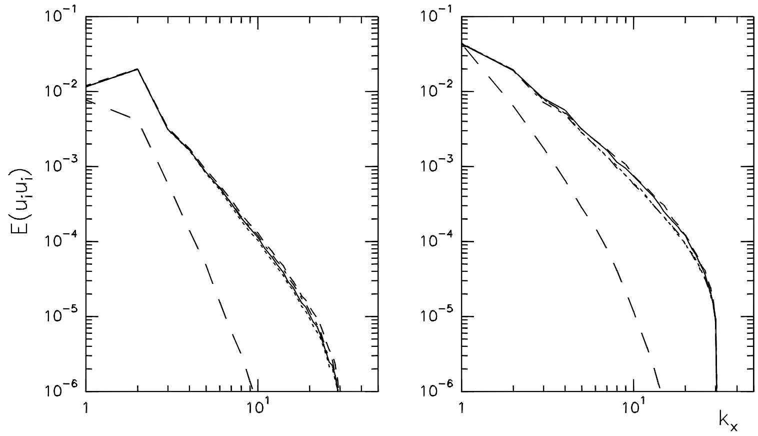

Figura 10: Comparação de espectros longitudinaies de energia cinética: à esquerda $t = 14\ \delta_i/U$, à direita $t = 26\ \delta_i/U$. Modelos: SV (—), DSV (– – –), FSF (- - -) e SSF (– - - - –). DNS a $Re = 100$ (— — —).

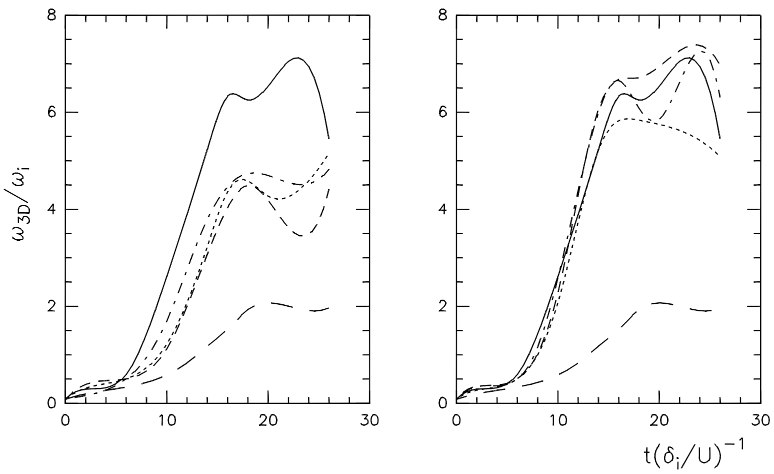

Figura 11: Evolução temporal dos máximos de $\omega_{3D} = ({\omega_x}^2 + {\omega_z}^2)^{1/2}$; à esquerda SV, SM, SF e SF4, à direita SV, DSV, FSF e SSF. Mesmos símbolos que nas Figs. (9) e (10).

em avanço com respeito a o modelo espectral à declividade fixa. Isto pode-se interpretar como a capacidade do modelo dinâmico a desenvolver turbulência de pequena escala mais rapidamente (de fato ele dissipa menos) que o modelo a declividade fixa. O comportamento dos modelos da função de estrutura filtrada e selectiva indica que os dois conseguem se independizar do movimento a grande escala, um através da "filtragem do sinal", o outro através da "seleção" de zonas com atividade turbulenta de pequena escala.

Estes dois modelos também têm comportamento semelhante em simulações de grandes escalas de uma camada limite fracamente compressível (Mach=0.5). Estas simulações foram realizadas com um código numérico que resolve as equações completas de Navier-Stokes para escoamentos compressíveis utilizando uma extensão de ordem $(2, 4)$ do esquema explícito de McCormack [49]. A Fig. 12 mostra uma comparação entre iso-superfícies de viscosidade turbulenta, $\nu_t = 2/3\ \nu$, para os modelos SF, FSF e SSF.

Enquanto o modelo da função de estrutura atua na zona de transição da camada limite caracterizada pela formação de vórtices em lambda, os modelos da função de estrutura seletiva e filtrada conseguem se independizar desse movimento de grandes escalas, atuando principalmente na zona onde se desenvolve turbulência de pequena escala.

6.5 Discusão dos resultados

A partir dos testes realizados com diferentes modelos sub-malha em escoamentos livres e parietais se podem realizar algumas considerações. Em primeiro lugar, podemos nos questionar sobre as diferenças entre os modelos de Smagorinsky e da função de estrutura. A eq. (102) mostra a relação entre os dois modelos. Na práctica é constatado um comportamento similar seja na grande ou na pequena escala resolvida. Testes realizados em turbulência homogênea isotrópica mostram uma leve vantagem do modelo da função de estrutura [70]. Porém os dois modelos incorporam diferente informação. No modelo de Smagorinsky, a escala de velocidades característica é $\Delta|\overline{S}|$, e, portanto, é implícito na definição do tensor de taxa de deformação a incorporação dos gradientes de

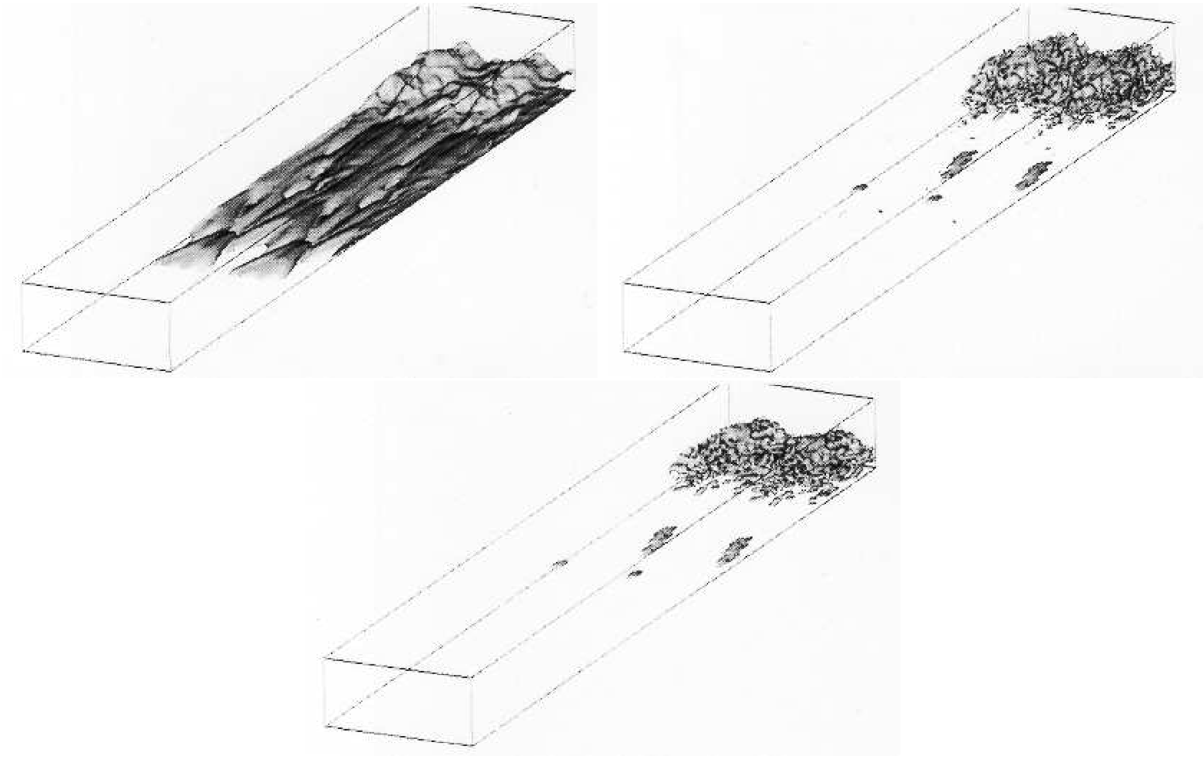

Figura 12: Iso-superfícies de $\nu_t = 2/3\ \nu$, dadas pelos modelos da função de estrutura (esquerda), função de estrutura filtrada (direta) e função de estrutura seletiva (abaixo) na região transicional de uma camada limite fracamente compressível (Mach 0.5).

velocidades em todas as escalas, inclusive as mais energéticas. Pelo contrário, o modelo da função de estrutura, não intenta introduzir nenhuma informação sobre o movimento das grandes escalas, a função de estrutura é definida somente para turbulência homogênea e isotrópica. Da definição (eq. 97) fica evidente que se procura informação unicamente em k_c. O problema é basicamente a dificuldade de fornecer a informação necessária sem introduzir informação a mais, neste caso, toda a representação espectral do escoamento considerado (lembrar que a SF é local no espaço físico).

Os caminhos percorridos para melhorar os modelos de Smagorinsky e função de estrutura foram diferentes. Do lado do modelo de Smagorinky, a opção foi de "ajustar" uma constante para baixar o valor de ν_t (procedimento dinâmico). Desta forma é aceitado, nas versões seguintes, que o modelo tem a correta escala de velocidades característica e assim a única tarefa que resta é a de ajustar uma constante por algum procedimento de forma a obter o comportamento "esperado". Neste caso, pode-se criticar a idéia de "ajustar constantes" quando as escalas características utilizadas nos fornecem mais informação da que precisamos.

A este respeito, é interesante notar que simulações numéricas de camada limite compressível em transição, utilizando o modelo da função de estrutura aplicada em quatro pontos, fornecem melhores resultados comparados com os do modelo de Smagorinsky quando nos dois casos é aplicado o procedimento dinâmico [31]. Este teste vem a verificar de alguma forma nossa afirmação sobre a importância na escolha da correta escala característica de velocidade em um modelo de viscosidade turbulenta.

Do lado da função de estrutura, a idéia por trás das versões filtrada e seletiva, parecem indicar o caminho, retirando informação das grandes escalas, através da redução do suporte do modelo no espaço de Fourier com o conseguinte aumento do suporte no espaço físico, dado a restrição imposta pela eq. (83). Mais ainda fica caminho por percorrer... Novos modelos de viscosidade turbulenta deverão recuperar todas as qualidades do modelo espectral dinâmico, a saber:

- introduzir a dependência em k perdida na passagem ao espaço físico do modelo espectral;
- avaliar o espectro local de energia cinética em k_c;
- determinar a declividade m do espectro de energia cinética no espaço físico.

Esta última característica permitirá conferir o comportamento espectral do escoamento na zona próxima de parede e, principalmente, quantificar as diferenças com respeito à lei de Kolmogorov. Algumas idéias ja foram introduzidas [70, 116], porém os testes ainda estão em desenvolvimento, principalmente enquanto às estratégias para determinar m no espaço físico. Destacamos, em particular, a possibilidade de reduzir o suporte dos modelos no espaço físico e de Fourier, através da utilização da transformada en ondeletas para calcular a viscosidade turbulenta [103].

Nas simulações de grandes escalas onde é resolvido a zona próxima de parede, é importante que o modelo se adapte às particularidades da dinâmica nesta região e verifique o comportamento assintótico da velocidade e do tensor sub-malha. Desenvolvendo em série de Taylor cada componente da velocidade na direção normal à parede, pode-se obter o seguinte comportamento

$$u \propto y, \quad v \propto y^2, \quad w \propto y. \tag{131}$$

Considerando estas variações, pode-se obter diretamente o comportamento de cada componente do tensor sub-malha T_{ij}, dado por

$$\begin{aligned} &T_{11} \propto y^2, \quad T_{22} \propto y^4, \quad T_{33} \propto y^2, \\ &T_{12} \propto y^3, \quad T_{13} \propto y^2, \quad T_{23} \propto y^3. \end{aligned} \tag{132}$$

Se consideramos o problema do comportamento próximo da parede por um modelo sub-malha, a verificação da totalidade destas leis assintóticas corresponderia ao caso ideal. Porém, podemos restringir nossas ambições, exigindo de verificar ao menos algumas das tendências, como por exemplo a de T_{12}, a qual é esencial para prever correctamente a tensão de cisalhamento na parede.

7 Considerações sobre métodos numéricos para DNS e LES

Em DNS e LES a escolha de esquemas numéricos para a discretização temporal e espacial das equações correspondentes é um tema de especial atenção. Em geral, é exigido trabalhar com esquemas que tenham comportamento espectral de forma a resolver todo o espectro de energia cinética (filtrado ou não), desde as escalas energéticas à escala de corte k_c (ou à escala de Kolmogorov para DNS).

O erro numérico associado a um esquema de diferenças ou volumes finitos pode ter significativas conseqüências no cálculo. Ghosal [44] aplicou esquemas de diferentes ordens a uma superposição de modos de Fourier para determinar o erro envolvido no cálculo de escoamentos turbulentos considerando os três tipos de erros seguintes :

$$E(k) = E^{(DF)}(k) + E^{(alias)}(k) + E^{(model)}(k). \tag{133}$$

O primeiro termo é devido à incapacidade dos esquemas em diferenças finitas de calcular com precisão os gradientes nos menores comprimentos de onda. Este termo se anula quando se utilizam métodos espectrais. O segundo termo é devido ao cálculo de termos não lineares no espaço físico em um malha discreta, e denominado erro de aliasing [11]. O último termo é a diferença entre a tensor de tensões sub-malha exato e o valor calculado com a utilização de um modelo sub-malha e é denominado erro do modelo. O resultado mais remarcável encontrado neste trabalho, foi que, para esquemas de baixa ordem o erro de truncamento é maior que a contribuição sub-malha, a menos que sejam utilizados filtros de largura várias vezes superior ao tamanho da malha. Um resultado semelhante tinha sido verificado em uma análise a priori de dados de DNS para camada de mistura turbulenta [122] e foram confirmados a posteriori por Kravchenko e Moin [60]. Isto confirma a necessidade de trabalhar com esquemas numéricos específicos para simulações de escoamentos turbulentos.

Os métodos espectrais cumprem todas as exigências de precisão, porém estes métodos são utlizados principalmente em geometrias simplificadas, onde condições de contorno periódicas possam ser adotadas (ver capítulo 9 do presente volume).

Requerimentos de precisão, mais que de estabilidade no tempo, indicam a necessidade de utilizar pequenos passos de tempo o que em geral se resolve eficientemente com esquemas explícitos. A excepção é a zona próxima da parede onde as malhas devem ser refinadas para captar os gradientes presentes, e, assim, a condição CFL impoe uma restrição muito severa ao passo de tempo. Nestos casos a solução é implicitar ou semi-implicitar os termos viscosos. Para a discretização das derivadas temporais os métodos mais usados são os de Runge Kutta, especialmente os de armazenamento reduzido [124]. Outros métodos utilizados são os de Adams-Bashford de 2da e 3ra ordem e o método Leap-Frog. O método Runge-Kutta de 3ra ordem, RK3, possui características de estabilidade muito favoráveis para resolver numericamente uma equação de conveção. O esquema é estável para CFL inferiores a $\sqrt{3}$. Em particular, o esquema RK3 utilizado com esquemas centrados, inclusive de segunda ordem, permite realizar simulações sem a limitação, $Re_m < 2$ (Re_m é o número de Reynolds de malha), imposta quando é utilizado o esquema de Euler ou RK2 [50].

Para a discretização espacial apresentam-se várias alternativas que dependerão fortemente da geometria considerada. No caso de geometria simples os esquemas denominados compactos apresentam qualidades muitos atraentes [67, 79]. Seu princípio é de ligar o cálculo de uma derivada em um ponto ao cálculo de derivadas nos pontos vizinhos, o que constitui um método implícito no espaço. Dada uma distribuição de pontos sobre uma malha uniforme $x_i = (i-1)\Delta x$, a formulação compacta para a primeira derivada $f_i' = f'(x_i)$ da função $f(x)$ é

$$\alpha f_{i-1}' + \ f_i' + \ \alpha f_{i+1}' + \ = a\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{\Delta x} + b\frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{\Delta x}. \tag{134}$$

Da mesma forma pode-se escrever uma formulação para a derivada segunda, $f_i'' = f''(x_i)$ da função $f(x)$

$$\alpha f_{i-1}'' + \ f_i'' + \ \alpha f_{i+1}'' + \ = a\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + b\frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{\Delta x^2}. \tag{135}$$

A ordem de precisão de estas formulações varia segundo o jogo de parâmetros (α, a, b). Para um esquema tridiagonal como o das eqs. (134,135), a precisão máxima obtida é de 6ta. ordem. Constata-se também da eq. (134) que para $\alpha = 0$, o jogo de parâmetros $a = 1/2$ e $b = 0$, permite reencontrar o esquema de diferenças centrado de 2da ordem.

É interesante notar que a dependência do valor da derivada em um ponto, dos valores das derivadas em outros pontos, imita em certa forma o comportamento dos métodos espectrais, os quais necessitam do cálculo das derivadas em todos os pontos do domínio para obter uma avaliação da derivada em um ponto. Da mesma forma como foram desenvolvidas as eqs. (134,135), pode-se derivar esquemas compactos *descentrados* para utilizar na fronteiras do domínio :

$$f_1' + \alpha_1 \ f_2' = \frac{1}{\Delta x}(a_1 \ f_1 + b_1 \ f_2 + c_1 \ f_3), \tag{136}$$

para a derivada primeira e

$$f_1'' + \alpha_1 \ f_2'' = \frac{1}{\Delta x}(a_1 \ f_1 + b_1 \ f_2 + c_1 \ f_3 + d_1 f_4), \tag{137}$$

para a derivada segunda.

As principais vantagems dos métodos compactos com relação aos esquemas explícitos clássicos são:

- uma redução do domínio de dependência (de onde a apelação "compacto") que permite conservar os mesmos esquemas em pontos vizinhos das fronteiras;
- um ganho substancial em precisão para uma ordem dada: por exemplo em 4ta ordem, um esquema compacto reduz por 10 o erro de truncamento;
- um comportamento espectral, dado que os menores comprimentos de onda resolvidos autorizados pela malha de cálculo (potência da resolução), são mais efetivamente levados em conta;
- um pequeno erro de truncamento (de natureza dispersiva para um esquema centrado) que conduz a uma melhor precisão nas velocidades de fase consideradas no problema físico.

O terceiro ponto pode ser colocado em evidência efetuando uma análise de Fourier do erro. O método consiste em comparar para uma função trigonométrica dada, $f(x) = e^{\imath kx}$, os valores nos pontos x_i da derivada exata, $f'(x_i) = \imath k f(x_i)$, com os valores obtidos de um outro esquema $\imath k_m f(x_i)$. k_m é denominado número de onda efetivo e pode ser calculado para cada esquema numérico. Por exemplo, para um esquema de segunda ordem centrado

$$\frac{df}{dx} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}, \tag{138}$$

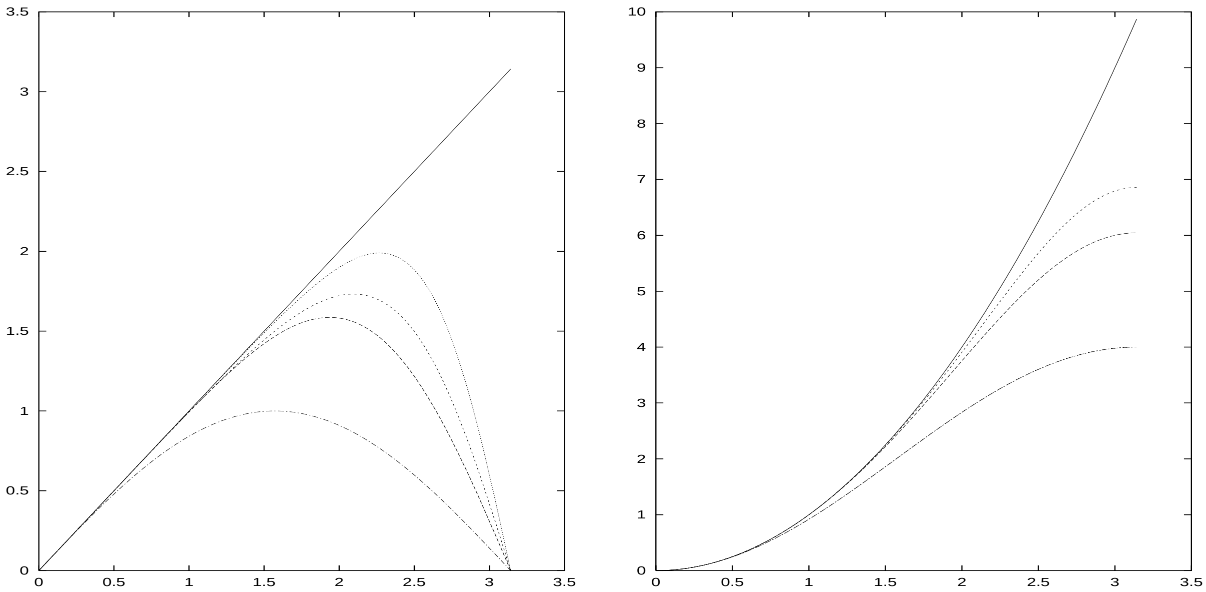

Figura 13: Variação do número de onda modificada k_m em função do número de onda k : à esquerda a derivada primeira, à direita a derivada segunda (— : derivação exata; – – – – – : esquema explícito de 2da ordem; – – – : esquema explícito de 6ta ordem; - - - :esquema compacto de 4ta ordem; . . . : esquema compacto de 6ta. ordem).

obtem-se

$$\frac{de^{\iota kx}}{dx} = \iota \frac{\sin k\Delta_x}{\Delta x} e^{\iota kx}, \tag{139}$$

assim

$$k_m = \frac{\sin k\Delta_x}{\Delta x}. \tag{140}$$

De forma mais geral, o número de onda modificado k_m se relaciona ao número de onda k para diferentes valores de (α, a, b) (diferentes esquemas) na avaliação da derivada primeira através da relação

$$k_m(k) = \frac{a\sin(k) + (b/2)\sin(2k)}{1 + 2\alpha\cos(k)}. \tag{141}$$

Uma comparação da análise de Fourier para vários esquemas numéricos é apresentada na Fig. 13. Da figura constata-se que a aproximação de uma derivada por um esquema em diferenças de 6ta ordem fica proximo a seu valor exato para uma gama de comprimento de onda muito maior que para o esquema explícito de 2da ordem.

O análise de Fourier mostra que os esquemas compactos têm como característica a de avaliar com grande precisão a primeira (e segunda derivada) de um sinal cuja comprimento de onda é próximo a duas malhas de cálculo. Esta propriedade não é verificada nos esquemas explícitos clássicos, mesmo para uma ordem elevada. Assim a ordem de precisão de um esquema constitue um critério insuficiente para julgar sua qualidade, dado que, por definição, dá informação sobre o comportamento assintótico do erro de truncatura quando o tamanho de malha tende a zero. Lele [67] introduz como alternativa o conceito de potência da resolução de um esquema, definido como

$$E = \frac{\int (k - k_m)\ E(k)\ dk}{\int k\ E(k)\ dk}, \tag{142}$$

ou seja, a capacidade de tomar em conta corretamente uma larga gamma de comprimentos de onda.

Os esquemas em diferenças finitas compactos têm sido utilizados com sucesso em simulações de esteiras espaciais [48], canal turbulento temporal [62], camada de mistura espacial [113], instabilidade baroclina [41], e mais outras que virão ...

No caso de geometrias complexas, a melhor estratégia numérica para DNS e LES deve ser determinada. Esquematicamente, a principal dificuldade é a obtenção de uma descrição precisa da dinâmica das estruturas turbulentas em um domínio realístico. Em problemas de engenharia, esta descripção é tradicionalmente favorecida pelo uso de malhas curvilíneas "body-fitted" ou não estruturadas, para o qual existe abundante bibliografia (por exemplo [38, 37]). A principal limitação de tais técnicas é o considerável aumento no custo computacional e a significativa degradação da precisão, limitando-se à utilização de esquemas numéricos de 2da ordem no melhor dos casos. Uma alternativa recente, explorada até o momento para DNS, consiste em utilizar toda a potência dos esquemas compactos para simulações de escoamentos em geometrias complexas em malhas regulares. Esta possibilidade é oferecida pelo método de fronteiras virtuais [47, 107, 34] para a representação de obstáculos. Assim em vez de modificar a malha de cálculo, se introduz um termo de forçagem nas equações de movimento que permite verificar as condições de contorno requeridas pela presença do obstáculo. Este método foi recentemente utilizado em DNS para a análise da turbulência provocada na esteira de um cilindro circular, considerando dois escoamentos diferentes a montante do cilindro: o escoamento uniforme e a camada de mistura plana [115]. Resultados destas simulações são mostradas na seção 8.1.

8 Aplicações da DNS e LES

Seria um trabalho formidável tentar completar um estado da arte da DNS e LES, haja visto a crescente popularidade que estas técnicas têm mostrado nos últimos anos. Assim, vamos nos concentrar na apresentação de resultados de algumas simulações numéricas aplicadas a escoamentos livres e parietais fundamentais e, por último, mostraremos um aplicação industrial da LES.

8.1 Esteiras turbulentas

Recentemente foram realizadas duas DNS com o objetivo de analizar e compreender a dinâmica dos turbilhões provocada pela presença de um cilindro circular de diâmetro D, quando o escoamento a montante é uma camada de mistura. Neste caso foi utilizado um método alternativo para a descripção do cilindro com uma discretização em malhas regulares: o método de fronteiras virtuais [115]. A geometria considerada está representada na Fig. 14. Na seção de entrada é introduzida

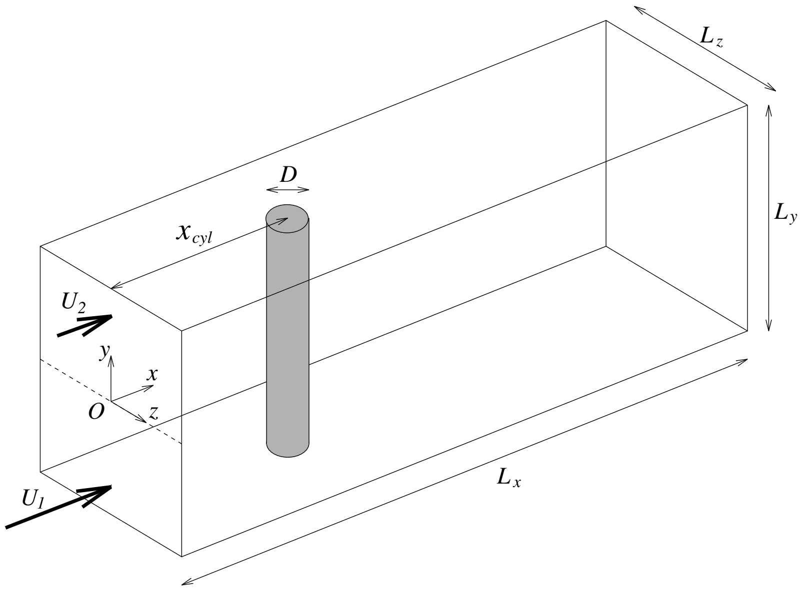

Figura 14: Configuração do escoamento.

Teste	Re	(L_x, L_y, L_z)	x_{cyl}	λ	H	(n_x, n_y, n_z)	$(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$
UWAKE	200	(16D,4D,8D)	2.5D	0	0	(193,48,96)	(D/12,D/12,D/12)
MLWAKE	300	(28D,16D,8D)	13D	0.5	1/3	(505,193,144)	(D/18,D/12,D/18)

Tabela 1: Parâmetros das simulações.

uma camada de mistura plana formada por dois escoamentos de velocidades U_1 e U_2, com o perfil de velocidades médio dado por

$$U(y) = \frac{U_1 + U_2}{2} - \frac{U_1 - U_2}{2} \tanh\left(\frac{2y}{\delta_i}\right). \tag{143}$$

A diferença de velocidades e a velocidade convectiva são notadas como $\Delta U = U_1 - U_2$ e $U_c = (U_1 + U_2)/2$. Os três parâmetros adimensionais fundamentais do presente problema são: a relação de velocidades $\lambda = \Delta U / 2U_c$, o número de Reynolds $Re = U_c D/\nu$ e a relação de comprimentos $H = \delta/D$. Na zona a jusante do cilindro, o escoamento consiste na interação de uma camada de mistura e uma esteira, com direções de cisalhamento médio ortogonal, o que é considerado com um verdadeiro escoamento turbulento tri-dimensional (sem nenhuma direção homogênea). Nota-se que pequenos valores de λ correspondem a regimes onde os efeitos de camada de mistura são moderados, enquanto que no caso $\lambda = 0$ denota simplesmente o caso de um escoamento uniforme de velocidade U_c imposto na seção de entrada. Neste trabalho foram considerados dois escoamentos turbulentos ao redor da mesma geometria cilíndrica. A primeira simulação corresponde à esteira formada por um escoamento uniforme constante como condição de contorno (Teste UWAKE) e, a segunda, à esteira turbulenta produzida por uma escoamento de camada de mistura (Teste MLWAKE). Os dados das duas simulações são resumidas na Tabela 1.

O código numérico utilizado resolve as equações completas de Navier-Stokes às quais foi acres-

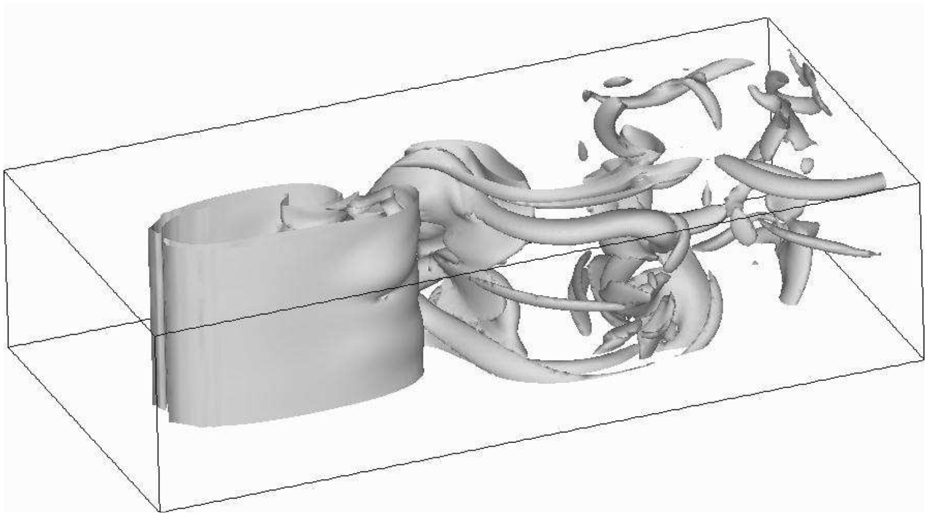

Figura 15: Iso-superfície do módulo da vorticidade - Teste UWAKE

centado na equação de convervação de quantidade de movimento, o termo

$$f_i(\vec{x}_s, t) = \alpha \int_0^t u_i(\vec{x}_s, t')dt' + \beta\ u_i(\vec{x}_s, t), \tag{144}$$

que atua como um termo de forçagem localizado na fronteira $\vec{x}_s$. Esta força permite impor condições de não deslizamento em $\vec{x}_s$ dado que tem magnitude e direção oposta ao escoamento local [47]. Assim o termo de forçagem atua em $\vec{x}_s$ correspondendo à fronteira virtual do cilindro. Na eq. (144), t é o tempo e (α, β) são constantes negativas com dimensões $1/T^2$ e $1/T$, respectivamente. Para a resolução numérica são utilizados esquemas compactos centrados de 6ta ordem [67] para avaliar todas as derivadas espaciais, exceto perto dos contorno de entrada e saída, onde são especificados esquemas descentrados. A integração no tempo se realiza através do esquema RK3 [124]. A condição de incompressibilidade é verificada com o método de passos fracionários via resolução de uma equação de Poisson para a pressão. Condições de contorno periódicas ou semi-periódicas são utilizadas nas direções transversal e vertical. Estas condições apresentam duas vantagens: primeiro, permitem preservar a precisão global nos cálculos das derivadas em y e z pelo uso do mesmo esquema numérico em todo o domínio computacional; segundo, oferece a possibilidade de verificar, no sentido discreto e a cada sub-passo de tempo, a condição de incompressibilidade até a precisão do computador, graças a um "solver" de Poisson misto (espectral-esquema compactos). A condição de contorno de saída é deduzida utilizando uma equação de convecção simplificada. Na entrada do domínio são acrescentadas perturbações aleatórias ao escoamento de base, de forma a reproduzir a turbulência residual a montante do cilindro. Para as duas simulações aqui apresentadas, o espectro de energia cinética "pica" no modo fundamental predito pela teoria de estabilidade linear correspondente ao caso considerado.

A Fig. 15 mostra uma vista em perspectiva do módulo do vetor vorticidade denotando a organização do escoamento na simulação UWAKE. A imagem foi tomada ao final da simulação, para um tempo $t = 32D/U_c$, correspondente a duas vezes o tempo necessário para uma estrutura percorrer o comprimento do domínio L_x com velocidade U_c. Apesar da limitada resolução (ver

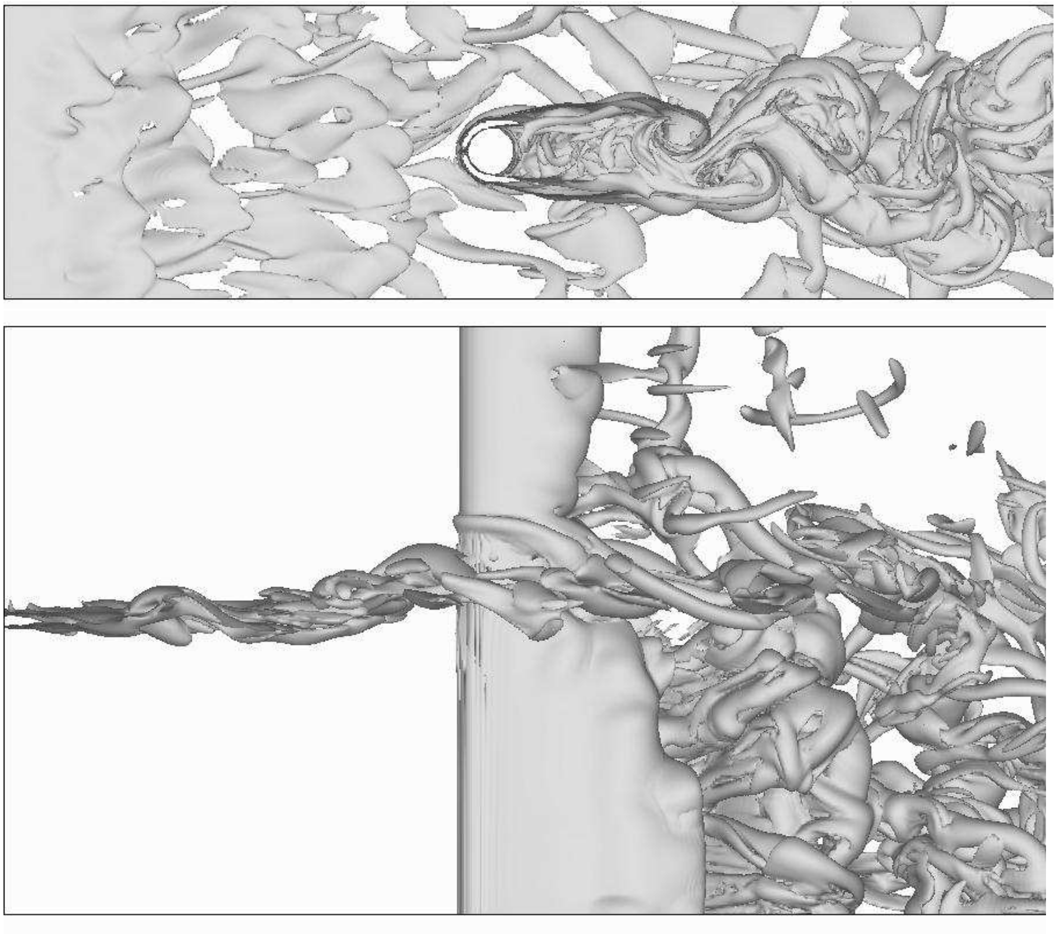

Figura 16: Vista de acima e lateral de iso-superfícies do módulo de vorticidade - Teste MLWAKE.

Tabela 1), a técnica de fronteiras virtuais juntamente com o uso de esquemas numéricos compactos, parece reproduzir qualitativamente todas as características da esteira turbulenta, como o desprendimento periódico de vórtices de Kármán e o "esticamento" (stretching) de vórtices longitudinais ou "hairpins" entre os vórtices de Kármán. Estas características são apreciadas em uma animação realizada a partir de imagens obtidas durante a simulação.

O caso MLWAKE foi estudado experimentalmente por Heitz [51]. A Fig. 16 mostra imagens de cima e lateral do módulo de vorticidade para o tempo $t = 68D/U_c$. Na frente do cilindro, a camada de mistura apresenta uma significativa curvatura associada a um gradiente de pressão para cima, criado pela presença do obstáculo. Atrás do cilindro, observa-se a tendência contrária. Estas duas características foram também observadas experimentalmente. A análise das estruturas de vorticidade em instantes sucessivos revela um desprendimento oblíquo de vórtices de Kármán, em um ângulo que aumenta com o desenvolvimento a jusante do escoamento. Este comportamento parece ser devido à diferença de velocidades ΔU entre as duas correntes da camada de mistura e tende a transportar os vórtices de Kármán com sua própria velocidade normalizada por U_1 ou U_2. Desta interpretação, pode-se inferir que a relação de velocidades λ será um parâmetro principal

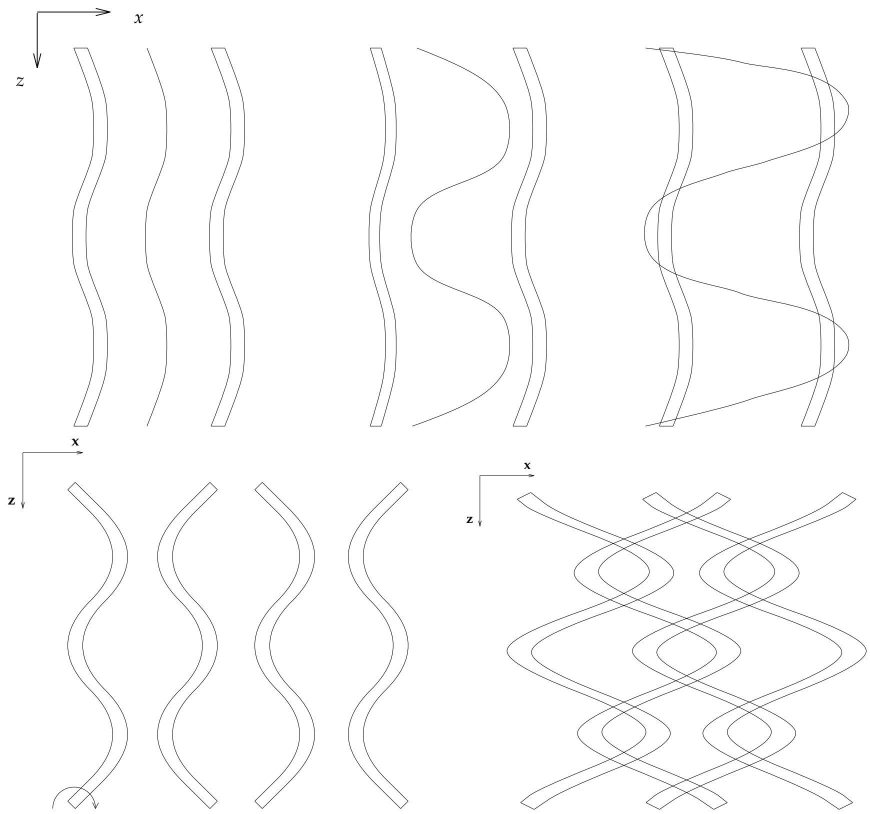

Figura 17: Instabilidades translativa (acima) e helicoidal (abaixo) em camadas de mistura .

para determinar o ângulo de inclinação dos vórtices de Kármán.

8.2 A camada de mistura incompressível

O estudo da transição à turbulência em camada de mistura incompressível tem constituido um dos principais temas de pesquisa em turbulência nos últimos trinta anos. A explicação é previsível; a camada de mistura é um escoamento fundamental que se apresenta em numerosas situações práticas (aerodinâmica, combustão, instabilidade baroclina, etc). Uma camada de mistura se desenvolve a partir da interfase de duas correntes de diferentes velocidades. O perfil de velocidades assim formado possui um ponto de inflexão que é instável vis-a-vis de perturbações infinitesimais. Esta instabilidade é não viscosa e se denomina *instabilidade de Kelvin-Helmholtz*. Ela é responsável pela formação de estruturas de vorticidade orientadas no sentido lateral, como foi evidenciado em experiências de laboratório (ver Fig. 2) [7, 58]. Devido à concentração de vorticidade, forma reconhecível e imprevisibilidade enquanto a sua localização no tempo e espaço, estas estruturas de vorticidade apresentam todas as características para ser consideradas como estruturas coerentes [69].

Além dos turbilhões de Kelvin-Helmholtz (KH), numerosos trabalhos experimentais [5, 66, 53] e numéricos [76, 83, 20, 90] colocaram em evidência a existência de uma instabilidade secundária que origina intensos turbilhões longitudinais formados na zona de estagnação entre os turbilhões

Figura 18: Evoução temporal de uma camada de mistura a $Re = 100$ - Linhas de vorticidade para $t = 10, 14, 18, 26, 35$ e $50\ \delta_i/U$ (de esquerda à direita de cima para abaixo).

KH. Os turbilhões longitudinais, denominados "hairpins" (ou grampo de cabelo), são facilmente identificáveis em um corte transversal pela forma em cogumelo, devido à presença de pares de turbilhões longitudinais contrarotativos. Duas interpretações foram dadas para a formação dos turbilhões longitudinais em termos da instabilidade translativa [96] e instabilidade helicoidal [23] (ver Fig. 17).

Apresentamos a continuação resultados de DNS e LES de camadas de mistura temporais e espacias [118], com o objetivo de responder a questões referidas

- a origem e dinâmica dos turbilhões longitudinais;
- a influência das condições iniciais e de contorno;
- as características estruturais e estatísticas da camada de mistura desde o estado laminar ao regime turbulento auto-similar.

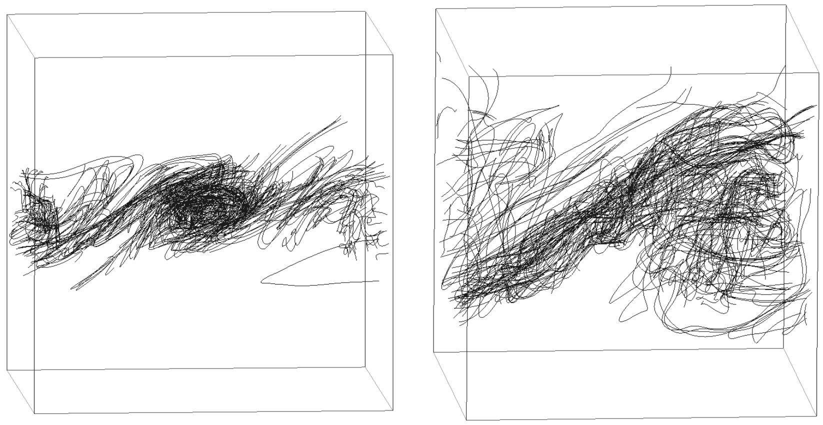

Figura 19: Linhas de vorticidade a $t = 35$ (esquerda) e $70\delta_i/U$ (direita), vista lateral.

8.2.1 Origem e evolução das estruturas longitudinais

A Fig. 18 apresenta a evolução de estruturas de vorticidade de uma camada de mistura temporal colocada em evidência através da visualização de linhas de vorticidade. A DNS foi realizada com um código pseudo-espectral a uma resolução de 96^3 pontos de colocação em um domínio de quatro comprimentos de onda fundamentais ($L_x = L_y = L_z = 4\ \lambda_a = 28\ \delta_i$) e $Re = U\ \delta_i/\nu = 100$. A condição inicial é definida por um escoamento de base (eq. 130) ao qual é superposto um ruído de pequena amplitude constituído por dois tipos de perturbações aleatorias; uma isotrópica, de energia cinética $\varepsilon_{3D}U^2$ com $\varepsilon_{3D} = 10^{-4}$, e outra bidimensional (sem dependência em z), de energia cinética $\varepsilon_{2D}U^2$ com $\varepsilon_{2D} = 10^{-3}$.

A figura mostra a emergência de quatro turbilhões de KH (ou "roll-up"), o primeiro "pairing" dos turbilhões centrais para $t = 14\ \delta_i/U$, e a oscilação de linhas de vorticidade entre os turbilhões de KH. Estas oscilações se intensificam devido ao campo de taxa de deformação nas zonas de estagnação em concordância com o modelo proposto por Lin e Corcos [76].

O cálclulo "a quatro turbilhões" permite dois pairings sucessivos. O primeiro conclui-se para $t = 35\ \delta_i/U$ o segundo em $t = 70\ \delta_i/U$. A Fig. 19 mostra, para esses dois instantes, vistas laterais das linhas de vorticidade. Verifica-se que os turbilhões longitudinais se organizam 45° com respeito ao plano horizontal. Isto pode se explicar a partir da equação de conservação de vorticidade para um fluido perfeito

$$\frac{d\omega_i}{dt} = \omega_j\ S_{ij}, \tag{145}$$

e considerando que nas zonas de stagnação $\|\omega_j\| << \|S_{ij}\|$, eq. (145) dá a direção principal do esticamento da vorticidade longitudinal a 45°.

8.2.2 Imprevisibilidade da camada de mistura temporal e espacial

A característica de imprevisibilidade da camada de mistura turbulenta, enquanto à sensibilidade às condições inciais, pode ser apreciada na Fig. 20. Nesta figura foram seleccionados iso-superfícies

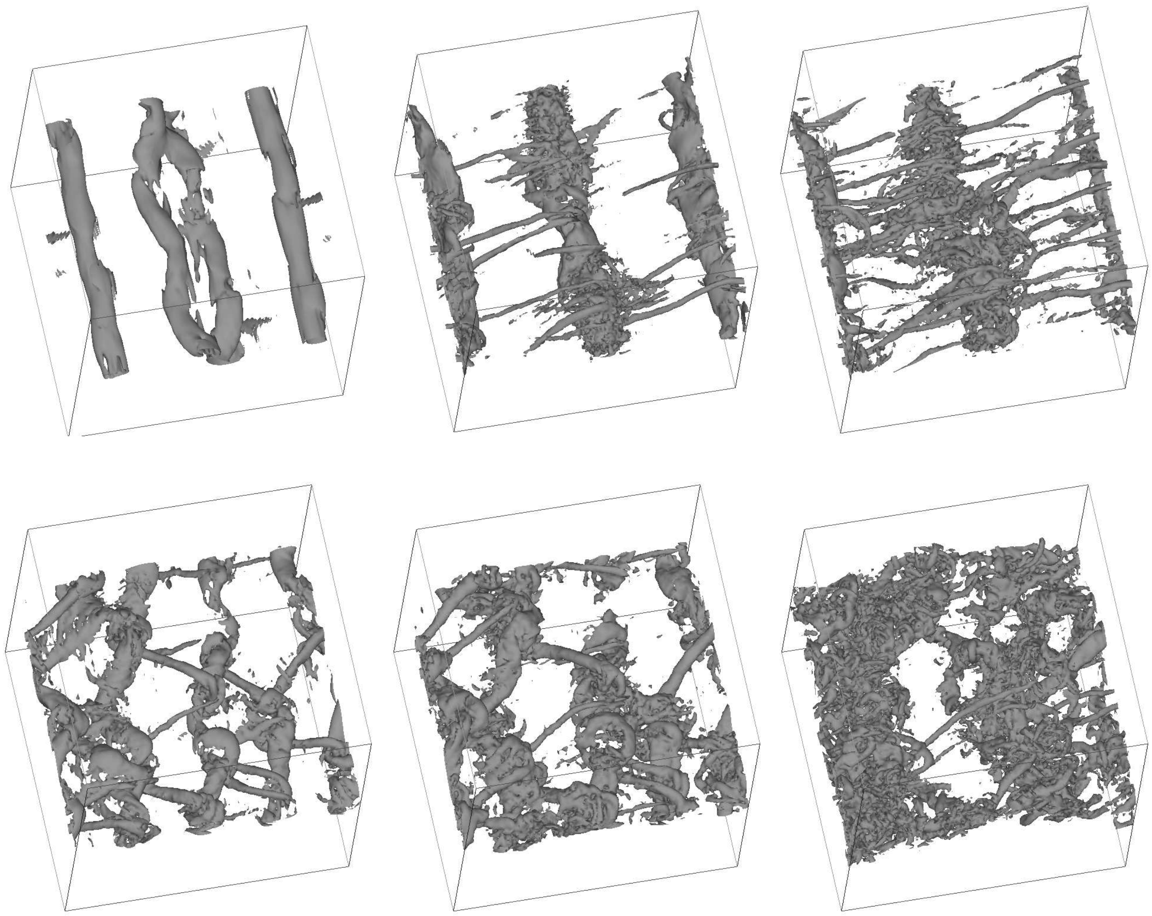

Figura 20: Sensibilidade da camada de mistura em duas simulações de grandes escalas, diferenciando-se unicamente na inicialização das perturbações.

de norma de vorticidade obtidas de duas simulações de grandes escalas com a única diferença na organização do ruído. As duas LES foram realizadas em um domínio cúbico, $L_x = L_y = L_z = 4\ \lambda_a = 28\ \delta_i$, a $Re = 2000$, através de um código pseudo-espectral tridimensional, seguindo o formalismo apresentado na seção 4.2.2 e utilizando o modelo de viscosidade espectral dinâmico (a declividade variável). Na primeira simulação (a primeira linha da Fig. 20), o ruído que compõe a perturbação inicial é quase-bidimensional com $\varepsilon_{3D} = 10^{-5}$ e $\varepsilon_{2D} = 10^{-4}$, enquanto que na segunda, o ruído é puramente tridimensional com $\varepsilon_{3D} = 10^{-4}$ e $\varepsilon_{2D} = 0$.

As duas LES permitiram reencontrar os dois tipos de instabilidades que ocorrem em camada de mistura: a instabilidade translativa, caracterizada pela simulação com perturbação quase-bidimensional, e a instabilidade helicoidal característica de um perturbação isotrópica tridimensional (ver Fig. 17). Enquanto na primeira simulação os vórtices de KH são quase-bidimensional, com orientação segundo a direção lateral, na segunda, os vórtices se deformam segundo a direção lateral, com "pairings" localizados ao longo desta direção. Nos dois casos pode-se apreciar intensos esticamentos de vórtices longitudinais entre os vórtices de KH.

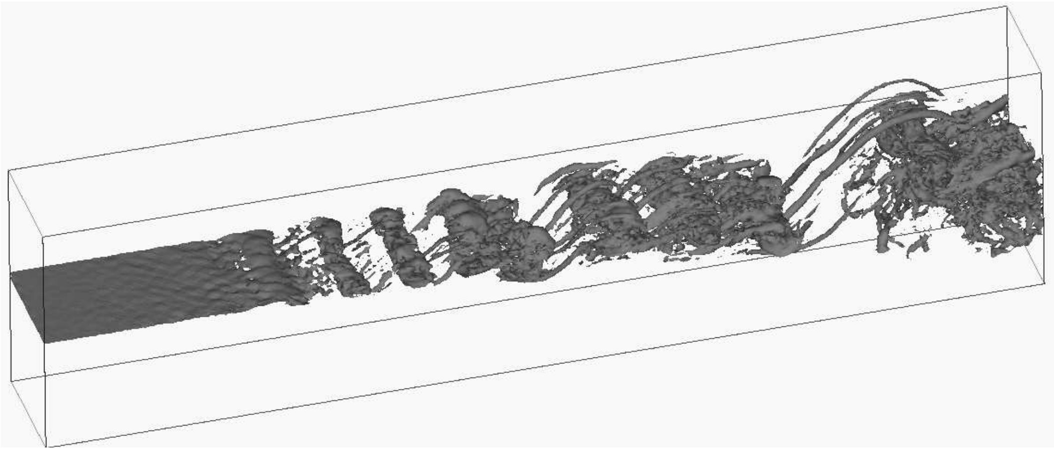

Figura 21: Camada de mistura espacial perturbada de forma bidimensional na condição de entrada, com $\varepsilon_{3D} = 10^{-5}$ e $\varepsilon_{2D} = 10^{-4}$. Iso-superfície $\|\vec{\omega}\| = 2/3\ \omega_i$.

Esta sensibilidade da camada de mistura temporal às condições iniciais, também é verificada na camada de mistura em desenvolvimento espacial com respeito às condições de contorno na entrada do domínio. Para isto foi, primeiramente, modificado o código de cálculo para levar em conta a direção longitudinal, não periódica, necessária para o cálculo espacial, e a continuação, foram realizadas duas LES de camada de mistura espacial com características semelhantes enquanto à composição do ruído com respeito à simulações temporais apresentadas na Fig. 20.

As simulações foram realizadas segundo o formalismo apresentado na seção 4.2.3. O código utilizado resolve numericamente as eqs. de Navier-Stokes através de métodos pseudo-espectrais em duas direções, enquanto que na terceira foi incorporado o método de diferenças finitas compactas de 6ta ordem [67], apresentado anteriormente. Como foi abandonada a periodicidade longitudinal, devemos acrescentar ao problema condições de entrada e saída. Em $x = 0$ é imposto então um escoamento unidirecional, com perfil de base

$$\bar{u}(y) = \underbrace{\frac{U_1 + U_2}{2}}_{U_c = U/\lambda} + \underbrace{\frac{U_1 - U_2}{2}}_{U} \tanh \frac{2y}{\delta_i} \quad , \tag{146}$$

com $\lambda = 0.5$, ao qual são acrescentadas perturbações bi ou tridimensionais, na mesma forma que nos cálculos periódicos. A condição de saída é muito importante. Se desejamos encontrar uma dinâmica de vorticidade realística, será necessário que os turbilhões sejam evacuados corretamente na saída do domínio, sem produzir efeitos a montante indesejáveis. Neste código foi utilizado uma formulação modificada do tipo Orlansky [93], intensamente testada em esteiras e camadas de mistura em desenvolvimento espacial.

As simulações foram realizados nos seguintes domínios e resoluções:

- Simulação com perturbação quase-bidimensional ($\varepsilon_{3D} = 10^{-5}$ e $\varepsilon_{2D} = 10^{-4}$) em um domínio de dimensões, $L_x = 112\ \delta_i, L_y = 28\ \delta_i, L_z = 14\ \delta_i$, e uma resolução de $(384 \times 96 \times 48)$ pontos de colocação;

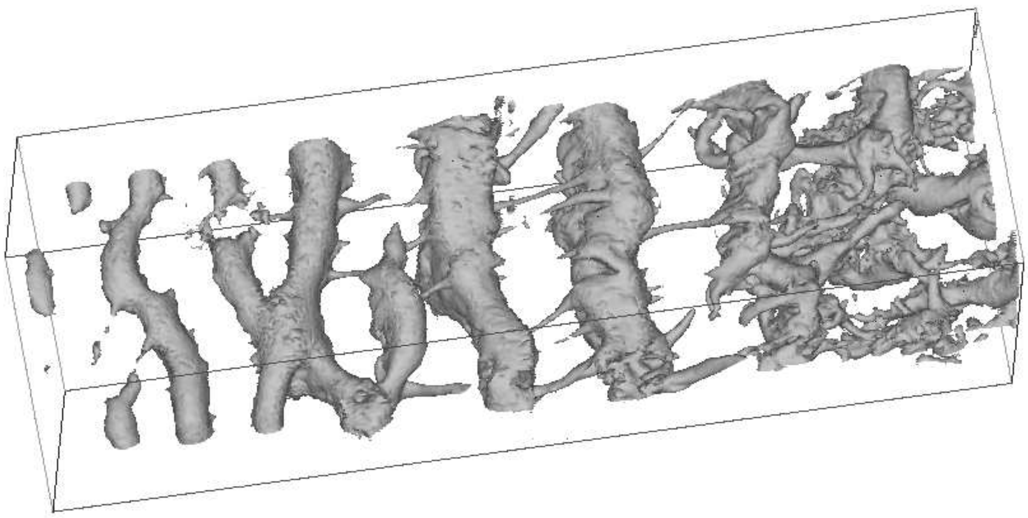

Figura 22: Camada de mistura espacial perturbada de forma tridimensional na condição de entrada com $\varepsilon_{3D} = 10^{-4}$ e $\varepsilon_{2D} = 0$. Iso-superfície de pressão $\langle p \rangle - \sqrt{\langle p'^2 \rangle}$.

- Simulação com perturbação tridimensional ($\varepsilon_{3D} = 10^{-4}$ e $\varepsilon_{2D} = 0$), em um domínio de dimensões, $L_x = 112\ \delta_i, L_y = 28\ \delta_i, L_z = 28\ \delta_i$, e uma resolução de $(384 \times 96 \times 96)$ pontos de colocação.

Em ambos os casos foi utilizado o modelo da função de estrutura filtrada.

A Fig. 21 mostra a camada de mistura espacial através da visualização de uma superfície do módulo da vorticidade ($= 2/3\omega_i$). Esta figura apresenta todas as etapas da transição da camada de mistura à turbulência, a saber: oscilação da napa de vorticidade, enrolamento e formação de vórtices de KH, pairing sucessivos e esticamento de vórtices longitudinais. O máximo da vorticidade (filtrada) em todo o domínio de cálculo encontra-se nos vórtices longitudinais localizados próximos a saída do domínio, com um valor de $4\omega_i$. Este valor denota a importância que os vórtices longitudinais têm na dinâmica geral da camada de mistura. A dinâmica dos vórtices longitudinais em camada de mistura temporal e em desenvolvimento espacial foi recentemente analizada por Comte *et.al.* [24].

Outra forma de distinguir vórtices coerentes em uma simulação numérica é através de superfícies de baixa pressão. Consideremos um vórtice coerente idealizado como um tubo vortex isolado, em uma referencial movendo-se a velocidade constante U_c [68]. A equação de movimento, considerando fluido perfeito, é

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{\omega} \times \vec{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla P, \tag{147}$$

onde P é a pressão modificada. Como o vórtice é coerente, seu tempo de vida $T_c \gg \omega^{-1}$, assim

$$\vec{\omega} \times \vec{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla P, \tag{148}$$

o qual mostra que o gradiente de pressão é orientado para o exterior e, portanto, o centro do vórtice coerente é de baixa pressão. Na Fig. 22 apresentamos uma superfície de pressão da camada de

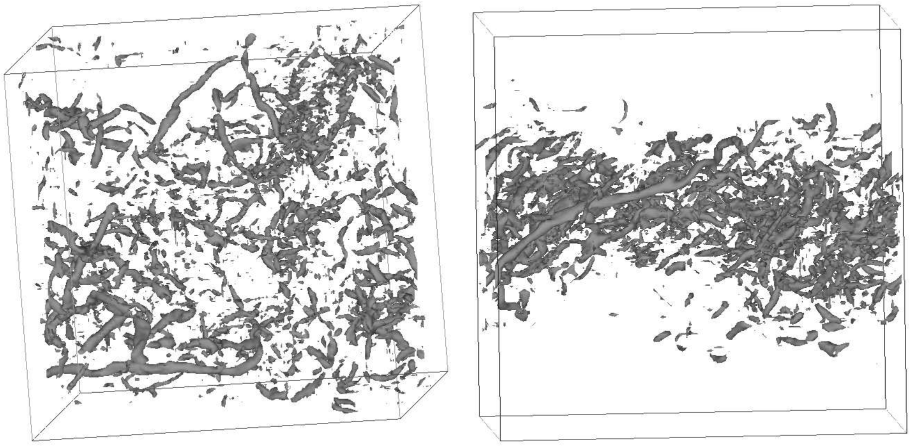

Figura 23: Iso-superfícies de módulo de vorticidade $||\vec{\omega}|| = 1.4\ \omega_i$, em $t = 60\ \delta_i/U$; à esquerda vista de cima à direita vista lateral.

mistura espacial com perturbação na entrada tridimensional. A superfície de pressão permite identificar de forma muita clara as estruturas de vorticidade e assim analisar a topologia do escoamento. A figura mostra que as estruturas de KH são deformadas segundo a direção lateral, principalmente no início do domínio, devido à influência da condição de contorno. A continuação, estas estruturas tendem a se reorganizar em forma quase bidimensional para finalmente produzir uma importante turbulência de pequena escala, denotando um intenso processo de cascateamento de energia.

8.2.3 Do estado laminar à turbulência autosimilar

A simulação de grandes escalas (utilizando o modelo de viscosidade espectral dinâmico) da camada de mistura temporal forçada com uma condição inicial tridimensional descrita recentemente, apresenta fortes indícios de características de autosimilaridade. No final da simulação, para $t = 60\ \delta_i/U$, toda a dinâmica é governada por estruturas de pequeno tamanho, porém intensas. A Fig. 23 mostra essas superfícies para um valor de $1.4\ \omega_i$. As grandes escalas não são identificáveis a partir da visualização de estruturas de vorticidade.

Uma primeira questão que se pode colocar é sobre o comportamento de modelo espectral dinâmico durante a simulação. Na Fig. 24 se apresenta a evolução temporal da declividade m do espectro de energia cinética e da energia cinética em k_c. O expoente m decresce rapidamente até um valor $m = 3$, no momento da formação dos vórtices KH (o que implica $\nu_t = 0$), depois desce mais lentamente até o valor 2.5 no tempo do início do primeiro pairing para finalmente tender asintoticamente a $m = 2$, a partir de $t = 25\ \delta_i/U$ até o final da simulação.

A condição necessária para a existência de um regime autosimilar é que os perfis de velocidade média e de flutuações de velocidades sejam independentes da direção longitudinal (ou do tempo para o caso periódico), uma vez que estas últimas são normalizadas com a escala local de comprimento do escoamento. Para nosso caso, esta escala é a espessura de vorticidade local δ

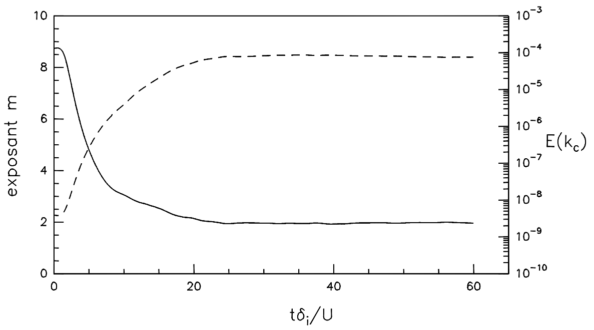

Figura 24: Variação temporal da declividade do espectro tridimensional de energia cinética (—) e da energia cinética em k_c (– – –).

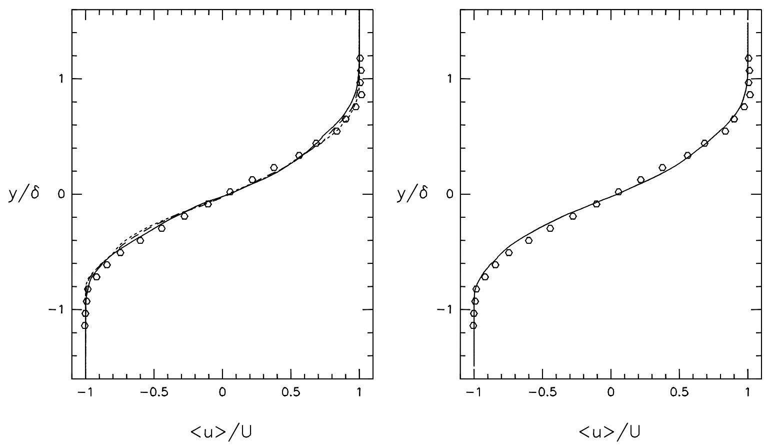

Figura 25: Superposição de perfis de velocidade longitudinal média para $t = 50$ (—), 55 (– – –) e $60\ \delta_i/U$ (- - -) (à esquerda) e comparação com valores medidos em regime auto-similar [4] (○ ○ ○) (à direita).

determinada na forma

$$\delta(t) = \frac{2U}{\frac{d<u>}{dy}\Big|_{max}}, \tag{149}$$

onde a média <> é feita segundo as direções periódicas longitudinal e lateral. A Fig. 25 apresenta os perfis de velocidade longitudinal média para diferentes tempos da simulação. Na mesma figura são superpostos resultados obtidos em experiências de laboratório de camada de mistura autosimilar [4]. Na Fig. 26 são comparados as variançes das flutuações de velocidades com os dados correspondentes da mesma experiência.

Outro critério para julgar a existência de um regime de autosimilaridade é o de examinar o espectro tridimensional de energia cinética, normalizado pelas escalas locais de comprimento δ e de velocidade U. A Fig. 27 apresenta a variação com o tempo do espectros tridimensionais de energia cinética e o espectro normalizado no final da simulação. Como pode-se apreciar, os espectros calculados apresentam valores de declividade muito próxima ao valor teórico predito pela lei de Kolmogorov $m = 5/3$, o que verifica o bom comportamento do modelo de viscosidade espectral dinâmico.

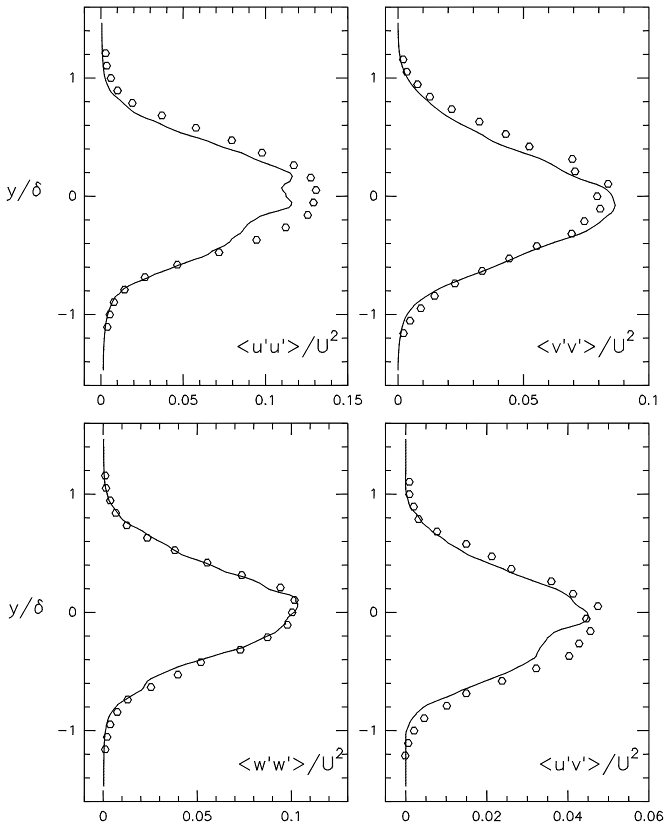

Figura 26: Comparação das varianças de velocidade com valores medidos em regime auto-similar [4] (∘ ∘ ∘).

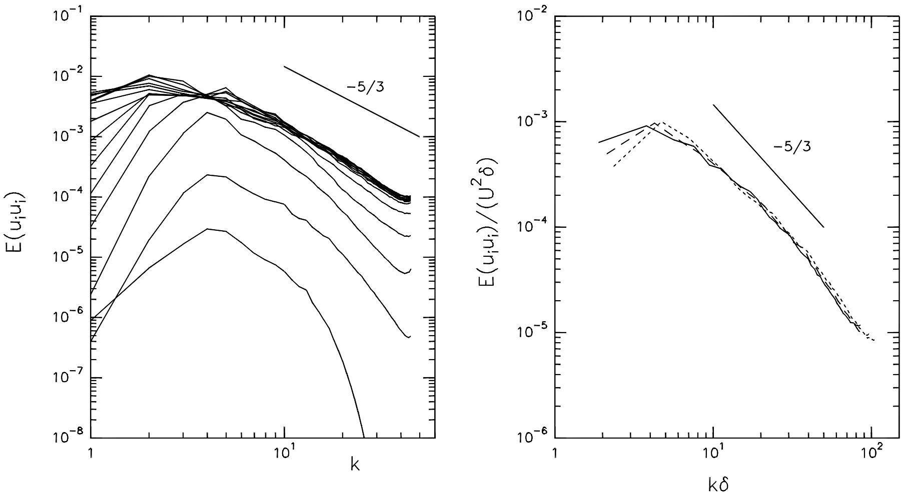

Figura 27: Espectros tridmensionais de energia cinética. À esquerda: variação temporal de E(k) de $t = 0$ à $60\ \delta_i/U$. À direita: espectro de energia cinética normalizado para $t = 50$ (—), 55 (– – –) e $60\ \delta_i/U$ (- - -).

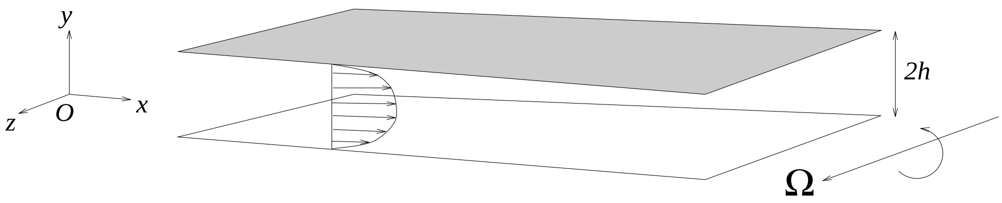

Figura 28: Configuração do escoamento em canal plano em rotação

As Figs. 25, 26 e 27 indicam que a camada de mistura temporal obtida por simulação de grandes escalas utilizando o modelo de viscosidade espectral dinâmico, possui fortes indícios de "ter chegado" ao tempo característico da turbulência autosimilar (para mais detalhes [116]). Desta forma, as estruturas de vorticidade apresentadas na Fig. 23 podem ser consideradas como características de uma camada de mistura temporal em regime autosimilar.

8.3 O canal turbulento em rotação

Um estudo fundamental sobre os mecanismos de base da turbulência próxima de parede pode se efetuar considerando o escoamento em canal plano como protótipo de escoamento parietal simplificado. Neste escoamento, como na camada limite, as características estruturais principais que se observam são a presença de correntes de alta e baixa velocidade na região próxima a parede e de turbilhões em grampo de cabelo mais longe da parede [69]. Vamos a resumir, a continuação, alguns resultados de DNS e LES em canal plano turbulento em aproximação temporal, ao qual serão acrescentadas as modificações devidas a uma rotação sólida constante com respeito ao tempo, e com eixo perpendicular à direção do escoamento (para mais detalhes ver [62, 63, 64, 116]).

Consideremos então, um canal plano de velocidade principal $\vec{u} = (u(y), 0, 0)$ sometido a uma rotação sólida $\vec{\Omega} = (0, 0, \Omega)$ (Fig. 28). Podemos distinguir duas situações para este configuração:

- o vetor rotação está orientado na mesma direção que o vetor vorticidade do escoamento de base, denominada de situação *ciclônica*,
- o vetor rotação e o vetor de vorticidade do escoamento de base são opostos, falamos então de uma situação *anticiclônica*.

Para caracterizar a importância das forças inercias com respeito as forças de Coriolis (devido à rotação sólida), define-se o número de Rossby local

$$Ro(y) = \frac{-du/dy}{2\Omega}, \tag{150}$$

o qual representa a relação entre a vorticidade do escoamento de base e a vorticidade devida à rotação sólida. Valores positivos de $Ro(y)$ representam condições ciclônicas, enquanto que valores negativos representam condições anticiclônicas. Nos escoamentos que apresentam troca de

Re	$Ro^{(i)}$	h^+	(L_x, L_y, L_z)	Malha
3750	∞	162	$(4\pi, 2, 2\pi)$	$128 \times 129 \times 128$
3750	18	162	$(4\pi, 2, 2\pi)$	$128 \times 129 \times 180$
3750	6	151	$(4\pi, 2, 2\pi)$	$128 \times 129 \times 180$
3750	2	104	$(4\pi, 2, 2\pi)$	$96 \times 129 \times 128$

Tabela 2: Resumo das simulações apresentadas

Re	$Ro^{(i)}$	u_τ/u_τ^∞	u_{τ_a}/u_τ^∞	u_{τ_c}/u_τ^∞
3750	∞	1.00	1.00	1.00
3750	18	1.00	1.17	0.80
3750	6	0.93	1.12	0.69
3750	2	0.64	0.70	0.59

Tabela 3: Velocidades de cisalhamento para diferentes números de Rossby

sinal da vorticidade (esteira, canal plano), encontraremos os dois tipos de regiões, enquanto que escoamentos que apresentam um sinal da vorticidade (camada de mistura, camada limite) temos unicamente movimentos ciclônicos.

Os estudos de estabilidade hidrodinâmica mostram que, devido à influência da rotação no canal plano, podem se distinguir três situações distintas em função da taxa de rotação, a saber:

- um efeito estabilizante em situação ciclônica;
- um efeito desestabilizante em situação anticiclônica para taxa de rotação moderada;
- um efeito estabilizante em situação anticiclônica para taxa de rotação forte.

Apresentamos a continuação resultados obtidos de DNS e LES utilizando o modelo de viscosidade espectral dinâmico para o canal plano turbulento com diferentes taxas de rotação. Para isto devem-se resolver as equações completas para DNS (ou LES) apresentadas anteriormente às quais deve ser acrescentado o termo correspondente à força de Coriolis, $2\epsilon_{ijk}\Omega_j u_k$, no lado esquerdo da eq. (1). Os parâmetros característicos das simulações são: o número de Reynolds e o número de Rossby global

$$Re = \frac{U_c h}{\nu}, \qquad Ro^{(i)} = \frac{U_c}{\Omega h}, \tag{151}$$

onde U_c é a velocidade no centro do canal.

Afim de ter uma visão completa do efeito da rotação sólida sobre o escoamento turbulento no canal plano temporal foram realizadas, em primeiro lugar, quatro DNS fazendo variar a taxa de rotação, de zero a um valor limite para o qual a turbulência "resiste" do lado anticiclônico (correspondente ao caso $Ro^{(i)} = 2$). Para um aumento ainda superior da taxa de rotação foi observada uma total relaminarização de todo o escoamento (para o número de Re considerado esta situação corresponde a $Ro^{(i)} = 1$). Os parâmetros da simulação são resumidos na tabela 2. O teste $Ro^{(i)} = \infty$ corresponde ao caso do canal com rotação sólida nula; o clássico canal plano turbulento.

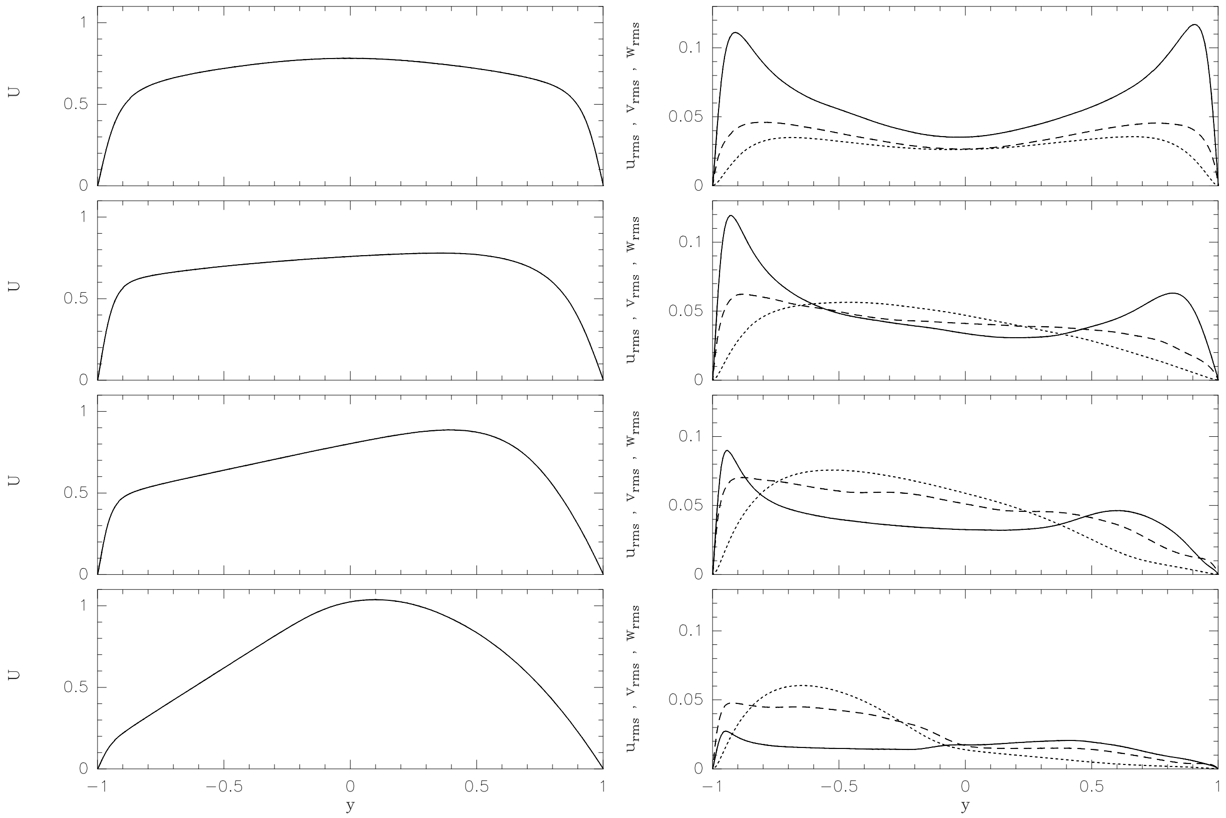

Figura 29: Perfis de velocidade média (à esquerda) e intensidades das flutuações de velocidades: —, $\sqrt{\langle u'^2 \rangle}$; ..., $\sqrt{\langle v'^2 \rangle}$; - - -, $\sqrt{\langle w'^2 \rangle}$ (à direita), para números de Rossby $\infty, 18, 6$ e 2 (de cima para baixo).

Pode-se observar a assimetria no escoamento (com respeito ao centro do canal) imposta pela rotação sólida, comparando os valores das velocidades de cisalhamento para cada parede. Na Tabela 3, estas velocidades encontram-se normalizadas com respeito à velocidade de cisalhamento, u_τ^∞, para o caso sem rotação. A velocidade de cisalhamento ciclônica u_{τ_c} decresce em forma monótona com o aumento da taxa de rotação, enquanto que a velocidade anticiclônica u_{τ_a} tem comportamente variável com a taxa de rotação.

Esta assimetria pode ser verificada observando os perfis de velocidade longitudinal apresentados na Fig. 29, conjuntamente com os perfils de rms das flutuações para os quatro números de Rossby considerados. O efeito da rotação sobre as flutuações de velocidade para $Ro^{(i)} = 18$ é de aumentar os níveis de flutuação na zona anticiclônica e diminuí-los na zona ciclônica, com referência ao caso sem rotação. Para os outros regimes de rotação, o mesmo tipo de assimetria é conservado no escoamento, porém a rotação aumenta somente, na zona anticiclônica, o nível de flutuação das velocidades vertical e lateral.

Uma visão do conjunto das estruturas de vorticidade para as quatro simulações referenciadas pode ser observada na Fig. 30. Três observações importantes devem ser remarcadas:

- perto da parede ciclônica, a rotação reduz progressivamente a atividade turbulenta;

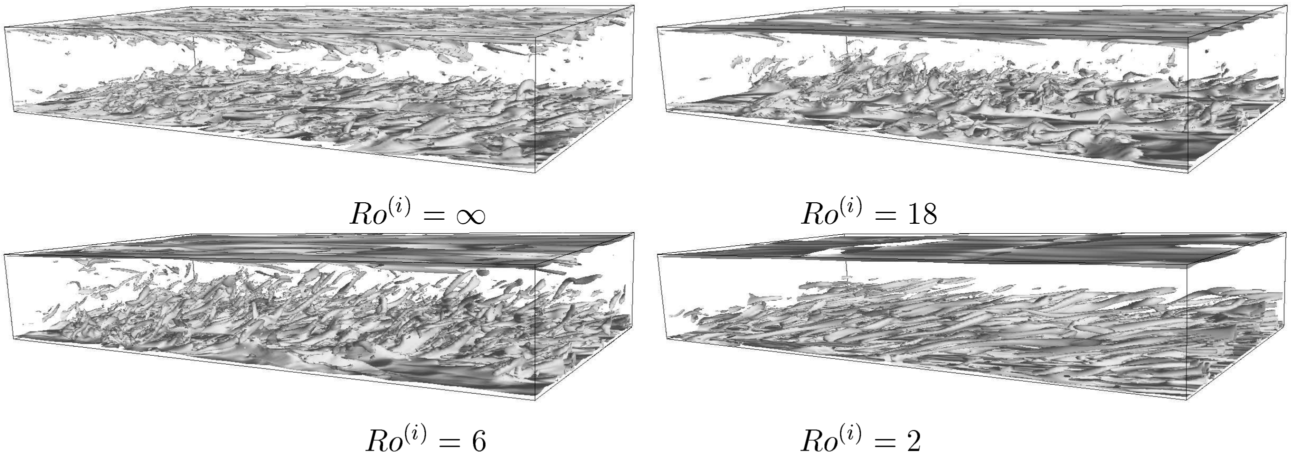

Figura 30: Iso-superfície do módulo da vorticidade relativa: $\omega = 3$ para $Ro^{(i)} = \infty, 18, 6$; $\omega = 2.25$ para $Ro^{(i)} = 2$.

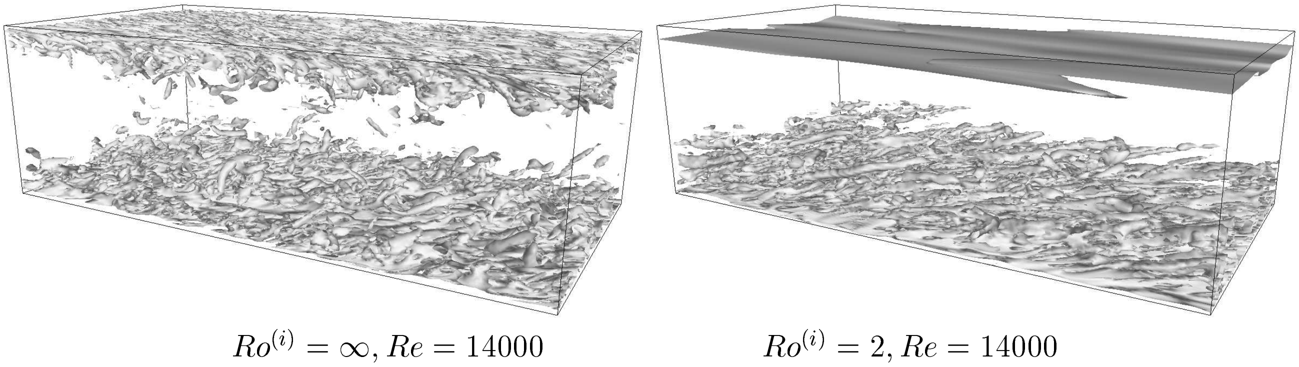

Figura 31: Isosuperfícies do módulo de vorticidade $\omega = 3\ U_m/h$.

- na zona anticiclônica, com a intensificação da rotação, aparecem um conjunto de estruturas de vorticidade desenvolvendo-se até o centro do canal;
- estas estruturas são mais organizadas a medida que a taxa de rotação aumenta.

Assim, a rotação parece ter tendência a organizar o escoamento tanto na zona anticiclônica como na ciclônica: na zona anticiclônica através da presença de turbilhões cada vez mais organizados (mais coerentes), na zona ciclônica relaminarizando o escoamento.

Finalmente, apresentamos resultados de LES do canal em rotação, utilizando o modelo de viscosidade espectral dinâmico, para o qual a declividade do espectro de energia cinética foi calculada para cada posição vertical do canal $m = m(y, t)$, através do cálculo de espectros bidimensionais. Na Fig. 31 observamos as iso-superfícies do módulo de vorticidade para o canal turbulento, no caso sem rotação e com taxa de rotação intensa. Como nos resultados obtidos por DNS, o efeito mais espetacular da influência da taxa de rotação imposta ao canal, é a organização das estruturas de vorticidade do lado anticiclônico. A figura mostra numerosas estruturas em hairpins, porém estas estruturas parecem estar mais orientadas na direção longitudinal a medida que a taxa de rotação aumenta. Esta observação pode ser confirmada através do exame da distribuição de

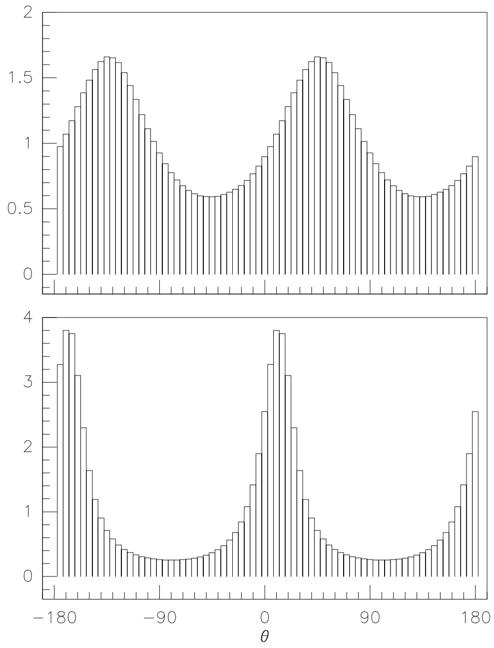

Figura 32: Distribuição do ângulo da inclinação θ: $Ro^{(i)} = \infty$ (acima) e $Ro^{(i)} = 2$ (abaixo).

probabilidade do ângulo de inclinação θ do vetor vorticidade na zona anticicónica, apresentado na Fig. 32. Enquanto que no caso sem rotação este ângulo tem um valor preferencial a 45°, para $Ro^{(i)} = 2$, o ângulo preferencial é de 10°, confirmando que a rotação induz uma forte organização na região anticiclônica do escoamento, orientando cada vez mais as estruturas de vorticidade na direção longitudinal.

8.4 Uma aplicação industrial da LES: dinâmica de vórtices em motores a propelente sólido

Esta seção é destinada à apresentação de resultados obtidos sobre o estudo da dinâmica de vórtices em motores a propelente sólido, como o lançador de satelites MPS P230 de Ariane V. Diferentes estudos têm mostrado a existência de oscilações de pressão neste tipo de motor, tornando instável seu funcionamento [8, 123]. Em particular, os estudos desenvolvidos no programa ASSM (Aerodynamics of Segmented Solid Motors) [18] colocaram em evidência oscilações de empuxo produzidas pela interação de modos de instabilidade hidrodinâmicos e modos acústicos (Fig. 33). Os modos hidrodinâmicos são essencialmente produzidos pelo desprendimento de vórtices a jusante de diferentes descontinuidades na seção do canal: inter-segmentos, alargamento a jusante do último segmento, etc. Os modos acústicos estão ligados diretamente à geometria do motor.

Os fenômenos de combustão que se desenvolvem em um motor a propelente sólido, são limitados a uma fina região situada acima da superfície de combustão. Assim, é possível traduzir a característica não estacionária destes fenômenos por uma condição de contorno para o problema aerodinâmico compressível, descrevendo a estabilidade de funcionamento. Nas condições normais

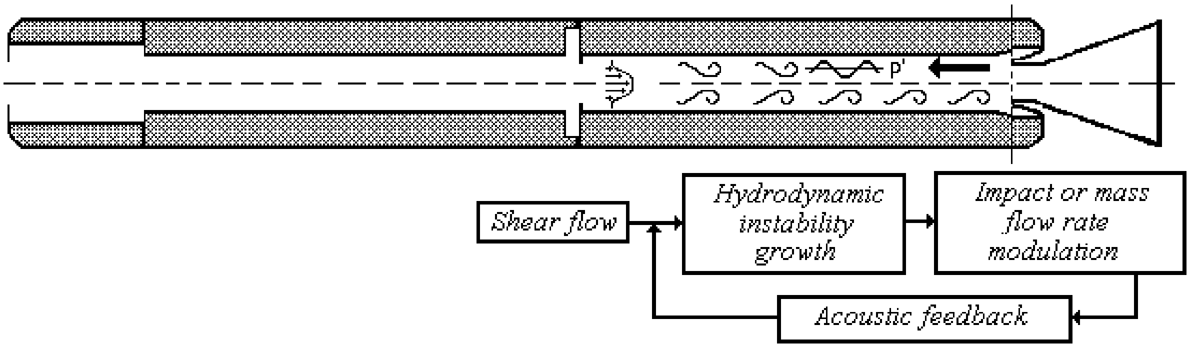

Figura 33: Ilustração da interação entre modos acústicos e hidrodinâmicos em um motor a propelente sólido [78].

de funcionamento, a espessura da chama na matriz do propergol é muito pequena com respeito a uma dimensão característica do motor, o que permite decompor a análise de estabilidade de um motor a propelente sólido em dois problemas: um de combustão e outro aerodinâmico, que podem ser estudados separadamente [61]. Notemos que a propulsão por propelente sólido compreende diferentes processos, dos quais alguns são um pouco conhecidos em regime estacionário e totalmente desconhecidos em não estacionário. Podemos citar, por exemplo: o acoplamento escoamento-estrutura, a resposta do propelente, a interação vórtices-partículas, a interação vórtices-chama, a interação vórtices-parede ...

A geometria de um motor a propelente sólido é definida para um instante dado, devido que a combustão do propelente faz naturalmente diminuir o cargamento. Apresentaremos a continuação resultados de uma LES utilizando o modelo da função de estrutura filtrada em uma geometria simplificada tridimensional plana. O objetivo da simulação é de compreender a dinâmica de vorticidade para esta configuração. Outros testes em configuração bidimensionais plana e axissimétrica permitiram verificar o comportamento instável deste tipo de motor, caracterizado pelo desprendimento periódico de vórtices a jusante do cargamento, a um frequência característica associada ao segundo modo longitudinal acústico [113, 114, 24].

O código numérico utilizado resolve as equações completas de Navier-Stokes para escoamentos compressíveis em malhas estruturadas utilizando uma extensão de ordem (2,4) do esquema explícito de Mc-Cormack [49]. A geometria tridimensional plana escolhida para o cálculo foi definida em função de um caso teste 2D previamente utilizado (Caso teste C1). A resolução foi de $(318 \times 31 \times 90)$ e como modelo sub-malha utilizou-se o modelo da função de estrutura filtrada. Alguns dados da simulação são: a vazão mássica é 21.2 $kg/m^2/s$, a temperatura de injeção de 3387 K e pressão de funcionamento a montante do motor 4.66 bar.

O cálculo estendeu-se, uma vez que foi evacuada completamente a condição inicial, por 12 T, sendo T, o período fundamental da instabilidade de KH, o que representa 13 ms do processo de combustão (a um custo de $50hs$ de Cray C98...). Durante esse tempo foram registrados dados de pressão, velocidade e temperatura para diversos pontos do motor, permitindo assim analizar o comportamento espectral do mesmo (ver [114]). A Fig. 34 apresenta a evolução do módulo da vorticidade para um período da instabilidade de KH completo. A figura permitiu identificar dois modos de instabilidade secundárias que são a origem da formação de turbilhões longitudi-

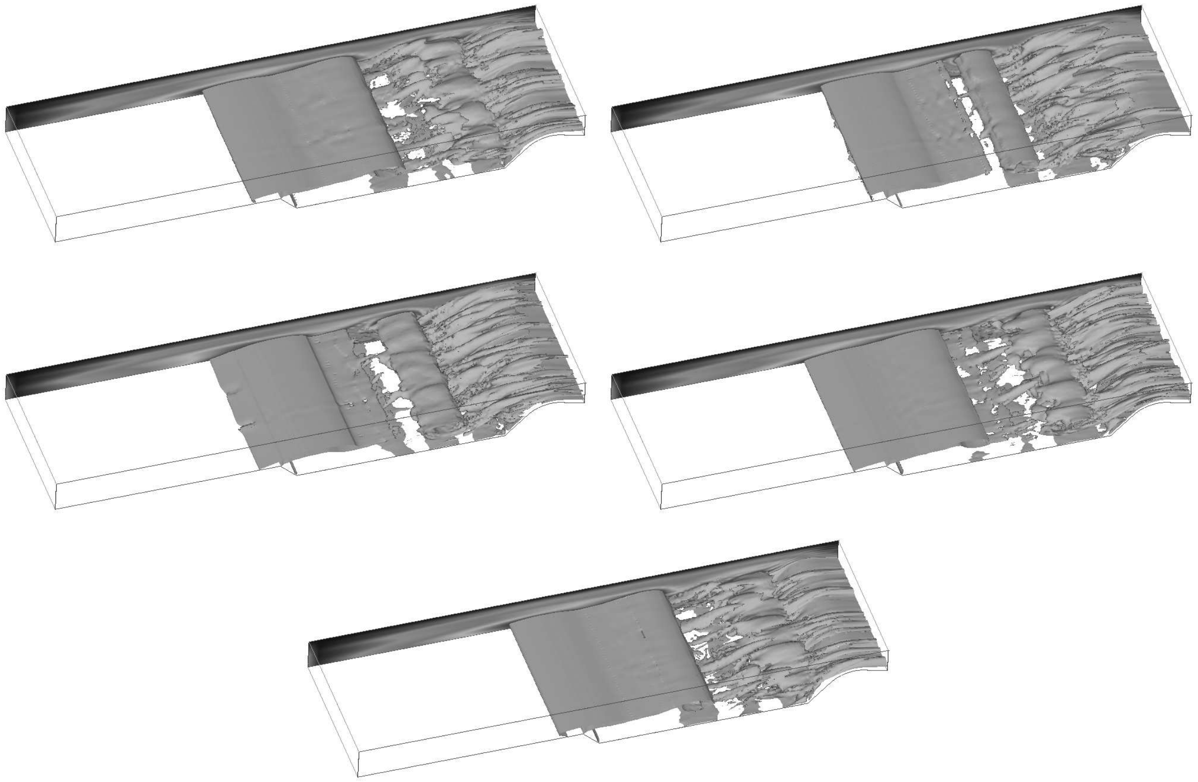

Figura 34: Isosuperfície de norma de vorticidade em $t_o, t_o + T_2/4, t_o + T_2/2, t_o + 3T_2/4$ e $t_o + T_2$, com T_2 o período do modo mais amplificado predito pela teoria de estabilidade linear.

nais. A primeira está associada ao campo de deformação imposto pelos turbilhões de KH e que leva à formação de turbilhões longitudinais, analogos aos observados na camada de mistura. A segunda instabilidade está ligada à camada limite que se separa a montante do divergente. As imagens destes turbilhões fazem lembrar aos turbilhões de Görtler [108], formado por instabilidade centrífuga em convergentes e rampas de compressão [21].

9 Desafios para DNS e LES

Nesta última seção pretende-se simplesmente colocar uma série de problemas que a simulação numérica direta, a simulação de grandes escalas e a modelização sub-malha deverão afrontar nos próximos tempos.

Devemos considerar que, hoje em dia, existe uma certa "facilidade" para realizar uma DNS ou LES, com os computadores e PC que dispomos. Por exemplo, a simulação UWAKE apresentada na seção 8.1 foi realizada em um PC com processador Pentium III de $600 Mhz$, 512 Mb de memória principal e um fim de semana de tempo de cálculo. Isto teria sido impossível de fazer cinco anos antes...

Do ponto de vista da modelização sub-malha, novos modelos deverão reduzir o suporte no espaço físico e de Fourier. Neste sentido, a idéia de introduzir a transformada de ondeletas, certamente está no caminho correto. Um ponto a destacar é a determinação de um espectro local no espaço físico. Isto não é simples, porém seu cálculo seria de grande importância aos efeitos de determinar a declividade do dito espectro no espaço físico, o que permite corrigir qualquer desvio com respeito à lei de Kolmogorov. A modelagem mista parece ser uma opção que cumpre com as exigências de conteúdo físico e estabilidade numérica, necessárias para ter o bom comportamento esperado.

Novas simulações diretas e de grandes escalas deverão ser capazes de tratar problemas que envolvam uma física da turbulência mais complexa, como por exemplo

- efeitos de estratificação em turbulência atmosférica;
- interação acústica-turbulência;
- combustão turbulenta;
- MHD e EHD de escoamentos turbulentos.
- controle da turbulência,

Por último, a DNS e LES têm outro desafio pela frente: o de levar em conta geometrias complexas. Neste caso o método de fronteiras virtuais oferece perspectivas interesantes.

Agradecimentos O autor agradece aos Profs. Marcel Lesieur, Joel Ferziger, Eric Lamballais e Pierre Comte pelas valiosas colaborações e/ou discussões ao longo destes últimos anos. Os resultados apresentados foram obtidos de pesquisas financiadas por CNES, CEMAGREF (França) e FAPERGS (Brasil). A maioria das simulações numéricas apresentadas na seção 8 foram realizadas nos supercomputadores do IDRIS, Orsay (França).

Referências

[1] Bardina, J., Ferziger, J. H., and Reynolds, W. C. Improved subgrid models for large eddy simulation. *AIAA paper* **80** (1980), 1357.

[2] Bartello, P., Métais, O., and Lesieur, M. Coherent structures in rotating three-dimensional turbulence. *J. Fluid Mech.* **273** (1994), 1–29.

[3] Batchelor, G. K. *The Theory of Homogeneous Turbulence.* Cambridge Univ. Press., 1953.

[4] Bell, J., and Mehta, R. Development of a two-stream mixing layer from tripped and untripped boundary layers. *AIAA Journal* **28** (1990), 2034–2042.

[5] Bernal, L., and Roskho, A. Streamwise vortex structure in plane mixing layer. *J. Fluid Mech.* **170** (1986), 499–525.

[6] Betchov, R., and Szewczyk, G. Stability of a shear layer between parallel streams. *Phys. Fluids* **6** (1963), 1391–1396.

[7] Brown, G., and Roshko, A. On density effects and large structure in turbulent mixing layers. *J. Fluid Mech.* **64** (1974), 775–816.

[8] Brown, R., Dunlap, R., Young, S., and Waugh, R. Vortex shedding as a source of acoustic energy in segmented solid rockets. *Journal of Spacecraft and Rockets* **18** (1981), 217–221.

[9] Brun, C., Da Silva, C., and Friedrich, R. LES of a round jet with SGS models based on the velocity structure function. Preprint, 2000.

[10] Brun, C., and Friedrich, R. A-priori tests of SGS stress models in fully developed pipe flow and a new local formulation. In *Proc. of the Second ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Eddy Simulation* (Grenoble, France, 1999).

[11] Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A., and Zang, T. A. *Spectral Methods in Fluid Dynamics.* Springer-Verlag, New York, 1988.

[12] Carvalho, S. Uma simulação numérica do escoamento na artéria carotida. Dissertação de mestrado em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1998.

[13] Chaouat, B. Numerical simulations of fully developed channed flows using k-e, algebraic and Reynolds stress models. In *37th AAIA Aerospace Sciences Meeting* (Reno, NV (USA), 1999), pp. 1–11.

[14] Chollet, J., and Lesieur, M. Modélisation sous maille des flux de quantité de mouvement et de chaleur en turbulence tridimensionnelle isotrope. *La Météorologie* **29-30** (1982), 183–191.

[15] Chollet, J. P. Two-point closure used for a sub-grid scale model in large eddy simulations. In *Turbulent Shear Flows* (1985), L. J. S. B. *et al*, Ed., Springer, pp. 62–72.

[16] Chollet, J. P., and Lesieur, M. Parameterization of small scales of the three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *J. Atmos. Sci.* **38** (1981), 2747–2757.

[17] Clark, R., Ferziger, J., and Reynolds, W. Evaluation of subgrid scale models using an accurately simulated turbulent flow. *J. Fluid Mech.* **91** (1979), 1–16.

[18] CNES-ONERA. Fonctionnement des moteurs à propergol solide segmentes pour lanceurs spatiaux. Rapport, CNES, 1992.

[19] Colella, P., and Woodward, P. The piecewise parabolic method PPM for gas-dynamics simulations. *J. Comp. Phys.* **54** (1984), 174–201.

[20] Comte, P. *Etude par simulation numérique de la transition à la turbulence en écoulement cisaillé libre.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1989.

[21] Comte, P., and David, E. Large-eddy simulation of Görtler vortices in a curved compression ramp. In *Proc. of the Second French Russian workshop on experimentation, modelization, computation in flow turbulence and combustion* (1994), B. Chetverushkin, A. Desideri, Y. A. Kuznetsov, J. Periaux, and B. Stoufflet, Eds., John Wiley & sons Publishers.

[22] Comte, P., Ducros, F., Silvestrini, J., Lamballais, E., Métais, O., and Lesieur, M. Simulation des grandes échelles d'écoulements transitionnels. In *Proc. 74th Fluid Dynamics AGARD Symposium on "application of direct and large eddy simulation to transition and turbulence"* (Chania, Crete, 1994).

[23] Comte, P., Lesieur, M., and Lamballais, E. Large- and small-scale stirring of vorticity and a passive scalar in a 3-d temporal mixing layer. *Phys. Fluids A* **4**, 12 (1992), 2761–2778.

[24] Comte, P., Silvestrini, J., and Bégou, P. Streamwise vortices in Large-Eddy simulations of mixing layers. *Eur. J. Mech. B/Fluids* **17**, 4 (1998), 615–637.

[25] David, E. *Modélisation des écoulements compressibles et hypersoniques : une approche instationnaire.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.

[26] Deardorff, J. W. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. Fluid Mech.* **41** (1970), 453–480.

[27] Deschamps, C. Modelos algébricos e diferenciais. In *I Escola de Primavera de Transição e Turbulência* (Rio de Janeiro, 1998).

[28] Ducros, F. *Simulations numériques directes et des grandes échelles de couches limites compressibles.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1995.

[29] Ducros, F., Comte, P., and Lesieur, M. Direct and large-eddy simulations of a supersonic boundary layer. In *Turbulent Shear Flows 9* (1993), Springer-Verlag.

[30] Ducros, F., Comte, P., and Lesieur, M. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a weakly compressible boundary layer over a flat plate. *J. Fluid Mech.* **326** (1996), 1–36.

[31] El-Hady, N. M., and Zang, T. A. Large-eddy simulation of nonlinear evolution and breakdown to turbulence in high-speed boundary layers. *Theoret. Comput. Fluid Dynamics* **7** (1995), 217–240.

[32] Erlebacher, G., Hussaini, M., Speziale, C., and Zang, T. Toward the large eddy simulation of compressible turbulent flow. Report 87–20, ICASE, 1987.

[33] Erlebacher, G., Hussaini, M., Speziale, C., and Zang, T. Toward the large eddy simulation of compressible turbulent flow. *J. Fluid Mech.* **238** (1992), 155–185.

[34] Fadlun, E. A., Verzico, R., Orlandi, P., and Mohd-Yusof, J. Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *J. Comp. Phys.* **161** (2000), 35–60.

[35] Favre, A. Equations des gaz turbulents compressibles.ii - mèthode des vitesses macroscopiques pondérées par la masse volumique. *Journal de Mécanique* **4** (1965), 391–421.

[36] Ferziger, J. Lecture on large-eddy simulation. Tech. rep., Stanford University, 1995.

[37] Ferziger, J., and Peric, M. *Computational methods fo fluid dynamics.* Springer, 1997.

[38] Fletcher, C. *Computational techniques for fluid dynamics.* Springer–Verlag, 1988.

[39] Frisch, U. *Turbulence.* Cambridge University Press, 1995.

[40] Gagne, I. *Etude expérimentale de l'intermittence et des singularités dans le plan complexe en turbulence développée.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1987.

[41] Garnier, E., Métais, O., and Lesieur, M. Synoptic and frontal-cyclone scale instabilities in baroclinic jets flows. *J. Atmos. Sci.* **55** (1998), 1316–1335.

[42] Germano, M. Turbulence : the filtering approach. *J. Fluid Mech.* **238** (1992), 325–336.

[43] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P., and Cabot, W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A* **3**, 7 (1991), 1760–1765.

[44] Ghosal, S. An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence. *J. Comp. Phys.* **125** (1996), 187–206.

[45] Ghosal, S., Lund, T., Moin, P., and Akselvoll, K. A dynamic localization model for large-eddy simulation of turbulent flows. *J. Fluid Mech.* **286** (1995), 229.

[46] Ghosal, S., and Moin, P. The basic equations for the large eddy simulation of turbulent flows in complex geometry. *J. Comp. Phys.* **118** (1995), 24–37.

[47] Goldstein, D., Handler, R., and Sirovich, L. Modeling a no-slip boundary condition with an external force field. *J. Comp. Phys.* **105** (1993), 354–366.

[48] Gonze, M. A. *Simulation numérique des sillages en transition à la turbulence.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.

[49] Gottlieb, D., and Turkel, E. Dissipative two-four methods for time-dependent problems. *Math. Comp.* **30** (1976), 703–723.

[50] Guerreiro, C. B. Resolução numérica das equações de Navier- Stokes com esquemas de diferenças finitas de 4ta ordem. Dissertação de mestrado em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2000.

[51] Heitz, D. *Etude expérimentale du sillage d'un barreau cylindrique se développant dans une couche de mélange plane turbulente.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1999.

[52] Herring, J., and Kraichnan, R. Comparison of some approximations for isotropic turbulence. In *Statistical models and turbulence* (1972), M. Rosenblatt and C. V. Atta, Eds., vol. **12**, Springer-Verlag, pp. 148–194.

[53] Huang, L., and Ho, C. Small-scale transition in a plane mixing layer. *J. Fluid Mech.* **210** (1990), 475–500.

[54] Klebanoff, P., TidstromMoin, K., and Sargent, L. The three dimensional nature of the boundary layer instability. *J. Fluid Mech.* **12** (1962), 1–34.

[55] Kline, S., Reynolds, W., Schraub, W., and Runstadler, P. The struture of turbulent-boundary layers. *J. Fluid Mech.* **30** (1967), 741–773.

[56] Kolmogorov, A. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **30** (1941), 310–305.

[57] Kolmogorov, A. On degeneration of isotropic turbulence in an incompressible viscous liquid. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **31** (1941), 538–541.

[58] Konrad, J. *An experimental investigation of mixing in two-dimensional turbulent shear flows with applications to diffusion-limited chemical reactions.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1976.

[59] Kraichnan, R. H. Eddy viscosity in two and three dimensions. *J. Atmos. Sci.* **33** (1976), 1521–1536.

[60] Kravchenko , A., and Moin, P. Aliasing errors in large-eddy simulations. *CTR Manuscript* **156** (1996).

[61] Kuentzmann, P. Généralités sur les instabilités de combustion. In *Fonctionnement des moteurs à propergol solide segmentes pour lanceurs spatiaux* (1992), CNES, Ed.

[62] Lamballais, E. *Simulations numériques de la turbulence dans un canal plan tournant.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1996.

[63] Lamballais, E., Lesieur, M., and Métais, O. Effects of spanwise rotation on the vorticity stretching in transitional and turbulent channel flow. *Int. J. Heat and Fluid Flow* **17**, 3 (1996), 324–332.

[64] Lamballais, E., Lesieur, M., and Métais, O. Influence of a solid-body rotation upon coherent vortices in a channel. *C. R. Acad. Sci.*, 323 (1996), 95–101. Série II b.

[65] Landau, L., and Lifchitz, E. Mécanique quantique. In *Physique théorique.* Mir, 1975.

[66] Lasheras, J., and Choi, H. Three-dimensional instability of a plane free shear layer: an experimental study of the formation and evolution of streamwise vortices. *J. Fluid Mech.* **189** (1988), 53–86.

[67] Lele, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comp. Phys.* **103** (1992), 16–42.

[68] Lesieur, M. Understanding coherent vortices through computational fluid dynamics. *Theoret. Comput. Fluid Dynamics* **5** (1993), 177–193.

[69] Lesieur, M. *Turbulence in fluids, (Third Edition).* Kluwer Academic Publishers, 1997.

[70] Lesieur, M., and Métais, O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **28** (1996).

[71] Lesieur, M., and Rogallo, R. Large-eddy simulation of passive scalar diffusion in isotropic turbulence. *Phys. Fluids A* **1**, 4 (1989), 718–722.

[72] Leslie, D. *Developments in the theory of turbulence.* Clarendon Press, 1973.

[73] Lighthill, J. *Physiological fluid mechanics.* Springer-Verlag, 1972.

[74] Lilly, D. Lectures notes on turbulence. In *Lectures Notes on Turbulence*, J. Herring and J. M. Williams, Eds. World Scientific, 1987.

[75] Lilly, D. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A* **4** (1992), 633–635.

[76] Lin, S., and Corcos, G. The mixing layer: deterministic models of a turbulent flow. part 3: The effect of plane strain on the dynamics of streamwise vortices. *J. Fluid Mech.* **141** (1984), 139–178.

[77] Liu, S., Meneveau, C., and Katz, J. On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jet. *J. Fluid Mech.* **275** (1994), 83–119.

[78] Lupoglazoff, N., and Vuillot, F. Numerical simulation of vortex shedding phenomenon in 2d test case solid rocket motors. In *30th AAIA Aerospace Sciences Meeting* (Reno, NV (USA), 1992), pp. 1–9.

[79] Mahesh, K. A family of high order finite difference schemes with good spectral resolution. *J. Comp. Phys.* **145** (1998), 332–358.

[80] Mason, P. J. Large-eddy simulation : A critical review of the technique. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **120** (1994), 1–26.

[81] Métais, O., and Lesieur, M. Large-eddy simulations of isotropic and stably-stratified turbulence. In *Advances in Turbulence 2*, H. H. Fernholz and H. E. Fiedler, Eds. Springer-Verlag, 1989.

[82] Métais, O., and Lesieur, M. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *J. Fluid Mech.* **239** (1992), 157–194.

[83] Metcalfe, R., Orszag, S., Brachet, M., Menon, S., and Riley, J. Secondary instability of a temporally growing mixing layer. *J. Fluid Mech.* **1987** (1987), 207–243.

[84] Michalke, A. On the inviscid instability of the hyperbolic tangent velocity profile. *J. Fluid Mech.* **19** (1964), 543–556.

[85] Moin, P., and Kim, J. Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.* **118** (1982), 341–377.

[86] Moin, P., and Kim, J. The structure of the vorticity field in turbulent channel flow. part 1. analysis of instantaneous fields and statistical correlations. *J. Fluid Mech.* **155** (1985), 441–464.

[87] Moin, P., and Mahesh, K. Direct numerical simulation: a tool in turbulence research. *Annu. Rev. Fluid Mech. 30* (1998), 539–578.

[88] Moin, P., Squire, K., Cabot, W., and Lee, S. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids A* **11** (1991), 2746–2757.

[89] Moinat, P. *Application des techniques de simulation des grandes échelles à un écoulement en géométrie complexe: la marche en dérapage.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1994.

[90] Moser, R., and Rogers, M. Mixing transition and the cascade to small scales in a plane mixing layer. *Phys. Fluids A* **3** (1991), 1128–1134.

[91] Navier, C. L. Mémoire sur les lois du mouvement des fluides. *Mém. Acad. Roy. Sci.* **6** (1823), 389–440.

[92] Normand, X., and Lesieur, M. Direct and large-eddy simulation of transition in the compressible boundary layer. *Theoret. Comput. Fluid Dynamics* **3** (1992), 231–252.

[93] Orlansky, I. A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. *J. Comp. Phys.* **21** (1976), 251–269.

[94] Orszag, S. Analytic theories of turbulence. *J. Fluid Mech.* **41** (1970), 363–386.

[95] Persillon, H., and Braza, M. Physical analysis of the transition to turbulence int the wake of a circular cylinder by three dimensional Navier- Stokes simulation. *J. Fluid Mech.* **365** (1998), 23–88.

[96] Pierrehumbert, R., and Widnall, S. The two- and three dimensional instability of a spatially periodic shear layer. *J. Fluid Mech.* **114** (1982), 59–82.

[97] Piomelli, U. High reynolds number calculations using the dynamic subgrid-scale stress model. *Phys. Fluids A* **5** (1993), 1484–1490.

[98] Piomelli, U. Large-eddy simulation: achievements and challenges. Preprint submitted to elsevier preprint, 1999.

[99] Piomelli, U., Cabot, W. H., Moin, P., and Lee, S. Subgrid-scale backscatter in turbulent and transitional flows. *Phys. Fluids A* **3**, 7 (1991), 1766–1771.

[100] Piomelli, U., Ferziger, J., and Moin, P. New approximate boundary conditions for large eddy simulations of wall-bounded flows. *Phys. Fluids A* **1**, 6 (1989), 1061–1068.

[101] Pironneau, O. *Finite-elments methods in fluids.* Wiley-Mason, 1989.

[102] Porter, D., and Woodward, P. Numerical simulations of compressible convection. In *New tools in turbulence modelling*, O. Métais and J. Ferziger, Eds. Les editions de physique - Springer, 1996, pp. 281–290.

[103] Prestemon, S. Quelques applications des ondelettes à l'étude des ecoulements cisaillés. Mémoire de DEA, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.

[104] Reynolds, O. An experimental investigation of the circunstances which determine whether the motion of water shall be direct and sinuous, and the law of resistance in parallel streams. *Phil. Trans. Roy. Soc.* (1883), 51–105.

[105] Rogallo, R., and Moin, P. Numerical simulation of turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **16** (1984), 99–137.

[106] Rose, H., and Sulem, P. Fully developed turbulence and statistical mechanics. *Journal de Physique* **39** (1978), 441–484.

[107] Saiki, E. M., and Biringen, S. Numerical simulation of a cylinder in uniform flow: application of a virtual boundary method. *J. Comp. Phys.* **123** (1996).

[108] Saric, W. Görtler vortices. *Annu. Rev. Fluid Mech.* **26** (1994), 379–409.

[109] Scotti, A., Meneveau, C., and Lilly, D. Generalized smagorinsky model for anisotropic grids. *Phys. Fluids A* **5** (1993), 2306–2308.

[110] She, S., Jackson, E., and Orszag, S. Structure and dynamics of homogeneous turbulence: models and simulations. *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **434** (1991), 101–124.

[111] Silveira, A. Simulação de grandes escalas de escoamentos turbulentos. In *I Escola de Primavera de Transição e Turbulência* (Rio de Janeiro, 1998).

[112] Silveira, A., Grand, D., Métais, O., and Lesieur, M. A numerical investigation of the coherent structure of turbulence behind a backward-facing step. *J. Fluid Mech.* **256** (1993), 1–25.

[113] SILVESTRINI, J. *Simulations des grandes échelles des zones de mélange; application à la propulsion solide des lanceurs spatiaux.* Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1996.

[114] SILVESTRINI, J., COMTE, P., AND LESIEUR, M. Coherent vortices in solid propellent rocket motors using LES. In *Proc. 14th Brazilian Congress of Mechanical Engineering COBEM97* (Bauru, Brasil, 1997).

[115] SILVESTRINI, J., AND LAMBALLAIS, E. Direct numerical simulations of wakes using virtual cylinders. In *Proc. XI Congress on Numerical Methods ant their Aplications* (Bariloche, 2000).

[116] SILVESTRINI, J., LAMBALLAIS, E., AND LESIEUR, M. Spectral dynamic model for LES of free and wall shear flows. *Int. J. Heat and Fluid Flow* **19** (1998), 492–504.

[117] SILVESTRINI, J. H. Sensibilité aux conditions initiales des structures cohérentes dans une couche de mélange temporelle. Mémoire de DEA, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.

[118] SILVESTRINI, J. H. Dynamics of coherent vortices in mixing layers using direct numerical and large-eddy simulations. *J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences* **XXII**, 1 (2000), 53–67.

[119] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Mon. Weath. Rev.* **91**, 3 (1963), 99–164.

[120] STOKES, G. G. On some cases of fluid motion. *Trans. Camb. Phil. Soc.* **8** (1843), 105.

[121] VOKE, P., AND YANG, Z. Numerical studies of the mechanism of bypass transition in the flat plate boundary layer. In *Turbulent Shear Flows 9* (1993), pp. Spriger–Verlag.

[122] VREMAN, A., GEURTS, B., AND KUERTEN, J. Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer. *J. Fluid Mech.* **339** (1997), (357–390).

[123] VUILLOT, F. Vortex-shedding phenomena in solid rocket motors. *Journal of Propulsion and Power* **11** (1995), 626–639.

[124] WILLIAMSON, J. H. Low-storage Runge-Kutta schemes. *J. Comp. Phys.* **35** (1980), 48.

[125] YOSHIZAWA, Y. Statistical theory for compressible turbulent shear flows with the application to subgrid modelling. *Phys. Fluids* **29** (1986), 2152–2164.

[126] ZANG, Y., STREET, R., AND KOSEFF, J. A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. *Phys. Fluids A* **5** (1993), 3186–3196.