La modelització de la turbulència

Discurs de presentació de Francesc Xavier Grau i Vidal com a membre numerari de la Secció de Ciències i Tecnologia, llegit el dia 4 d'abril de 2022

Institut d'Estudis Catalans

SECCIÓ DE CIÈNCIES I TECNOLOGIA

La modelització de la turbulència

La modelització de la turbulència

Discurs de presentació de Francesc Xavier Grau i Vidal com a membre numerari de la Secció de Ciències i Tecnologia, llegit el dia 4 d'abril de 2022

Barcelona, 2022

Institut d'Estudis Catalans | Secció de Ciències i Tecnologia

Biblioteca de Catalunya. Dades CIP

Grau i Vidal, Francesc Xavier, autor
La Modelització de la turbulència. — Primera edició
Referències bibliogràfiques
ISBN 9788499656472
I. Institut d'Estudis Catalans. Secció de Ciències i Tecnologia II. Títol
1. Turbulència — Models matemàtics. 2. Mecànica de fluids computacional
532.517.4:519.86/.87

© Francesc Xavier Grau i Vidal
© 2022, Institut d'Estudis Catalans, per a aquesta edició
Carrer del Carme, 47. 08001 Barcelona

Primera edició: març del 2022

Text revisat lingüísticament per la Unitat d'Edició del Servei Editorial de l'IEC

Disseny de la coberta: Azcunce | Ventura

Compost per fotocomposició gama, s. l.
Imprès a Service Point FMI, SA

ISBN: 978-84-9965-647-2
Dipòsit Legal: B 6157-2022

DOI: 10.2436/10.2000.71.1

Aquesta obra és d'ús lliure, però està sotmesa a les condicions de la llicència pública de Creative Commons. Es pot reproduir, distribuir i comunicar l'obra sempre que se'n reconegui l'autoria i l'entitat que la publica i no se'n faci un ús comercial ni cap obra derivada. Es pot trobar una còpia completa dels termes d'aquesta llicència a l'adreça: *http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/es/deed.ca.*

1. Motivació

Amb la meva incorporació a la Secció de Ciències i Tecnologia de l'Institut d'Estudis Catalans (IEC), hi té entrada una petita manifestació de l'àmbit científic de la mecànica de fluids. Durant pràcticament quaranta anys he desenvolupat la meva activitat científica en aquest àmbit —que és alhora objecte d'estudi des de la física, les matemàtiques i l'enginyeria— i ho he fet a partir d'interessos molt relacionats amb la indústria química i amb el medi ambient, tan connaturals al Camp de Tarragona i a la meva universitat. I, encara, des de la singular finestra de la modelització i la simulació per ordinador dels fenòmens de transport de quantitat de moviment, de matèria i d'energia amb la producció eventual d'una reacció química —una part del que, d'altra banda, s'ha constituït com a disciplina en si mateixa: la mecànica de fluids computacional (CFD, *computational fluid dynamics*). Amb aquest rerefons, l'elecció de la temàtica d'aquest discurs no m'ha estat senzilla, ja que m'han atret i m'atrauen aspectes tan diversos com els mètodes numèrics de resolució de sistemes d'equacions diferencials[1] (les citacions següents corresponen a la selecció d'una publicació característica de l'àmbit d'interès) o de generació de sistemes de coordenades generalitzades,[2] molt singularment, la inestabilització de fluxos i la transició del flux laminar al flux turbulent, tant en convecció

1. S. Piñol i F. X. Grau (1998), «The influence of the no-slip boundary condition on the prediction of drag, lift and heat transfer coefficients in the flow past a 2D cylinder», *Numerical Heat Transfer A*, 34 (3), p. 313-330.

2. B. Herrera, F. X. Grau i F. Giralt (2003), «Orthogonal grids around convex bodies using foliations», *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56, p. 637-649.

natural[3] com en convecció forçada,[4] o les aplicacions a problemes industrials[5] o ambientals,[6] així com els treballs conjunts amb empreses.[7]

Si hi ha un element comú en tots aquests aspectes, té a veure amb la modelització de la turbulència, que és el tema que he triat. Efectivament, tant els estudis de caire teòric com les aplicacions en problemes industrials o ambientals han implicat treballar amb fluxos que o bé transiten cap a la turbulència o bé són francament turbulents. D'altra banda, he dut a terme aquest estudi des de vessants diferents, com són el desenvolupament de models,[8] l'anàlisi de l'estructura dels fluxos turbulents,[9] el desenvolupament experimental de correlacions per a la predicció del transport de calor[10] o la simple aplicació a fluxos industrials complexos.[11]

Però hi ha encara una altra raó, més personal. Va ser amb una pregunta sobre la turbulència, de la qual en aquell moment no sabia gaire res, ni havia tingut encara cap experiència pràctica ni teòrica, que vaig començar l'apassionant viatge en el món de la ciència. Era gener de 1983, quan tot just havia acabat el servei militar i m'havia incorporat a la delegació de Tarragona de la Universitat de Barcelona, que, qui va ser el meu director de tesi, el professor Francesc Giralt, em va preguntar, per començar a treballar: «què en saps, del model k-ε?». En aquell moment, res. De fet, ni tan sols podia identificar que m'estava parlant d'un model de turbulència.

3. J. Pallarès, F. X. Grau i F. Giralt (1999), «Flow transitions in laminar Rayleigh-Bénard convection in a cubical cavity at moderate Rayleigh numbers», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42 (4), p. 753-769.

4. Y. Spasov, J. Herrero, F. X. Grau i F. Giralt (2003), «Linear stability analysis and numerical calculations of the lid-driven flow in a toroidally shaped cavity», *Physics of Fluids*, 15 (1), p. 134-146.

5. X. Inglès, J. Pallarès, M. Larre, L. Méndez i F. X. Grau (2013), «Experimental and numerical study of turbulent mixing in a model of a polymerization reactor», *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 19 (4), p. 1251-1256.

6. I. Cuesta, F. X. Grau, F. Giralt i Y. Cohen (1999), «Air-water mass transfer of organics from shallow ponds under laminar recirculation», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 42 (1), p. 165-179.

7. J. Bigorra, F. J. Sánchez, I. Cuesta, J. Herrero, J. Giralt i F. X. Grau (2000), «ESTIMA: A thermal simulation software for the optimal design of printed circuit board in the automotive industry», a *Advanced computational methods in heat transfer VI,* Southampton, Wit Press, p. 386-394.

8. J. Herrero, F. X. Grau, J. Grifoll i F. Giralt (1991), «A near wall k-ε formulation for high Prandtl heat transfer», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34 (3), p. 711-721.

9. J. Pallarès, A. Vernet, J. A. Ferré i F. X. Grau (2007), «Eduction of near wall flow structures responsible for large deviations of the momentum-heat transfer analogy and fluctuations of wall transfer rates in turbulent channel flow», *Computers & Fluids*, 36 (8), p. 1327-1334.

10. I. Martorell, J. Herrero i F. X. Grau (2003), «Natural convection from narrow horizontal plates at moderate Rayleigh numbers», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46 (13), p. 2389-2402.

11. M. G. Fard, Y. Stiriba, B. Gourich, C. Vial i F. X. Grau (2020), «Euler-Euler large eddy simulations of the gas-liquid flow in a cylindrical bubble column», *Nuclear Engineering and Design*, 369, 110823.

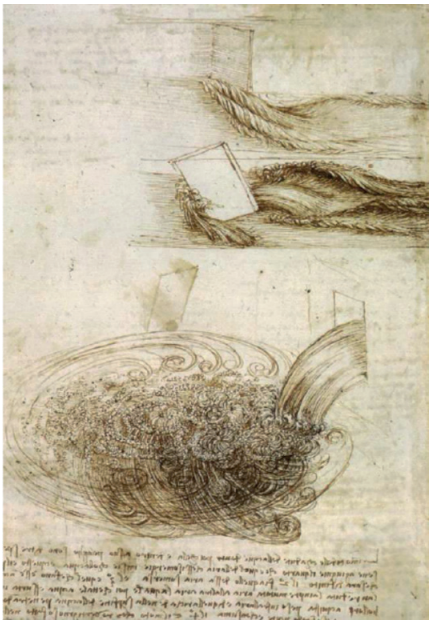
Aquella pregunta —i el que hi havia de necessitat de desenvolupar l'àmbit de la mecànica de fluids computacional a Tarragona— em va dur a una estada predoctoral a l'Institut de Mecànica de Fluids de Tolosa de Llenguadoc (IMFT), a la compleció de la tesi doctoral sobre simulació numèrica del deixant d'un cilindre i a una estada postdoctoral al llavors acabat de crear Center for Turbulence Research (CTR) de NASA-Ames i Universitat de Stanford.

Avui, doncs, amb aquest discurs faré una descripció breu del camí que condueix a la resposta de la pregunta primera; és a dir, «què en saps, del model k-ε?», que ben bé podria ser un subtítol, però que, en qualsevol cas, ens servirà d'excusa per a parlar de turbulència, de les seves característiques, dels diferents models existents, de les aplicacions i limitacions que té i d'una certa perspectiva de futur.

Abans d'endinsar-m'hi, avui és un dia especialment indicat per a recordar que els avenços en qualsevol branca de la ciència molt rarament són fruit del treball aïllat o individual. Cadascú contribueix amb el seu granet de sorra a una tasca que està molt distribuïda. A més, en ciències experimentals, i en enginyeria, fins i tot el treball individual es fa en col·laboració i es duu a terme en el si de grups de recerca. Per tant, vull aprofitar per reconèixer i agrair la tasca de totes les persones que m'han acompanyat en aquest camí. Com que la relació és massa llarga per a poder ser explicitada completament i, malgrat que alguns noms ja apareixen al petit conjunt de publicacions exemple que he esmentat, el risc inherent de ser injust en la citació em porta a voler anomenar els que considero els meus mestres principals: Francesc Giralt, ja esmentat; Hieu Ha Minh, de l'IMFT, i Bill Reynolds, de la Universitat de Stanford. També, tots els meus doctorands: Joan Herrero, Ildefonso Cuesta, Jordi Pallarès, Salvador Piñol, Yulian Spasov, Íngrid Martorell, Ángel Jiménez, Obai Younis, Manuel Martínez del Amo, Roland Blanch, Guillaume Novelli i Mojtaba Fard. Així mateix, els altres companys amb qui he treballat tots aquests anys: Josep Anton Ferré, Anton Vernet, Jaume Giralt, Youssef Stiriba i Lluís Vázquez.

2. Què és la turbulència? Definicions

Per començar, hem de reconèixer que el nostre diccionari, el de l'IEC, no ens hi ajuda gaire, quant a la definició de *turbulència*: 1. «Condició de turbulent»; 2. «Torbament de l'ordre»; 3. «Conjunt de moviments irregulars de l'aire que se superposen al seu moviment mitjà». Només la tercera accepció ens diu quelcom útil per al que necessitem avui, si bé demana una millora clara, que és substituir *aire* per *fluid*, ja que, de fet, el fenomen de la turbulència es pot manifestar en tots els fluids en moviment i no només en l'aire. Una de les imatges més relacionades amb el concepte *turbulència* la trobem en els dibuixos de Leonardo Da Vinci (figura 1) corresponents al seu estudi sobre el moviment de l'aigua, on visualitza, precisament, la característica principal de la turbulència: el devessall de remolins.



«[…] Observeu el moviment de la superfície de l'aigua que s'assembla al dels cabells, i té dos moviments, dels quals un continua amb el flux de la superfície, l'altre forma les línies dels remolins; així l'aigua forma remolins, una part dels quals es deuen a l'impuls del corrent principal i l'altra, al moviment incidental i al flux de retorn.»

Figura 1. Estudis de flux d'aigua, de Leonardo Da Vinci.
Font: L. Da Vinci (*c.* 1508-1509), *Codex Leicester*, imatge amb llicència Creative Commons.

En realitat, cap dels principals autors o teòrics de la turbulència no gosa donar-ne una definició tancada, per comprensió. Tothom s'inclina més per l'extensió d'una llista de característiques que es donen en els fluxos turbulents. Així, Arkadi Tsinober[12] recull en un annex diferents intents de definició de *turbulència*, i ell mateix prova de definir-la: «La turbulència és la manifestació del comportament caòtic espaciotemporal dels fluxos de fluids a un nombre de Reynolds gran, és a dir, d'un sistema dissipatiu fortament no lineal amb un nombre extremament alt de graus de llibertat descrit per les equacions de Navier-Stokes». Veiem, doncs, que és pràcticament inútil i del tot insuficient dir això o alguna cosa similar.

Tanmateix, hi ha un parell de definicions clàssiques que ens ajudaran a tenir una visió global de la turbulència. Segons Hinze,[13] «el moviment de fluids turbulents és una condició irregular de flux en què les diverses magnituds mostren una variació aleatòria amb les coordenades temporals i espacials, de manera que es poden discernir valors mitjans estadísticament diferents», que és una precisió afegida a la definició de Taylor i Von Kármán,[14] segons la qual «la turbulència és un

12. A. Tsinober (2001), *An informal introduction to turbulence*, Dordrecht, Països Baixos, Kluwer Academic Publishers.

13. J. O. Hinze (1975), *Turbulence*, Nova York, McGraw-Hill.

14. T. von Kármán (1937), «Turbulence», *Journal of the Royal Aeronautical Society*, 41 (324), p. 1109-1143.

moviment irregular que, en general, apareix en fluids, gasos o líquids, quan passen per superfícies sòlides o, fins i tot, quan corrents veïns del mateix fluid passen per sobre o per sota dels altres».

L'alternativa, doncs, és entendre com és un flux turbulent a través de la identificació de les seves característiques. L'intent més referenciat és el de Tennekes i Lumley,[15] per als quals les característiques definidores del flux turbulent són les següents:

> — *Irregularitat*. […] o aleatorietat del flux turbulent. Fa inviable un enfocament completament determinista dels problemes de la turbulència; en canvi, esdevenen necessaris els mètodes estadístics.
>
> — *Difusivitat*. […] que provoca una barreja ràpida i un augment de la transferència de quantitat de moviment, de calor i de matèria. És la característica més important pel que fa a les aplicacions.
>
> — *Hipòtesi del continu*. La turbulència és un fenomen continu, regit per les equacions de la mecànica de fluids. Fins i tot l'escala més petita és molt més gran que qualsevol escala molecular.
>
> — *Nombres de Reynolds grans*. […] sovint s'origina com una inestabilitat dels fluxos laminars a mesura que augmenta el nombre de Reynolds (Re) (o el de Rayleigh —Ra—, en convecció natural). Les inestabilitats estan relacionades amb la interacció de termes viscosos i termes d'inèrcia no lineal en les equacions del moviment. L'aleatorietat i la no linealitat es combinen de manera que les equacions de turbulència són gairebé intractables. Aquesta manca d'eines (matemàtiques) fa que els enfocaments teòrics de la turbulència es basin en l'assaig i error, amb la qual cosa no ens podem fonamentar només en les equacions per a obtenir respostes als problemes.
>
> — *Fluctuacions de vorticitat en 3D*. La turbulència és rotacional i tridimensional o en 3D. La turbulència es caracteritza per uns nivells alts de vorticitat fluctuant. Les fluctuacions aleatòries de vorticitat que s'esdevenen en la turbulència no es podrien mantenir si les fluctuacions de velocitat fossin bidimensionals.
>
> — *Dissipació*. Els fluxos turbulents sempre són dissipatius. Els esforços de cisalla viscosos realitzen un treball de deformació que augmenta l'energia interna a costa de l'energia cinètica de la turbulència. La turbulència requereix un subministrament continu d'energia per a compensar aquestes pèrdues viscoses. Aquestes dues característiques (vorticitat en 3D i dissipació) distingeixen la turbulència de les ones aleatòries.
>
> — *Els fluxos turbulents són fluxos*. La turbulència no és una característica dels fluids sinó dels fluxos de fluids. La dinàmica de la turbulència és la mateixa en tots els fluids, siguin líquids o gasosos. No es coneix cap solució general de les equa-

15. H. Tennekes i J. L. Lumley (1972), *A first course in turbulence*, Cambridge, MA, MIT Press.

cions de Navier-Stokes; en conseqüència, no hi ha cap solució general als problemes de flux turbulent. I cada flux turbulent és diferent.

Em convencen dues apreciacions més. Una és la introduïda per Lesieur,[16] que diu: «una propietat comuna dels fluxos turbulents és que són capaços de barrejar quantitats transportades molt més ràpidament que si només hi hagués implicats processos moleculars». D'aquesta manera, segons Lesieur, un flux turbulent:

a) Ha de ser impredictible, en el sentit que una petita incertesa sobre el seu coneixement en un moment inicial donat s'amplificarà fins a fer impossible una predicció determinista precisa de la seva evolució.

b) Ha de satisfer la propietat de mescla augmentada definida anteriorment.

c) Ha d'implicar una àmplia gamma de longituds d'ona espacials.

L'altra apreciació, de Leschziner,[17] estableix: «Sovint es diu que la turbulència és "atzarosa" o "caòtica". Certament, no és aleatòria […] l'evolució de la turbulència a partir d'algun estat inicial es regeix per les equacions de Navier-Stokes, que se suposa que són exactes […]. No obstant això, compleix àmpliament la definició de *caos*».

En definitiva, si hi ha un concepte intrínsecament lligat a la turbulència és el que ja va reflectir Da Vinci en els seus dibuixos, els dels remolins. Hi ha una infinitat de visualitzacions de fluxos turbulents que es poden posar d'exemple, si bé n'he seleccionat una que correspon a una solució per simulació directa de la turbulència en el flux al voltant d'una ala d'avió[18] (*https://www.youtube.com/watch?v=4KeaAhVoPIw*).

L'interès d'aquest vídeo és doble. D'una banda, mostra clarament l'estructura arremolinada d'una capa límit turbulenta, en aquest cas, simulada per ordinador. De l'altra, assenyala també les grans limitacions actuals i per al futur proper associades a la simulació directa de la turbulència, de la qual parlarem breument més endavant, quan evidenciem la molt diminuta extensió computacional —d'1,25 × 1,25 × 40 cm— respecte a les dimensions reals de l'ala de l'aeronau.

L'essència de la turbulència són els remolins de totes mides, des de la més gran del sistema de què es tracti fins a grandàries microscòpiques. I, per a captar l'essència de les coses, no hi ha res millor que la poesia. Així, en el món de la turbulència és molt conegut un poema de Lewis Fry Richardson,[19] matemàtic i meteoròleg anglès que dona nom al nombre de Richardson —d'importància en meteorologia,

16. M. Lesieur (1997), *Turbulence in fluids*, 3a ed., Dordrecht, Països Baixos, Kluwer.

17. M. Leschziner (2016), *Statistical turbulence modelling for fluid dynamics - Demystified*, Londres, Imperial College Press.

18. P. Schlatter i R. Örlü (2010), «Assessment of direct numerical simulation data of turbulent boundary layers», *Journal of Fluid Mechanics*, 659, p. 116-126.

19. L. F. Richardson (1922), *Weather prediction by numerical processes*, Cambridge, Cambridge University Press, p. 66.

en oceanografia i, en general, en mecànica de fluids— que, en situacions de convecció mixta, determina si el flux està dominat per la convecció natural o per la convecció forçada:

> Big whirls have little whirls
> that feed on their velocity,
> and little whirls have lesser whirls
> and so on to viscosity.

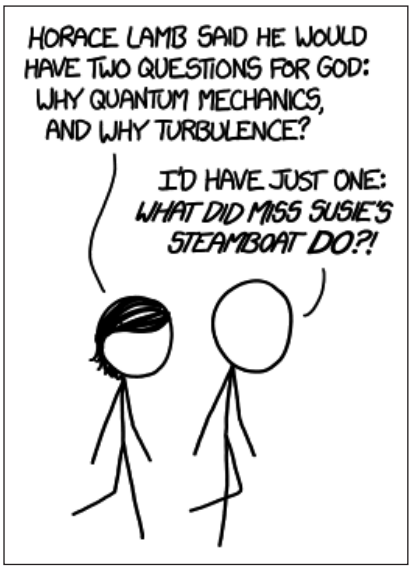


Figura 2. Còmic núm. 1315: «Questions for God» (10 gener 2014).
Font: *xkcd.com: A webcomic of romance, sarcasm, math, and language*.
Nota: *Miss Susie had a steamboat* és una cançó popular de saltar la corda.

Per cloure aquest apartat sobre definicions de la turbulència, ve a tomb l'acudit il·lustrat a la figura 2, en el qual es fa referència a una citació de Sir Horace Lamb (l'autor d'*Hydrodynamics*), que, en una conferència a l'Associació Britànica per a l'Avenç de la Ciència, va expressar amb enginy la dificultat d'explicar i estudiar la turbulència en els fluids. Segons els informes, va dir: «Ara soc un vell i, quan em mori i vagi al cel, hi ha dos temes sobre els quals espero il·luminació. Un és l'electrodinàmica quàntica i l'altre és el moviment turbulent dels fluids. I, sobre el primer, soc força optimista». (Aquesta citació també s'atribueix a Werner Heisenberg).

Efectivament, sembla que en el futur imaginable no hi ha gaires possibilitats de bastir una teoria formal, pura i completa de la turbulència.[20] Malgrat els esforços de tot l'aparell teòric de la física i la matemàtica, la turbulència roman irresol-

20. A. Tsinober (2001), *An informal introduction to turbulence*, Dordrecht, Països Baixos, Kluwer Academic Publishers.

ta, estrictament parlant. Fins i tot, es fa difícil acotar i definir també d'una manera tancada el problema. Tal com diu Saffman, «una de les coses que sempre he trobat preocupants en l'estudi del problema de la turbulència és que no estic del tot segur de quin és realment el problema teòric de la turbulència […]. Una de les raons per les quals crec que tenim tantes dificultats per resoldre-ho és que no estem segurs del que és»).[21]

En qualsevol cas, el fet incontrovertible és que la turbulència és present, incideix i ocupa l'interès de científics en una varietat de camps enorme. Així, és cabdal en l'enginyeria aeronàutica, especialment, en el disseny dels avions, el sostenimment dels quals es basa en el flux —turbulent— d'aire al voltant de les ales, però, també, en el disseny dels elements impulsors —ja siguin d'hèlix o de reacció—, així com de tota mena d'accessoris necessaris, com ara els trens d'aterratge. Pel mateix motiu, és crucial també en l'enginyeria naval, en què simplement se substitueix l'aire per l'aigua. I ho és en l'enginyeria civil, sempre que l'estructura per dissenyar hagi d'estar sotmesa a algun flux d'aire (per exemple, en ponts) o d'aigua (canals, dics…). Així mateix, és present en l'arquitectura (sobretot en edificis alts, sotmesos als esforços provocats pel vent, i, cada cop més, també en el disseny correcte dels ambients interiors). És omnipresent en l'enginyeria industrial —especialment, en l'enginyeria química—, amb totes les conduccions de fluids que implica, les bombes, els compressors, els reactors químics, les columnes d'absorció, la destil·lació, els intercanviadors, les torres de refrigeració… D'una manera semblant, és clau en l'enginyeria ambiental, tant en el disseny d'instal·lacions de tractament com en l'avaluació d'impactes o la predicció de l'evolució d'accidents. I, fent un salt d'escala, però mantenint els mateixos fenòmens físics, és determinant en les ciències de l'atmosfera i en l'oceanografia. També, cada vegada té més presència en la recerca, si bé en l'àmbit biomèdic sempre hi ha estat present per la importància que té en el disseny de dispositius mecànics que han d'interferir amb algun dels fluxos corporals. Darrerament, la COVID-19 ens ha fet preocupar per les distàncies interpersonals necessàries a fi de reduir les possibilitats de contagi per transmissió aèria del virus, que eventualment es pot veure incrementada per episodis de tos o esternuts; en aquest cas, la turbulència té també un paper principal en la dinàmica de les microgotes expel·lides.[22]

Bàsicament, doncs, podem dir que la turbulència és ubiqua. És rellevant en tants i tants àmbits científics perquè és un fenomen que s'esdevé en la major part de fluxos reals. I el flux de fluids (gasos i líquids, però singularment aire o aigua)

21. P. G. Saffman (1991), «Plenary discussion: Is this the theory for these experiments?», a J. Jiménez, ed., *The global geometry of turbulence*, Nova York, Plenum Press, col·l. «NATO ASI Series; NSSB, vol. 268», p. 348.

22. A. Fabregat *et al.* (2021), «Direct numerical simulation of the turbulent flow generated during a violent expiratory event», *Physics of Fluids*, 33 (3), 035122.

és present en la immensa majoria de sistemes físics, en totes les dimensions en les quals hom pugui considerar la matèria com un continu, des dels micròmetres fins als milers de quilòmetres.

3. Modelització de la turbulència

Abans d'entrar en la formulació de models, convé remarcar algunes observacions i idees prèvies:

— Com hem vist, la turbulència és un mar de *remolins* que comprenen totes les escales possibles del flux; des de la més gran —del sistema o recipient que el conté— fins a les escales microscòpiques, encara dins la hipòtesi del continu.

— La turbulència produeix *transferència d'energia*: extreu energia del camp mitjà i la transfereix, en *cascada energètica*, fins a les escales difusives, en què la viscositat té prou entitat per a transformar-la en energia interna, en calor.

— La *irregularitat* típica d'un flux turbulent implica una impredictibilitat real. Això comporta que, de fet, una realització concreta del flux sigui irrellevant.

— Des d'un punt de vista aplicat, l'interès se centra en els *camps mitjans* (de velocitat, de pressió, de forces, de fluxos i escalars) i en l'efecte estadístic de la turbulència sobre ells.

— No és clar com s'ha de definir *camp mitjà*:

a) Camp real = camp mitjà turbulent *estacionari* + camp fluctuant.

b) Camp real = camp mitjà turbulent *no estacionari* + camp fluctuant; en aquest cas, com es pot distingir la inestabilitat de la fluctuació? La qüestió porta a la necessitat de diferenciar els moviments coherents dels estocàstics, diferenciació que únicament és no ambigua en fluxos periòdics en mitjana.

— L'objectiu de la modelització és arribar a obtenir una teoria o model quantitatiu tractable que es pugui utilitzar per a calcular quantitats d'interès i de rellevància pràctica.

— Més d'un segle d'experiència ha demostrat que el «problema de la turbulència» és notòriament difícil i no hi ha perspectives d'una teoria analítica simple.

— Una gran part dels esforços actuals —i l'esperança en els avenços pràctics— rau en el poder cada cop més gran dels ordinadors, és a dir, de la mecànica de fluids computacional. La capacitat predictiva és limitada, tant per l'extensió dels recursos computacionals disponibles (la visualització esmentada més amunt de Schlatter i Örlü[23] requereix més de 7.500 milions de punts de càlcul i d'hores i dies de supercomputació per a minuts de simulació) com per la validesa dels models, quan no es fa una simulació directa.

23. P. Schlatter i R. Örlü (2010), «Assessment of direct numerical simulation data of turbulent boundary layers», *Journal of Fluid Mechanics*, 659, p. 116-126.

— La turbulència es resisteix i és difícil d'aproximar. Per què?

a) El camp instantani de velocitat $\vec{U}(\vec{x},t)$ és tridimensional (3D), depèn del temps i és extremament variable (aleatori).

b) Els moviments turbulents més grans ho són gairebé tant com l'amplada característica del flux, és a dir, són afectats pels límits i, per tant, no esdevenen universals.

c) Hi ha una àmplia gamma d'escales de temps i d'escales de longitud.

d) Les dificultats sorgeixen del terme *convectiu no lineal* de les equacions de Navier-Stokes (NS, les veurem a continuació) i, també, del concepte *gradient de pressió*. Per a un camp solenoidal (té divergència zero), el gradient de pressió és no lineal i no local.

3.1. *Visió general de possibilitats*

Les aproximacions a la modelització de la turbulència s'han fet des de la matemàtica, la física, l'enginyeria, les ciències de l'atmosfera o l'oceanografia, entre d'altres, i amb enfocaments molt diversos. Fugint de qualsevol intent d'exhaustivitat, considero dos grans grups, que concentren la immensa majoria de publicacions en l'àmbit. Són la simulació de flux turbulent i la simulació de camp mitjà o model de turbulència.

3.1.1. Simulació de flux turbulent

Les equacions que governen el flux es resolen per a un camp de velocitat dependent del temps que, fins a un cert punt, representa el camp de velocitat $\vec{U}(\vec{x},t)$ per a *una* realització del flux turbulent. Hi ha:

— *Simulació numèrica directa* (DNS, *direct numerical simulation*). Solució numèrica completa de les equacions de Navier-Stokes i l'equació de continuïtat (balanços diferencials de forces i de matèria en un element de fluid).

— *Simulació de grans remolins* (LES, *large eddy simulation*). Solució numèrica d'un camp de velocitat «filtrat» espacialment, representatiu dels moviments turbulents a una escala més gran. Les equacions resoltes inclouen un model per a la influència de moviments a una escala inferior que no es resolen directament (SGS, *subgrid scale*).

3.1.2. Simulació de camp mitjà o model de turbulència

En aquest cas, es resolen les equacions de transport per a algunes magnituds mitjanes, per exemple, $\overline{U_i}, \overline{u_i u_j}, k\ldots$ (ho veurem més endavant). Entre aquests models hi ha:

— Els mètodes de *funcions de densitat de probabilitat* (PDF, *probability density functions*).

— Les *equacions de Navier-Stokes amb mitjana de Reynolds* (RANS, *Reynolds-averaged Navier-Stokes*), amb molts enfocaments diferents, que és el camí per on avançarà aquest discurs.

3.2. *Criteris per a la valoració dels models*

Són molts els models proposats i que estan realment en ús (al voltant de la centena), fruit del fet que hi ha una àmplia varietat de fluxos turbulents i un gran nombre de qüestions que cal abordar. Per això té sentit disposar d'un ampli ventall de models que difereixen quant a complexitat, precisió i altres atributs, ja que no hi ha cap teoria completa de la turbulència i, per tant, cap model no s'adapta a totes les necessitats. Pope[24] planteja un seguit de criteris a l'hora d'avaluar els diversos models:

— Nivell de descripció.

— Completesa.

— Cost i facilitat d'ús.

— Rang d'aplicabilitat.

— Precisió.

Com a exemples per a aprofundir en aquests criteris, considerem dos extrems entre el ventall d'enfocaments: el més senzill, el *model de longitud de mescla* (MLM, *mixing length model*) i la *simulació numèrica directa* (DNS).

— En la DNS, el $\vec{U}(\vec{x},t)$ s'obté mitjançant solució numèrica de NS per a una realització del flux.

— L'MLM, aplicat al flux de capa límit bidimensional estadísticament estacionari, consisteix en les equacions de capa límit per a $\overline{U(x,y)}$ i $\overline{V(x,y)}$ en les quals l'esforç de tall de Reynolds i la *viscositat turbulenta* (ho veurem més endavant) s'obtenen a partir de les equacions del model

$$\overline{uv} = -\nu_T \frac{\partial U}{\partial y}, \nu_T = \ell^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right|,$$

on la longitud de mescla ℓ s'especifica com a funció de la posició o distància a la paret.

24. S. B. Pope (2000), *Turbulent flows*, Cambridge, Cambridge University Press.

3.2.1. Nivell de descripció

En la DNS, el flux es descriu completament per $\vec{U}(\vec{x}, t)$, a partir del qual es pot determinar tota la resta d'informació (visualitzar estructures de flux, extreure estadístiques multitemps o multipunt…).

En l'MLM, la descripció es troba al nivell de flux mitjà i, a part de la longitud de mescla especificada, les úniques quantitats representades directament són U i V. No es pot obtenir informació sobre l'estructura de la turbulència, de les correlacions de dos punts, de les PDF, etc. Tanmateix, la descripció limitada que proporcionen els tancaments de flux mitjà és adequada en moltes aplicacions.

3.2.2. Completesa

Un model es considera complet si les seves equacions constitutives estan lliures d'especificacions dependents del flux. Un flux es distingeix d'un altre únicament per l'especificació de les propietats del material i les condicions inicials i de contorn.

La DNS és completa; en canvi, l'MLM és incomplet (cal especificar-ne ℓ i l'especificació adequada depèn del flux).

3.2.3. Cost i facilitat d'ús

En tots els fluxos —fins i tot en els més simples— calen mètodes numèrics per a resoldre les equacions dels models. La dificultat d'efectuar un càlcul de model de turbulència depèn tant del flux com del model. Pope ofereix una categorització dels fluxos turbulents d'acord amb les seves geometries, recollida a la taula 1.

En resum, es pot afirmar que:

— La dificultat computacional augmenta amb la dimensionalitat estadística del flux.

— La dificultat disminueix si el flux és estadísticament estacionari o si es poden utilitzar equacions de capa límit.

— En alguns enfocaments (la DNS, la LES…), el cost computacional augmenta ràpidament amb el nombre de Reynolds (Re); en d'altres, la dependència de Re és marginal (per exemple, l'MLM).

— Altres costos importants són els inherents al desenvolupament de codis de càlcul i els recurrents associats al seu ús, i que són canviants en el temps. En aquest sentit, encara és vigent la llei de Moore, totalment empírica, que mostra un creixement en la capacitat de càlcul amb un ritme sostingut de doblament cada dos anys. Sembla que hi ha signes d'estar arribant al límit físic de capacitats de transistors en un microxip i que s'és a les portes d'una nova revolució en la computació amb l'adveniment dels ordinadors quàntics.

Taula 1
Exemples de fluxos turbulents de diversos nivells de dificultat computacional (la dificultat augmenta cap avall i cap a la dreta)

Dimensionalitat (nombre de direccions d'inhomogeneïtat estadística)	*Capa límit (estadísticament estacionari, s'hi apliquen aproximacions de capa límit)*	*Estadísticament estacionari*	*No estadísticament estacionari*
0			Flux de cisalla homogeni
1		Flux de canonada o canal completament desenvolupat	Capa de mescla temporal
2	Capa límit de placa plana; doll en coflux	Flux en una expansió sobtada en un conducte bidimensional	Flux sobre un cilindre oscil·lant
3	Capa límit en una ala	Jet en un flux creuat; flux sobre un avió o un edifici	Flux en un cilindre d'un motor alternatiu

Font: S. B. Pope (2000), *Turbulent flows*, Cambridge, Cambridge University Press.

3.2.4. Rang d'aplicabilitat

Pel que fa al rang d'aplicabilitat:

— No tots els models són aplicables a tots els fluxos. Per exemple, els models basats en espectres de velocitat o correlacions de dos punts només són aplicables a fluxos homogenis.

— L'aplicabilitat de l'MLM es limita a l'especificació de la longitud de mescla.

— Els requisits computacionals restringeixen l'aplicabilitat dels models.

— La majoria dels models es basen en el supòsit de flux de densitat constant. Molts fluxos impliquen fenòmens addicionals que, acoblats al camp de velocitat, limiten l'aplicabilitat d'alguns models de turbulència (transferència de calor i massa, reacció química, compressibilitat…).

3.2.5. Precisió

La discrepància entre les propietats de flux mesurades i les calculades sorgeix dels elements següents:

a) Imprecisions del model.
b) Error numèric (de càlcul).
c) Error de mesura.
d) Discrepàncies en les condicions inicials i/o de contorn.

La comparació entre les propietats de flux mesurades i les calculades determina la precisió del model només si els errors derivats de *b* a *d* són relativament petits.

3.3. *Equacions de Navier-Stokes i mitjana de Reynolds*

En el que seguirà, farem un ús explícit de les equacions de Navier-Stokes (NS). Per bé que no cal fer-ne una deducció, sí que convé presentar-les de la manera més convenient. Estrictament parlant, les equacions NS són un balanç de forces (o expressió de la segona llei de Newton, o de conservació de la quantitat de moviment) aplicat a una partícula de fluid. En la forma que emprarem, contenen també l'aproximació de fluid newtonià (és a dir, viscositat molecular constant, independent de l'esforç de tall). No caldria fer aquesta aproximació, però resulta molt pràctica des del punt de vista expositiu, ja que la generalització a qualsevol fluid només afegeix complicació a les expressions matemàtiques, sense que afecti l'essència del que volem desenvolupar. També, per a simplificar les expressions, farem servir el conveni de sumació d'Einstein, o notació d'Einstein, que estalvia el signe sumatori que se sobreentén en totes les expressions amb un índex repetit.

Per acabar, el model general es completa amb el balanç de matèria, també aplicat a una partícula de fluid. Efectivament, per a tancar el sistema cal aquest balanç, ja que les NS són tres equacions diferencials en derivades parcials que impliquen quatre variables: els tres components de la velocitat i la pressió. La quarta equació necessària ens la proporciona aquest balanç de matèria. Així, el conjunt d'equacions fonamentals que governen qualsevol flux és:

$$\frac{\partial \rho U_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_k U_m}{\partial x_m} = -\frac{\partial P}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_m}\mu\left(\frac{\partial U_k}{\partial x_m} + \frac{\partial U_m}{\partial x_k}\right) + \rho g_k \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_m}{\partial x_m} = 0 \tag{2}$$

Per simplicitat, considerarem la forma que té en *fluxos incompressibles*. Malgrat que sovint es treballa amb *fluids compressibles* (tots els gasos), l'aproximació de flux incompressible és molt adequada, atès que els efectes de compressibilitat només són apreciables en nombres de Mach propers a 1 (per a Ma < 0,3, uns 100 m/s en aire amb unes condicions normals, el flux es comporta com a totalment in-

compressible). Així, la forma més abreujada d'aquest sistema per a un flux incompressible d'un fluid newtonià de propietats físiques constants és:

$$\rho\left(\frac{\partial U_k}{\partial t}+\frac{\partial U_k U_m}{\partial x_m}\right)=-\frac{\partial P}{\partial x_k}+\mu\frac{\partial^2 U_k}{\partial x_m \partial x_m}+\rho g_k \tag{3}$$

$$\frac{\partial U_m}{\partial x_m}=0 \tag{4}$$

El fet que les propietats físiques siguin constants, el flux incompressible o el fluid newtonià no modifica l'essència d'aquest conjunt d'equacions i la seva relació amb la turbulència. Les característiques principals venen donades per uns termes convectius no lineals —que són la font de totes les inestabilitats i, per tant, de la turbulència— i per uns de difusius proporcionals a la viscositat, que en representen el pou, allà on mor la turbulència.

El tronc principal de la modelització matemàtica de la turbulència neix dels treballs originals d'Osborne Reynolds,[25] en honor de qui es dona nom al nombre adimensional que relaciona les forces d'inèrcia i les viscoses ($\mathrm{Re}=\rho UD/\mu$, de manera que, a nombres de Re baixos, el flux està dominat per les forces viscoses i tendeix a ser laminar, i, a mesura que augmenta el Re, el flux s'inestabilitza i es desenvolupa la turbulència). En aquests treballs, Reynolds introdueix la separació d'un camp de velocitat instantani entre un component mitjà i una fluctuació al voltant d'aquesta mitjana. Estrictament, el que proposa Reynolds és $u=\bar{u}+u'$; $\bar{u}=\frac{1}{\bar{\rho}N}\sum_1^N \rho u$, on N és el nombre de realitzacions durant un llarg període de mostreig.

Actualment, i a partir d'aquesta idea, les equacions RANS es basen en una operació de fer la mitjana temporal.

$$U_k=\widetilde{U_k}+u_k;\quad \widetilde{U_k}(t)=\frac{1}{T}\int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} U_k dt \tag{5}$$

Quan $T\to\infty$, es defineix una mitjana independent del temps. Com mostra la figura 3, en un cas general, el resultat de fer la mitjana depèn de l'elecció de T i, per tant, en aquest sentit hi ha ambigüitat. Només en fluxos estadísticament periòdics es pot fer una tria no ambigua de T. En tot cas, com veurem, l'aproximació pràctica en l'ús de la mitjana de Reynolds és la corresponent a $T\to\infty$.

25. O. Reynolds (1895), «On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion», *Philosophical Transactions of the Royal Society*, sèrie A, 186, p. 123-164.

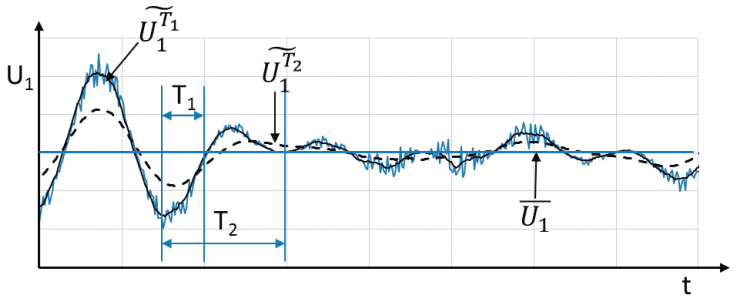


FIGURA 3. Mitjana de Reynolds d'un senyal turbulent.
FONT: Elaboració pròpia.

De la mateixa manera que es defineix un camp mitjà de velocitat, es fa amb totes les variables d'interès en el flux: $\overline{U}, \overline{P}, \overline{\rho}, \overline{T}, \overline{C_A} \ldots$

L'aplicació a l'equació (1) de la descomposició de Reynolds, $U_k = \widetilde{U_k} + u_k$; $P = \tilde{P} + p$ dona lloc a

$$\frac{\partial \rho\left(\widetilde{U_k} + u_k\right)}{\partial t} + \frac{\partial \rho\left(U_k + u_k\right)\left(\widetilde{U_m} + u_m\right)}{\partial x_m} = -\frac{\partial\left(\tilde{P} + p\right)}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_m}\mu\left(\frac{\partial\left(\widetilde{U_k} + u_k\right)}{\partial x_m} + \frac{\partial\left(\widetilde{U_m} + u_m\right)}{\partial x_k}\right) + \rho g_k \quad (6)$$

I fer la mitjana d'aquesta equació, tenint en compte que $\widetilde{u_k} = 0, \tilde{p} = 0, \widetilde{\widetilde{U_k}} = \widetilde{U_k}$, $\widetilde{\tilde{P}} = \tilde{P}$, porta a

$$\frac{\partial \rho \widetilde{U_k}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \widetilde{U_k}\widetilde{U_m}}{\partial x_m} = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_m}\mu\left(\frac{\partial \widetilde{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial \widetilde{U_m}}{\partial x_k}\right) + \rho g_k \boxed{\begin{array}{l} -\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\rho \widetilde{\widetilde{U_k}\widetilde{U_m}} - \rho \widetilde{U_k}\widetilde{U_m}\right) \\ -\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\rho \widetilde{\widetilde{U_k} u_m} + \rho \widetilde{\widetilde{U_k} u_m}\right) \\ -\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\rho \widetilde{u_k u_m}\right) \end{array}} \quad (7)$$

Els tres termes emmarcats a l'equació (7) representen el *problema de tancament de la turbulència*. L'equació (7), que és exacta, no implica cap aproximació addicional a les NS, però sí que conté noves magnituds, diferents correlacions de tipus $\rho \widetilde{\widetilde{U_k}\widetilde{U_m}}, \rho \widetilde{\widetilde{U_k} u_m}, \rho \widetilde{u_k u_m}$ sobre les quals, *a priori*, no es té cap informació. Són noves variables per a cadascuna de les quals cal aportar informació directament o, d'una manera alternativa, una equació específica. Si es fa, es construeix un model de turbulència.

Encara que fos factible modelitzar $\rho \widetilde{\widetilde{U_k}\widetilde{U_m}}, \rho \widetilde{\widetilde{U_k} u_m}, \rho \widetilde{u_k u_m}$, la definició d'aques-

tes magnituds estaria a l'escala de temps T escollida per a fer la mitjana, i s'originaria, doncs, una ambigüitat substancial en el significat físic de $\widetilde{U_k}$. Això no vol dir que no es puguin emprar les equacions RANS per a fluxos no estacionaris. En tot cas, per tal d'introduir els models de dues equacions i, en particular, el k-ε, ens podem restringir als fluxos turbulents estadísticament estacionaris. Tanmateix, l'aproximació pràctica més comuna és afegir un terme d'evolució temporal a les equacions RANS estacionàries que es veuen a continuació, de manera que tot el desenvolupament és directament utilitzable també en fluxos no estacionaris, com una bona aproximació.

Així doncs, per a $T \to \infty$ (o un període de mitjana molt més llarg que l'escala de temps més gran del moviment turbulent), $\widetilde{U_k} = \overline{U_k}$, i, en aquest cas: $\rho\widetilde{U_k}\widetilde{U_m} - \rho\widetilde{U_k}\widetilde{U_m} = 0$ i $\rho\widetilde{U_k}u_m + \rho\widetilde{U_m}u_k = 0$, perquè $\widetilde{U_k}$ ja no depèn del temps, i l'equació (7) esdevé

$$\frac{\partial \rho \overline{U_k U_m}}{\partial x_m} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_m}\mu\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right) - \frac{\partial}{\partial x_m}\left(\rho \overline{u_k u_m}\right) + \rho g_k \tag{8}$$

Aquesta equació també és exacta, en les condicions ja esmentades. És a dir, conté tota la informació del camp mitjà turbulent. Ara bé, hi apareixen en principi nou noves variables $\rho\overline{u_k u_m}$, que formen el tensor de segon ordre d'*esforços de Reynolds*, o *tensor de Reynolds*. La modelització de la turbulència comença aquí, quan es diu alguna cosa sobre aquests elements del tensor de Reynolds i així es pot tancar el sistema d'equacions RANS.

3.4. *El tensor de Reynolds*

El tensor de Reynolds és, per definició, simètric:

$$\overline{u_k u_m} = \begin{pmatrix} \overline{u_1^2} & \overline{u_1 u_2} & \overline{u_1 u_3} \\ \overline{u_2 u_1} & \overline{u_2^2} & \overline{u_2 u_3} \\ \overline{u_3 u_1} & \overline{u_3 u_2} & \overline{u_3^2} \end{pmatrix} \tag{9}$$

I, de fet, només té sis components diferents.

Cal tenir en compte que, si un component de velocitat mitjana és zero a tot arreu —per exemple, $\overline{U_3} = 0$, de manera que el flux és estadísticament 2D a (x_1, x_2)—, els esforços tangencials de Reynolds associats amb x_3 són zero; és a dir, $\overline{u_1 u_3} = \overline{u_3 u_1} = \overline{u_2 u_3} = \overline{u_3 u_2} = 0$. No obstant això, i com a dada molt important, $\overline{u_3^2} \neq 0$.

Qualsevol camp de turbulència realista, fins i tot estadísticament 1D o 2D, ha de tenir aportació dels tres components fluctuants a l'energia cinètica turbulenta, k, que es defineix, per unitat de massa, com: $k = \frac{1}{2}\overline{u_m u_m} = \frac{1}{2}\left(\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}\right)$. Aquesta k és, precisament, la nostra k del model k-ε que veurem més endavant.

En general, doncs, el sistema d'equacions RANS, junt amb l'equació de continuïtat per al camp mitjà $\frac{\partial \rho \overline{U_m}}{\partial x_m} = 0$, constitueix un conjunt de quatre equacions amb deu incògnites, i la feina de modelització que resta consisteix a aportar la informació necessària per a tancar el sistema.

3.5. *Energia cinètica turbulenta i escales de la turbulència*

L'energia cinètica turbulenta, $k = \frac{1}{2}\overline{u_m u_m} = \frac{1}{2}\left(\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}\right)$, és la variable bàsica en modelització de la turbulència a partir d'equacions de transport i $\sqrt{k}$ representa l'escala de velocitat turbulenta, de mitjana. A k, hi contribueixen totes les escales de la turbulència, des dels remolins més grans fins als més petits. Si λ és la mida característica d'un remolí, per convenció s'associa a un *nombre d'ona* $\kappa = 2\pi/\lambda$; essencialment, la inversa de λ.

La distribució d'energia entre els remolins defineix el que es coneix com a *espectre de l'energia turbulenta* $E(\kappa)$. La densitat d'energia del camp de remolins, $E(\kappa)$, es defineix com l'energia cinètica turbulenta continguda en qualsevol increment de la mida del remolí, dividida per aquest increment; és a dir,

$$k = \int_{\kappa_\Lambda}^{\kappa_\eta} E(\kappa) d\kappa$$

on Λ representa els remolins més grans i η, els més petits del camp. És significatiu que en un flux turbulent ben desenvolupat, amb un Re prou gran, $E(\kappa)$ tendeix a mostrar un comportament gairebé universal, com el que il·lustra la figura 4.

Com es pot veure a la figura 4, a l'espectre d'energia s'identifiquen tres grups:

— Grup A. Són remolins grans, amb una escala de longitud representativa Λ, que extreuen energia del camp mitjà i alimenten tota la cascada energètica.

— Grup B. És l'espai central de l'espectre, amb les escales anomenades *inercials*, al llarg de les quals es transmet l'energia turbulenta.

— Grup C. Són els remolins més petits que existeixen en el flux, tan petits com calgui perquè la viscositat els pugui dissipar (com més gran és el nombre de Reynolds més petits són aquests remolins per a un mateix flux). Són les escales dissipatives, η, o escales de Kolmogorov.

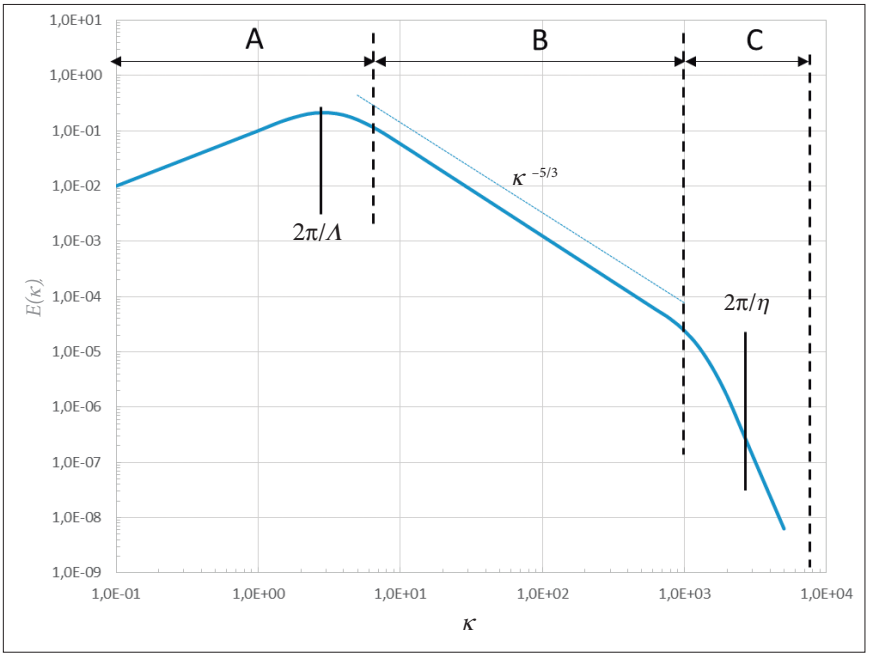


Figura 4. Esquema de l'espectre típic de l'energia turbulenta, $E(\kappa)$.
Font: Elaboració pròpia.

En el grup inercial, B, els remolins grans es fragmenten en remolins més petits mitjançant dos mecanismes fonamentals en la creació i el manteniment de la turbulència: l'estirament i la inclinació dels vòrtexs, en un procés en cascada que defineix la transferència d'energia entre escales del flux. Aquest fenomen, i aquesta zona inercial, tenen caràcter universal, com va establir Kolmogorov,[26] amb un pendent que sempre és −5/3. En tot aquest procés, excepte a les escales més petites, la viscositat pràcticament no té cap paper durant la cascada. La quantitat d'energia transferida, finalment, és igual a l'energia dissipada a les escales més petites, ε. Efectivament, aquesta magnitud, ε, és la segona variable del model k-ε. Aquesta figura representa, en forma d'espectre, el que Richardson va expressar en el seu poema!

La major part dels fluxos naturals o industrials d'interès físic o d'enginyeria són fluxos no homogenis i deformats per cisalla. La turbulència de malla, o isòtropa, és gairebé un flux idealitzat, que té una gran importància, si bé bàsicament

26. A. N. Kolmogorov (1941), «The local structure of turbulence in incompressible viscous fluids for very large Reynolds numbers», *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 30 (4), p. 301-305.

teòrica. Tanmateix, fins i tot la turbulència altament anisòtropa tendeix a isotropia per mitjà de la cascada d'energia. Els grans remolins es deformen com a resposta a la cisalla i s'alineen d'una manera que reflecteix el moviment de cisalla. Els petits remolins en gran part romanen no afectats per la tensió (base de la teoria de Kolmogorov). Així, els models de turbulència han de captar els efectes de les diferents escales, que es comporten d'una manera molt diferent (aspecte substancial en les RANS i la LES).

La interacció entre els *gradients de velocitat* i la *vorticitat* és un element essencial per a crear i mantenir la turbulència. Les pertorbacions s'amplifiquen per la interacció entre el vector vorticitat i els gradients de velocitat; així, les pertorbacions es converteixen en fluctuacions caòtiques, tridimensionals (és a dir, en turbulència). Com s'ha dit més amunt, es poden identificar dos fenòmens idealitzats en aquest procés d'interacció: l'*estirament* i la *inclinació* dels remolins. La vorticitat és el rotacional de la velocitat, i, si apliquem l'operador rotacional a les equacions de Navier-Stokes, s'obté l'equació de transport de la vorticitat:

$$\omega_i = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial v_k}{\partial x_j}; \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial \omega_i}{\partial x_j} = \omega_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 \omega_i}{\partial x_j \partial x_j} \tag{10}$$

El terme $\omega_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ representa una font de vorticitat a partir de la interacció amb el gradient de velocitat, com s'ha dit abans. Si es desenvolupa aquest terme, es pot veure que

$$\text{equació } \omega_1\text{: } \boldsymbol{\omega_1 \frac{\partial v_1}{\partial x_1}} + \omega_2 \frac{\partial v_1}{\partial x_2} + \omega_3 \frac{\partial v_1}{\partial x_3}$$

$$\text{equació } \omega_2\text{: } \omega_1 \frac{\partial v_2}{\partial x_1} + \boldsymbol{\omega_2 \frac{\partial v_2}{\partial x_2}} + \omega_3 \frac{\partial v_2}{\partial x_3}$$

$$\text{equació } \omega_3\text{: } \omega_1 \frac{\partial v_3}{\partial x_1} + \omega_2 \frac{\partial v_3}{\partial x_2} + \boldsymbol{\omega_3 \frac{\partial v_3}{\partial x_3}}$$

Els termes situats a la diagonal representen una interacció que provoca estiraments dels remolins, com il·lustra la figura 5*a*; en canvi, els altres termes són responsables de la flexió dels remolins, els quals es dobleguen i canvien de direcció, com esquematitza la figura 5*b*.

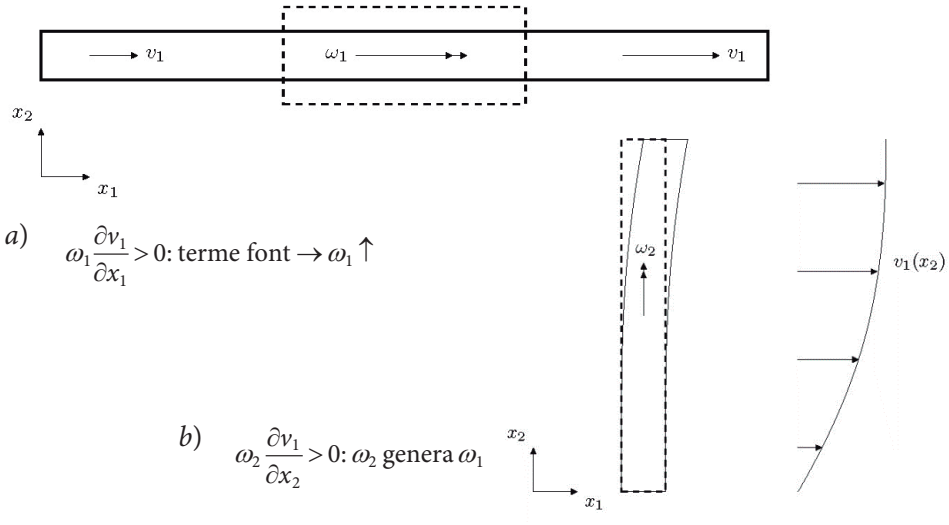


Figura 5. Esquema de la interacció entre la vorticitat i el gradient de velocitat. *a*) Estirament de remolins i *b*) flexió de remolins.
Font: Elaboració pròpia.

4. Models de dues equacions. El model k-ε

Els models de turbulència basats en les equacions RANS han de desenvolupar equacions o models per als tensors de Reynolds. Les possibilitats desenvolupades són moltes; la figura 6 en recull una classificació, en la qual no es pot entrar amb detall en l'abast d'aquest discurs. Breument, es pot dir que hi ha dues grans aproximacions: el *model de tensors de Reynolds* o *d'esforços de Reynolds* i els *models de viscositat turbulenta*, ja siguin lineals o no lineals.

El *model de tensors de Reynolds* o *d'esforços de Reynolds* (RSM, *Reynolds stress model*) consisteix a desenvolupar equacions de transport per a cadascun dels elements del tensor de Reynolds, és a dir, afegir sis equacions diferencials al sistema de quatre equacions inicial. Aquest model obliga a portar el tancament a les correlacions de tercer ordre, de tipus $\overline{u_k u_m u_n}$, que sorgeixen del desenvolupament de les equacions de transport per als $\overline{u_k u_m}$. Les grans exigències computacionals associades al sistema de deu equacions diferencials no lineals i acoblades, i els guanys relativament modestos en la generalització de l'aplicabilitat del model, han fet que aquesta línia avui en dia no tingui gaires adeptes. Té molt d'interès teòric, pel contrast de conceptes de factibilitat dels models que es puguin desenvolupar, però des del punt de vista pràctic els models més emprats corresponen, actualment, a la lí-

nia de simulació completa de les grans escales i la modelització dels efectes de submalla (LES-SGS) o, encara més emprats i estesos, els *models de viscositat turbulenta* —ja siguin lineals o no lineals—, que es plantegen a la figura 6. Pertanyen a aquest conjunt els models de dues equacions (addicionals), entre els quals hi ha el k-ε.

Amb l'aproximació de viscositat turbulenta, els esforços de Reynolds es relacionen amb variables determinables del camp mitjà, és a dir, conegudes:

$$\overline{u_k u_m} = f_{km} \left\{ \begin{array}{c} S_{km}, \Omega_{km}, S_{kl}S_{ml}, \Omega_{kl}\Omega_{ml} \\ \text{altres variables determinables} \end{array} \right\}$$

$$S_{km} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_k}{\partial x_m} + \frac{\partial U_m}{\partial x_k}\right); \; \Omega_{km} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_k}{\partial x_m} - \frac{\partial U_m}{\partial x_k}\right)$$

tensor de deformació tensor de rotació

La naturalesa de f_{km} pot ser algebraica o diferencial.

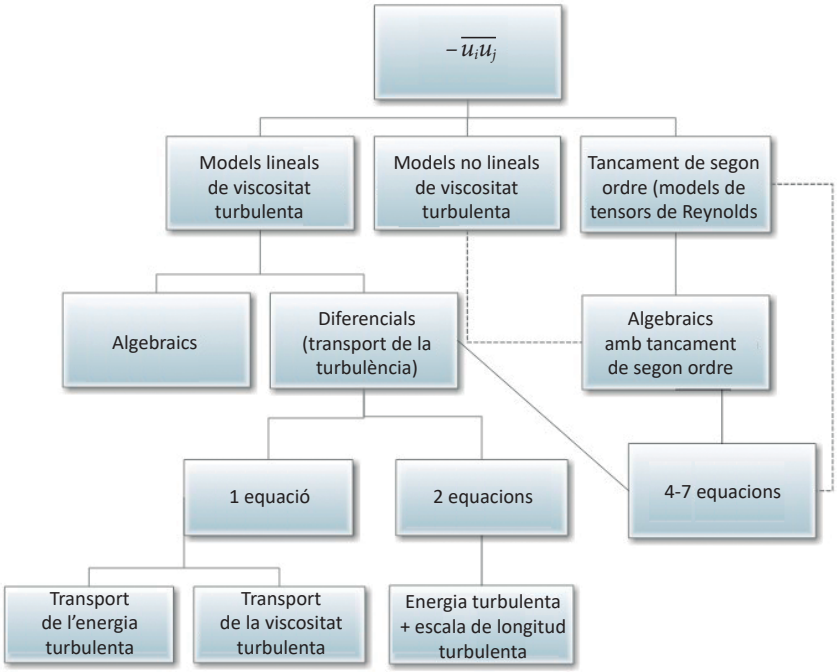


FIGURA 6. Esquema de models de turbulència per als esforços de Reynolds.
FONT: Elaboració pròpia.

4.1. *Models lineals de viscositat turbulenta*

A l'equació (8) apareixen els esforços de Reynolds i ho fan en un terme que es pot agrupar amb els esforços viscosos:

$$\frac{\partial}{\partial x_m}\mu\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right)-\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\rho\overline{u_k u_m}\right)=\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\mu\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right)-\rho\overline{u_k u_m}\right),$$

la qual cosa suggereix que hi ha una possible relació entre ells. Per a un flux tan simple com el paral·lel de cisalla, o flux pla en direcció 1 sotmès a gradient de velocitat en direcció 2 —com mostren els esquemes de la figura 7—, Boussinesq[27] el 1877 va postular que la transferència de quantitat de moviment causada pels remolins turbulents es pot modelar amb una viscositat de remolí, per analogia a com es pot descriure la transferència de moment causada pel moviment molecular mitjançant la viscositat molecular.

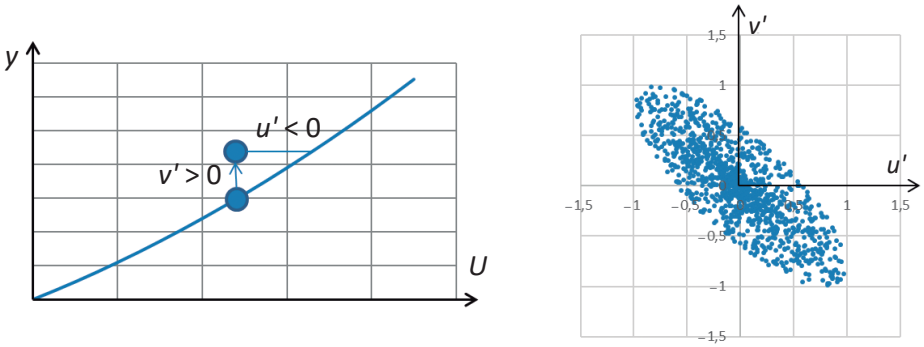


Figura 7. Esquemes de flux paral·lel de cisalla i de la distribució de probabilitats de fluctuacions en les direccions paral·lela i perpendicular al corrent.
Font: Elaboració pròpia.

En la turbulència isòtropa, u i v (i w) fluctuen independentment, de manera que $\overline{uv} = \overline{uw} = \overline{vw} = 0$, mentre que en un flux de cisalla, per a $dU/dy > 0$, $u'v' < 0$ tenen més probabilitats de produir-se que no pas $u'v' > 0$. Així doncs, de mitjana, $\overline{uv} < 0$. La hipòtesi de Boussinesq, expressada en termes d'esforços de Reynolds, és

$$-\overline{uv} \propto \frac{\partial U}{\partial y} \tag{11}$$

27. J. Boussinesq (1877), «Essai sur la théorie des eaux courantes», a *Mémoires présentés par divers savants à l'Académie des Sciences de l'Institut de France*, 23 (1), p. 1-680.

I la constant de proporcionalitat fa una funció anàloga a la viscositat cinemàtica molecular ν ; per això s'anomena *viscositat turbulenta*, ν_t. La generalització de la hipòtesi de Boussinesq a qualsevol flux s'expressa de la manera següent:

$$-\overline{u_k u_m} = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{km} \tag{12}$$

El darrer terme, $\frac{2}{3} k \delta_{km}$, assegura que, en un flux sense esforç, $\overline{u_k u_k} = \overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2} = 2k$

Els atractius principals d'aquest concepte són:

— Les equacions RANS es poden escriure

$$\frac{\partial \rho \overline{U_k U_m}}{\partial x_m} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_m} (\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k} \right) + \rho g_k \tag{13}$$

que explicita la representació de l'efecte de la turbulència com una viscositat afegida.

— Les equacions es poden resoldre com en el flux laminar (però la viscositat varia en l'espai).

— $\mu_t \equiv O(100-1000)\mu$, la qual cosa reflecteix la gran capacitat de mescla de la turbulència.

— El valor elevat de la viscositat turbulenta resulta útil per a l'estabilitat numèrica (nivell de difusió elevat i segones derivades dominants).

— Redueix la tasca de modelització a l'aproximació d'un paràmetre escalar: la viscositat turbulenta (també és causa de les seves principals limitacions).

Com mostra la figura 6, la determinació de la viscositat turbulenta es pot basar en aproximacions algebraiques (zero equacions diferencials addicionals) o diferencials, afegint una o dues equacions addicionals a les quatre que governen el flux mitjà. Sense entrar en més detalls, el concepte més emprat com a model de zero equacions és el de la *longitud de mescla* de Prandtl,[28] conceptualment anàloga al camí lliure mitjà en termodinàmica, de manera que una parcel·la de fluid conserva les seves propietats per a una longitud característica, ℓ, abans de barrejar-se amb el fluid circumdant.

Les aproximacions diferencials, d'una o dues equacions, busquen relacionar la viscositat de turbulència amb escales de velocitat i de longitud o de temps sobre les quals es pugui plantejar alguna mena de balanç o equació de conservació. L'opció més clara —i la base de tots aquests models— és l'escala de velocitat de la

28. L. Prandtl (1925), «Berichtüber Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz», *Z. Angew Mathematik und Mechanik*, 5 (1), p. 136-139.

turbulència $\sqrt{k}$, atès que k, l'energia cinètica turbulenta, sí que és una variable sobre la qual en principi es pot obtenir una equació de transport exacta.

De l'anàlisi dimensional, s'obté que ν_t = escala de velocitat · escala de longitud = $\sqrt{k} \cdot \ell$. D'una manera essencial, els models d'una equació es basen en una equació diferencial de transport per a k i en algun model algebraic per a ℓ. Els models de dues equacions busquen relacionar aquesta ℓ amb alguna altra variable de transport. La base del nostre model k-ε consisteix a identificar

$$\ell = \sqrt{k} \cdot \text{escala de temps} = \sqrt{k} \frac{\text{energia dels remolins}}{\text{velocitat de dissipació d'energia dels remolins}}.$$

Així,

$$\ell \propto k^{1/2} t = k^{1/2} \left(\frac{k}{\varepsilon} \right) \text{ i } \nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{14}$$

4.2. *Equació de transport de* k

L'equació de transport de l'energia cinètica turbulenta, k, es pot obtenir d'una manera exacta a partir de l'operació $\frac{1}{2}\overline{(\text{NS} - \text{RANS})_i \cdot u_i}$; és a dir, aplicant l'operació de fer la mitjana a la diferència entre les equacions de Navier-Stokes i de RANS (equació per a la fluctuació u_i), multiplicada per 1/2 u_i. El resultat és:

$$\underbrace{\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{U_m} \frac{\partial k}{\partial x_m}}_{C_k \text{ Convecció}} = \underbrace{-\overline{u_k u_m} \frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}}_{P_k \text{ Producció}} \underbrace{- \frac{\partial}{\partial x_m} \left(\frac{\overline{p u_m}}{\rho} + \frac{1}{2} \overline{u_m u_k u_k} \right)}_{T_k \text{ Transport turbulent}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_m} \left(\nu \frac{\partial k}{\partial x_m} \right)}_{D_k \text{ Difusió viscosa}} \underbrace{- \nu \overline{\frac{\partial u_k}{\partial x_m} \frac{\partial u_k}{\partial x_m}}}_{\varepsilon \text{ Dissipació}} \tag{15}$$

Tots els termes tenen unitats de potència per unitat de massa, amb l'aproximació de densitat constant ρ, de manera que multiplicant l'equació per ρ passa a tenir dimensions d'energia per unitat de temps i volum. Vegem el significat de cadascun dels símbols.

— C_k, el terme no estacionari més el de convecció, és la derivada substantiva de k, i dona la velocitat de canvi de k seguint una partícula de fluid.

— P_k és el terme de producció, i representa la velocitat a la qual es transfereix l'energia cinètica del flux mitjà a la turbulència; reescrit com $\tau_{km} S_{km}$, aquest terme és la velocitat a la qual es fa el treball per la deformació mitjana contra les tensions turbulentes.

— ε, o dissipació de k. És l'únic terme que actua inequívocament com a pou, oposat a la generació (sempre és negatiu). És proporcional a la viscositat molecu-

lar i al quadrat dels gradients de les fluctuacions de la velocitat (més acusats en la gamma de remolins a una escala petita —de Kolmogorov) i representa el procés dissipatiu; és a dir, la velocitat a la qual k es converteix en energia tèrmica interna.

— D_k és la difusió viscosa o molecular. La viscositat molecular, per petita que sigui, actua sempre i a totes les escales, transportant energia i quantitat de moviment per difusió.

— T_k és el transport turbulent. De fet, alguns autors distingeixen entre $\frac{1}{2}\overline{u_m u_k u_k}$ (transport turbulent; és a dir, velocitat a la qual es transporta k a través del fluid per fluctuacions turbulentes de velocitat) i $\frac{\overline{p u_m}}{\rho}$ (difusió de pressió; és a dir, una altra forma de transport turbulent, resultat de les fluctuacions de pressió).

La suma $T_k + D_k$ representa el transport efectiu de k a través del fluid i la redistribució d'energia entre les diferents escales del flux.

L'equació és general i exacta (no conté en aquest punt cap aproximació addicional a les RANS) i esdevé aplicable a qualsevol flux. Per a casos particulars, es poden fer un seguit de consideracions:

a) En absència de deformació o forçament (decaïment de la turbulència), $C_k \approx -\varepsilon$.

b) Prop de plans o eixos de simetria d'un jet o d'un deixant, $C_k \approx -\varepsilon - T_k$, amb transport turbulent efectiu predominantment normal al flux, cap al centre.

c) En condicions d'un esforç gran (el que es coneix com a *distorsió ràpida*), $C_k \approx P_k$.

d) En fluxos de cisalla que evolucionen d'una manera lenta, especialment en una capa límit propera a la paret, però per sobre de la subcapa viscosa, $P_k \approx -\varepsilon$. El que s'anomena *equilibri local d'energia turbulenta*.

e) En el flux de conductes o canonades completament desenvolupats, la regió de la línia central o del pla central està lliure d'esforç de tall i no hi ha convecció: $D_k \approx -\varepsilon$.

4.3. *Modelització de l'equació de* k

Com es pot veure a l'equació (15) —de transport de k—, hi ha també les variables desconegudes $\overline{u_i u_j}$, els tensors de Reynolds i les correlacions triples $\overline{u_j u_i u_i}$, que han de ser modelitzades. Els tensors de Reynolds que apareixen en els termes de producció es modelitzen amb (12); el terme amb més dificultats és el de transport turbulent, que també es modelitza segons un model de tipus gradient, sota la hipòtesi que el transport d'energia turbulenta és proporcional al seu gradient, amb la introducció d'una constant per ajustar, σ_k, que fa les feines d'un nombre de Prandtl turbulent:

$$-\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\frac{\overline{pu_m}}{\rho}+\frac{1}{2}\overline{u_m u_k u_k}\right)=\frac{\partial}{\partial x_m}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_m}\right) \tag{16}$$

Finalment, obtenim

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\overline{U_m}\frac{\partial k}{\partial x_m}=\nu_t\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right)\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial}{\partial x_m}\left[\left(\nu+\frac{\nu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_m}\right]-\varepsilon \tag{17}$$

4.4. *Models de dues equacions*

Establerta l'equació (17) per a k, resta un problema en el darrer terme, ε. El model k-ε consisteix, naturalment, a obtenir una equació diferencial per a ε. En qualsevol cas, no és l'única opció possible. Si recordem que

$$\nu_t \sim \frac{k^2}{\varepsilon};\ \ell \sim \frac{k^{3/2}}{\varepsilon},$$

les alternatives més emprades a una equació de transport de ε són una equació de transport directament per a ℓ —d'interpretació física difícil— o d'una variable substituta, entre les quals destaquen:

— El transport de la *velocitat de dissipació específica*, ω (essencialment, ε/k). Ha estat molt impulsada, per exemple, per Wilcox.[29] Amb dimensions de (temps)$^{-1}$, es coneix també com a *freqüència característica*.

$$\nu_t \sim \frac{k}{\omega};\ \ell \sim \frac{k^{1/2}}{\omega};\ \varepsilon \sim \omega k$$

— El transport del *temps de dissipació turbulenta*, τ (l'invers de ω). Ha estat proposada, per exemple, per Speziale, Anderson i Abid:[30]

$$\nu_t \sim k\tau;\ \ell \sim k^{1/2}\tau;\ \varepsilon \sim \frac{k}{\tau}$$

29. D. C. Wilcox (2010), *Turbulence modeling for CFD*, 3a ed., La Cañada, CA, DCW Industries Inc.

30. C. G. Speziale, E. C. Anderson i R. Abid (1990), «A critical evaluation of two-equation models for near wall turbulence», *AIAA: 21st Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference,* (Seattle, WA, 18-20 juny).

Independentment de l'elecció, hi ha un tema recurrent: la dissipació, la viscositat turbulenta i la longitud o el temps característics es relacionen a partir d'arguments dimensionals. La major part de la incertesa sobre els models de dues equacions es troba a la segona equació de transport.

4.5. *Equació per a la dissipació d'energia cinètica turbulenta, ε. El model* k-ε

El model *k-ε* és el model de turbulència completa més utilitzat i s'incorpora a tots els codis CFD comercials. Els conceptes i els detalls d'aquest model han anat evolucionant amb el temps; així, Jones i Launder[31] van desenvolupar per primera vegada el model *k-ε* «estàndard» i, posteriorment, Launder i Sharma[32] en van millorar les constants.

El model està format per:

— L'equació de transport de *k*, amb *ε* com a terme de dissipació.

— L'equació de transport de *ε*.

— L'especificació de la viscositat turbulenta com $\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$, on $C_\mu = 0{,}09$ és una de les cinc constants del model clàssic.

Es pot derivar una equació exacta per a *ε*, però és impracticable (Pope).[33] En lloc d'una equació exacta, la de transport de *ε* es considera totalment empírica i construïda a imatge de la de *k*. Així, finalment, els camps de velocitat i pressió en un flux turbulent estan governats, d'acord amb el model *k-ε*, pel següent conjunt de sis equacions diferencials i una d'algebraica:

equació de continuïtat, $$\frac{\partial U_m}{\partial x_m} = 0 \rightarrow \frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_m} = 0 \tag{4}$$

equacions RANS, $$\frac{\partial \rho \overline{U_k U_m}}{\partial x_m} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_m}\left(\mu + \mu_t\right)\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right) + \rho g_k \tag{13}$$

definició de *viscositat turbulenta*, $$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\nu = \mu/\rho) \tag{14}$$

equació de *k*, $$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{U_m}\frac{\partial k}{\partial x_m} = \nu_t\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right)\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m} + \frac{\partial}{\partial x_m}\left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_m}\right] - \varepsilon \tag{17}$$

31. W. P. Jones i B. E. Launder (1972), «The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15 (2), p. 301-314.

32. B. E. Launder i B. I. Sharma (1974), «Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc», *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1 (2), p. 131-137.

33. S. B. Pope (2000), *Turbulent flows*, Cambridge, Cambridge University Press.

equació de ε,

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\overline{U_m}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m}=\nu_t C_{\varepsilon 1}\frac{\varepsilon}{k}\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right)\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial}{\partial x_m}\left[\left(\nu+\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m}\right]-C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k} \tag{18}$$

En el model estàndard, hi intervenen cinc constants, ajustades a partir de fluxos característics als valors de: $C_\mu = 0{,}09$, $C_{\varepsilon 1} = 1{,}44$, $C_{\varepsilon 2} = 1{,}92$, $\sigma_k = 1{,}0$ i $\sigma_\varepsilon = 1{,}3$.

Per als fluxos delimitats per parets, el model s'ha de modificar per a tenir en compte el decaïment de la turbulència prop dels límits sòlids. En general, el model k-ε prop de la paret utilitza funcions addicionals d'esmorteïment f_μ, f_1 i f_2 per a la viscositat turbulenta i els termes de producció i dissipació de ε:

$$\nu_t = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{19}$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\overline{U_m}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m}=\nu_t C_{\varepsilon 1} f_1\frac{\varepsilon}{k}\left(\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial \overline{U_m}}{\partial x_k}\right)\frac{\partial \overline{U_k}}{\partial x_m}+\frac{\partial}{\partial x_m}\left[\left(\nu+\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m}\right]-C_{\varepsilon 2} f_2\frac{\varepsilon^2}{k} \tag{20}$$

La correcció per a una millor predicció del decaïment de la turbulència prop de les parets constitueix una de les limitacions del model, que té una tendència natural a sobreestimar el nivell de viscositat turbulenta prop de les parets. La qüestió esdevé més crítica quan el model s'utilitza per a la predicció no tan sols del camp de velocitat, sinó també del de temperatura (o concentració); en aquests casos pot succeir que la capa límit tèrmica (o màssica) sigui apreciablement menor que la de quantitat de moviment. Això passa quan el nombre adimensional de Prandtl (o Schmidt, per a la matèria) és elevat i el fluid transporta molt més eficientment quantitat de moviment que calor (o matèria). Aquestes consideracions són les que va haver d'afrontar el primer treball sobre modelització de la turbulència fet a la primera tesi doctoral sobre la CFD desenvolupada a Tarragona i que va donar lloc al treball d'Herrero *et al.*[34]

En aquest treball es mostra l'aplicabilitat del model k-ε prop de la paret per a fluxos a nombres de Prandtl elevats, amb el conjunt d'equacions d'esmorteïment següent:

$$f_\mu = \left[1-\exp\left(-0{,}0066R_k\right)\right]^2\left[1+500\exp(-0{,}0055R_k/R_t\right]$$

34. J. Herrero, F. X. Grau, J. Grifoll i F. Giralt (1991), «A near wall k-ε formulation for high Prandtl heat transfer», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34 (3), p. 711-721.

$$f_1 = 1 + \left(0{,}05 \big/ f_\mu \right)^2$$

$$f_2 = 1 - \frac{0{,}3}{D} \exp\left(-R_t^2\right)$$

$$D = 1 - 0{,}7 \exp\left(-R_k\right)$$

on $R_t = u^* \cdot D/\nu$ i $R_k = k^{1/2} \cdot D/\nu$ són diferents definicions del nombre de Reynolds turbulent.

Finalment, s'ha mostrat el model k-ε estàndard amb, en tot cas, les modificacions necessàries per a la descripció del flux prop de les parets. En les innumerables aplicacions actuals, moltes de l'àmbit industrial i en tota classe de fluxos, el model més comunament emprat és encara el k-ε, de manera que es troba a la base de tots els models de turbulència disponibles en les diverses aplicacions comercials de la CFD. Potser el k-ω és l'únic que està rebent una atenció comparable, o el model més simple d'una equació (k) i la prescripció d'alguna equació algebraica per a la longitud de mescla. Tanmateix, a més de la forma estàndard k-ε que hem mostrat, s'han desenvolupat altres variants, entre les quals destaquen:

— El *model k-ε realitzable*,[35] cada cop més popular a la comunitat CFD a causa del seu rendiment millorat respecte al model k-ε estàndard quan s'aplica a fluxos que impliquen capes límit amb forts gradients de pressió adversos, curvatura del corrent, separació del flux i zones de recirculació. És un model de turbulència amb un nombre de Reynolds elevat de dues equacions que difereix del model k-ε estàndard en dos aspectes. En primer lloc, el model utilitza una formulació diferent de l'equació de transport per a la dissipació que es deriva de l'equació de transport per a les fluctuacions de vorticitat quadrada mitjana. En segon lloc, el model fa servir una formulació de viscositat de remolí diferent que es basa en diverses limitacions de «realitzabilitat» per a les tensions turbulentes de Reynolds. A la pràctica, això vol dir que el coeficient de viscositat turbulenta C_μ és una funció dels paràmetres de flux local, més que una constant, com en el model estàndard k-ε.

— El *model k-ε RNG*, que va ser desenvolupat mitjançant mètodes de *Renormalisation group* (RNG) per Yakhot *et al.*[36] per a normalitzar les equacions de Navier-Stokes, a fi de tenir en compte els efectes d'escales de moviment més peti-

35. T. H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang i J. Zhu (1995), «A new k-ε eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows - Model development and validation», *Computers & Fluids*, 24 (3), p. 227-238.

36. V. Yakhot, S. A. Orszag, S. Thangam, T. B. Gatski i C. G. Speziale (1992), «Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique», *Physics of Fluids A*, 4 (7), p. 1510-1520.

tes. En el model estàndard k-ε, la viscositat turbulenta es determina a partir d'una única escala de longitud de turbulència, de manera que la difusió turbulenta calculada és la que es produeix només a l'escala especificada, mentre que en realitat totes les escales de moviment contribuiran a la difusió turbulenta. L'enfocament RNG dona com a resultat una forma modificada de l'equació ε que intenta tenir en compte les diferents escales de moviment mitjançant canvis en el terme de producció.

5. Consideracions finals

El camí seguit ens ha portat des de la discussió sobre el concepte *turbulència* fins a l'explicitació del model complet k-ε com el més característic entre tots els que s'utilitzen per a modelitzar la turbulència en fluxos reals i representatiu del que s'anomenen *models de dues equacions*. A manera de recopilació de consideracions finals, es pot dir que:

— Els models lineals de viscositat de remolí de dues equacions representen el nivell de tancament més baix que es pot afirmar que és aplicable als fluxos generals de dues i tres dimensions; és a dir, els més complexos que els simples fluxos de cisalla.

— Són models de turbulència complets, de manera que no requereixen cap prescripció, per referència a cap quantitat de flux global, ni de l'escala de velocitat ni de l'escala de longitud que són presents en la viscositat turbulenta.

— Si bé l'escala de velocitat es representa invariablement per k, en diferents models proposats a la literatura hi ha una sèrie de variables substitutives alternatives per a les escales de longitud. Entre aquestes variables alternatives, les més destacades són la velocitat de dissipació ε i la seva forma específica, $\omega = \varepsilon/k$.

— Tot i que diferents models mostren propietats predictives distintes, les diferències pràctiques són relativament modestes.

— S'ha demostrat que la representació fidel de les propietats de turbulència properes a la paret és una tasca especialment difícil, la qual cosa porta a la necessitat d'ajustar models k-ε prop de la paret. En aquest sentit, s'observa que el model k-ω és més robust, de manera que mostra un comportament acceptable a prop de la paret sense tants termes de correcció.

— Malgrat els avantatges de la completesa, hi ha unes limitacions òbvies:

a) L'ús d'una magnitud escalar, ν_t, per a representar la influència de la turbulència a tot el camp.

b) La hipòtesi de Boussinesq, una relació lineal entre les tensions turbulentes i la deformació.

— El model RANS pot continuar sent el principal enfocament a la indústria al llarg dels propers cinc a deu anys. L'adveniment de nous ordinadors que superin

d'una manera significativa les prestacions dels actuals pot fer inclinar la balança definitivament cap a models LES, avui molt utilitzats en els estudis teòrics, però encara lluny de poder ser àmpliament emprats a la indústria.

— És un àmbit complex, amb molts models i variacions. Les petites variacions solen tenir conseqüències predictives importants (la turbulència segueix sent esquiva!).

— Els models depenen molt del calibratge i no funcionen gaire més enllà del seu abast.

— Cal reconèixer i respectar les limitacions principals de RANS. Els models RANS estan pensats per a unes condicions estadísticament estacionàries (o gairebé estacionàries), si bé actualment s'utilitzen com a aproximació en fluxos mitjans no estacionaris.

— Els models RANS són, bàsicament, adequats per a fluxos relativament simples (fluxos paral·lels de cisalla, recirculació feble, efectes en 3D modestos).

— Els models lineals de viscositat turbulenta ofereixen una representació molt simplificada dels estadístics de la turbulència. Tenen limitacions intrínseques a l'hora de:

a) Representar l'anisotropia.

b) Tenir en compte la rotació, la curvatura i les forces de volum d'una manera correcta.

c) Donar la resposta correcta a l'esforç normal (tota l'afinació està feta per a fluxos de cisalla; no funcionen tan bé en expansions).

d) Representar les condicions viscoses properes a la paret, llevat que es complementin amb correccions *ad hoc*.

La turbulència continua sent l'únic problema de la mecànica clàssica no resolt del tot. La força bruta de la simulació directa del model matemàtic complet (equacions de Navier-Stokes i continuïtat per als camps instantanis) està lluny de poder ser aplicable a les escales de flux on es donen tots els problemes pràctics, ja siguin d'equipaments industrials o en fluxos naturals. Per bé que els avenços en aquest camp han estat significatius, les limitacions computacionals són encara enormes; així, per exemple, amb milers de milions de punts de càlcul es pot cobrir només el càlcul complet d'una milionèsima part del flux real al voltant d'un avió. Segur que les LES i la DNS aniran avançant amb el progrés de les capacitats computacionals, però cal alguna mena de revolució en aquest àmbit per a poder veure canvis significatius en el futur proper, i la revolució pot venir amb l'adveniment dels ordinadors quàntics.

Des del punt de vista de la modelització pròpiament dita, els nous àmbits d'exploració provenen dels camps de la intel·ligència artificial (IA) i l'aprenentatge automàtic (ML, *machine learning*). Així, en el món dels escacs, les noves màquines basades en IA i ML representen una revolució. És conegut l'enfrontament

a mil partides que va tenir lloc el 2019 entre Stockfish, la millor màquina d'anàlisi per força bruta —anàlisi de totes les variants— i Alpha Zero, la màquina d'autoaprenentatge a partir de les regles bàsiques, sense cap biblioteca d'obertures o finals (Alpha Zero es va imposar a Stockfish d'una manera molt clara: 155 partides guanyades, 6 de perdudes i 839 taules). De la mateixa manera, l'ML i la IA podrien revolucionar la modelització de la turbulència, tal com apunten els treballs de Duraisamy *et al.*,[37] Pandey i Schumacher[38] o Givi,[39] i contribuir a desenvolupar models adaptatius, complets —però més flexibles— i d'aplicació general.

37. K. Duraisamy, G. Iaccarino i H. Xiao (2019), «Turbulence modeling in the age of data», *Annual Review of Fluid Mechanics*, 51, p. 357-377.

38. S. Pandey i J. Schumacher (2020), «A perspective on machine learning in turbulent flows», *Journal of Turbulence*, 21 (9-10), p. 567-584.

39. P. Givi (2021), «Machine learning and quantum computing for reactive turbulence modeling and simulation», *Mechanics Research Communications*, 116, 103759.

INSTITVT D'ESTVDIS CATALANS
MCMVII

9 788499 656472