

Desenvolvimento e teste de esquemas “upwind” de alta resolução e suas aplicações em escoamentos incompressíveis com superfícies livres

Rafael A. B. de Queiroz

LNCC - Laboratório Nacional de Computação Científica

25651-075, Petrópolis, RJ

E-mail: bonfimraf@gmail.com

Valdemir G. Ferreira

ICMC-USP - Departamento de Matemática Aplicada e Estatística

13560-970, São Carlos, SP

E-mail: pygf@icmc.usp.br

Resumo: Neste trabalho são apresentados os resultados do desenvolvimento e teste de dois esquemas “upwind” de alta resolução para o controle da difusão numérica em leis de conservação gerais e problemas em dinâmica dos fluidos.

Palavras-chave: Esquemas “upwind” de alta resolução, Escoamentos com superfícies livres, Leis de conservação

1. Introdução

A grande maioria dos problemas de escoamento de fluidos encontrados em aplicações tecnológicas é caracterizada por possuir alto poder convectivo, especialmente aqueles no regime turbulento com superfícies livres móveis. Computar soluções numéricas representativas para essa classe de problemas, especialmente no caso dominado por convecção, é um assunto importante, desafiador e que exige o desenvolvimento de esquemas numéricos eficientes, robustos e precisos. Conseqüentemente, o tema tem sido uma das principais preocupações da comunidade científica moderna em Dinâmica dos Fluidos Computacional. No contexto do método das diferenças finitas e fazendo o uso de variáveis normalizadas e/ou limitadores de fluxo e dos critérios de limitação CBC (“Convection Boundedness Criterion”) [7] e/ou TVD (“Total Variation Diminishing”) [8], o objetivo do presente trabalho é apresentar o resultado do desenvolvimento e análise dos esquemas numéricos ALUS (“Adaptive Linear Upwind Scheme”) e TOPUS (“Third-Order Polynomial Upwind Scheme”) para aplicações na simulação numérica - direta ou por modelagem - de problemas de escoamentos de fluidos e leis de conservação gerais. Esses novos esquemas “upwind” foram desenvolvidos por Queiroz et al. [14, 16, 21] para controlar a difusão numérica em leis de conservação 1D/2D e escoamentos de fluidos transientes 2D/3D.

O restante do trabalho está organizado em três seções. Na seção 2 são apresentados os esquemas “upwind” de alta resolução ALUS e TOPUS. Os resultados numéricos obtidos com a simulação desses esquemas são mostrados na seção 3. Na seção 4 são delineados as conclusões e os próximos passos desta pesquisa.

2. Esquemas “Upwind” de Alta Resolução

Fundamentalmente, o esquema TOPUS pode ser visto como uma generalização do esquema SMARTER de Waterson e Deconinck [24], e sua idéia básica é usar uma combinação de esquemas

de baixa e alta ordem por meio de uma função troca (o limitador). Em particular, considera-se parte de um polinômio de quarto grau inteiramente contido na região CBC de Gaskell e Lau [7] e impõem-se as condições do diagrama de variáveis normalizadas propostas por Leonard [10], isto é, o esquema deve passar pelos pontos $O(0, 0)$, $Q(0.5, 0.75)$ (para atingir segunda ordem), $P(1, 1)$ e com inclinação 0.75 em Q (para alcançar terceira ordem) nesse diagrama (para mais detalhes, veja [10, 14]).

Vale salientar que no passado essa mesma idéia foi utilizada para a construção dos esquemas NOTABLE de Pascau e Perez [12], CHARM (“Cubic / Parabolic High-Accuracy Resolution Method”) de Zhou [26] e ISNAS (“Interpolation Scheme which is Nonoscillatory for Advected Scalars”) de Zijlema [25], e atualmente tais esquemas tem sido nomeados por Waterson e Decoinck [24] como SMARTER. Entretanto, a novidade no esquema TOPUS é a presença em sua formulação de um parâmetro livre permitindo uma generalização do esquema SMARTER.

A motivação para a construção do esquema TOPUS surgiu das deficiências do SMARTER, a saber: (i) não estar inteiramente contido na região TVD; (ii) violar o princípio de monotonicidade de Sweby [22]; (iii) não possuir em sua formulação um parâmetro livre; e (iv) fornecer resultados não satisfatórios para problemas de escoamentos incompressíveis 3D com superfícies livres móveis. Outra motivação para o desenvolvimento do TOPUS (e também do ALUS) está no fato de que as leis de conservação e equações da dinâmica dos fluidos aparecem com frequência em problemas de interesse prático.

Em resumo, o esquema TOPUS (veja detalhes do desenvolvimento em [14]) em variáveis normalizadas (NV) de Leonard [10] é definido por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} \alpha \hat{\phi}_U^4 + (-2\alpha + 1) \hat{\phi}_U^3 + \left(\frac{5\alpha-10}{4}\right) \hat{\phi}_U^2 + \left(\frac{-\alpha+10}{4}\right) \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1], \end{cases} \quad (1)$$

em que $\alpha \in [-2, 2]$ e $\hat{\phi}_0$ é uma variável genérica formulada em NV [4, 14]. Por exemplo, essa variável poderá ser uma das componentes da velocidade (u e v) do fluido. O limitador de fluxo [24] do TOPUS é expresso por

$$\psi(r_f) = \frac{0.5(|r_f| + r_f) \left[(-0.5\alpha + 1)r_f^2 + (\alpha + 4)r_f + (-0.5\alpha + 3) \right]}{(1 + |r_f|)^3}, \quad (2)$$

no qual r_f é definido por

$$r_f = \frac{\hat{\phi}_U}{1 - \hat{\phi}_U}. \quad (3)$$

Vale mencionar ao leitor que o interesse em desenvolver outro esquema TVD, que possua o número de Courant ($|\theta| \leq 1$) em sua formulação e seja matematicamente mais simples (sem perder em exatidão) que o esquema ADBQUICKEST de Ferreira et al. [4, 5, 6], motivou a derivação do esquema ALUS (veja detalhes da construção em [14]). No contexto NV [10] tal esquema é expresso por

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 2\hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \in [0, \lambda_a], \\ 0.5 \left[(1 + |\theta|)\hat{\phi}_U + (1 - |\theta|) \right], & \hat{\phi}_U \in (\lambda_a, 1], \\ \hat{\phi}_U, & \hat{\phi}_U \notin [0, 1]. \end{cases} \quad (4)$$

em que λ_a é a intersecção das retas $0.5 \left[(1 + |\theta|)\hat{\phi}_U + (1 - |\theta|) \right]$ e $2\hat{\phi}_U$, que é dada por

$$\lambda_a = \frac{1 - |\theta|}{3 - |\theta|}. \quad (5)$$

O correspondente limitador de fluxo do ALUS é

$$\psi(r_f) = \max \{0, \min [2r_f, 1 - |\theta|]\}. \quad (6)$$

3. Resultados Numéricos

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos obtidos para o problema do tubo de choque 1D e colapso de um bloco de fluido 3D. Outros resultados mostrando a aplicabilidade dos esquemas ALUS e TOPUS são fornecidos na dissertação de Queiroz [14] e trabalhos publicados por Queiroz et al. [13, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21]. Em particular, nesses trabalhos são apresentados resultados numéricos para as equações: advecção linear 1D, convecção-difusão 1D, águas rasas 1D, Euler 2D e Navier-Stokes 2D/3D.

3.1 Tubo de Choque 1D

O problema do tubo de choque é modelado pelo sistema hiperbólico formado pelas equações de Euler dado por

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

$$\mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}_0(x), \quad x \in [0, x_R], \quad (8)$$

$$\mathbf{U}(0, t) = \mathbf{U}_L(t), \quad \mathbf{U}(x_R, t) = \mathbf{U}_R(t), \quad (9)$$

em que

$$\begin{cases} \mathbf{U} = [\rho, \rho u, e]^T, \\ \mathbf{F} = [\rho u, \rho u^2 + p, u(e + p)]^T, \\ e = \frac{p}{(\gamma-1)} + \frac{1}{2}\rho u^2. \end{cases} \quad (10)$$

Em (9), $\mathbf{U}_L(t)$ e $\mathbf{U}_R(t)$ são, respectivamente, as condições de contorno em $x = 0$ e $x = x_R$ (ver detalhes na referência [23]). Em (10), as variáveis ρ , e e p são a densidade, a energia total e a pressão, respectivamente; e a constante $\gamma = 1.4$ (o gás é considerado ideal). Para resolver (7), a condição inicial proposta por Toro [23] é considerada, isto é

$$[\rho, u, p]^T = \begin{cases} [1, 0, 1000]^T, & x \in [0, 0.5), \\ [1, 0, 0.01]^T, & x \in [0.5, 1]. \end{cases} \quad (11)$$

Para a simulação, o tempo final de processamento $t = 0.012$ (instante do choque), o espaçamento temporal $\delta t = 0.6\delta x$, e duas malhas de $N = 200$ ($\delta x = 0.05$) e $N = 400$ ($\delta x = 0.0025$) células foram utilizados. A solução de referência para este problema foi obtida com a simulação do esquema FOU numa malha de 4000 células ($\delta x = 2.5 \times 10^{-4}$). A Figura 1 mostra as soluções de referência e as numéricas obtidas nas simulações dos esquemas ADBQUICKEST, ALUS, SMART [10] e TOPUS. Dessa figura, percebe-se que as soluções numéricas obtidas com o TOPUS são livres de difusão e oscilação. Também nota-se que essas soluções são bastante consistentes com a de referência.

3.2. Colapso de um Bloco de Fluido 3D

Este escoamento de um colapso de um bloco de fluido sob à ação da gravidade é modelado pelas equações de Navier-Stokes 3D. O objetivo aqui é validar o código “Freeflow-3D” de Castelo et al. [2] equipado com as novas estratégias “upwind” ALUS e TOPUS.

Para a simulação do problema, considera-se um bloco de fluido em repouso com dimensões $0.05m \times 0.1m \times 0.1m$ e aceleração da gravidade $g = 9.8m/s^2$. As escalas envolvidas no problema são $L = 0.05m$ e $U_0 = \sqrt{0.4905}m/s$, de maneira que o número de Reynolds é $Re = 9.91 \times 10^4$. Uma malha de $150 \times 50 \times 75$ ($\delta x = \delta y = \delta z = 0.002m$) células computacionais foi usada como domínio computacional.

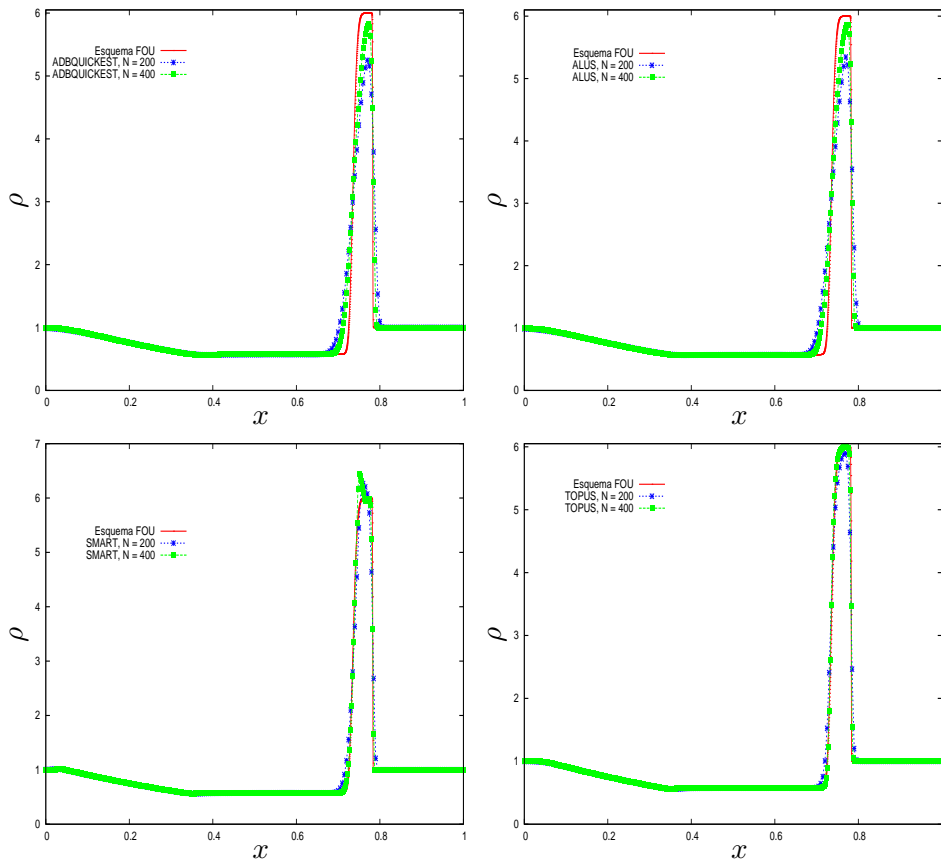


Figura 1: Soluções numéricas do tubo de choque obtidas com os esquemas ADBQUICKEST, ALUS, SMART[10] e TOPUS.

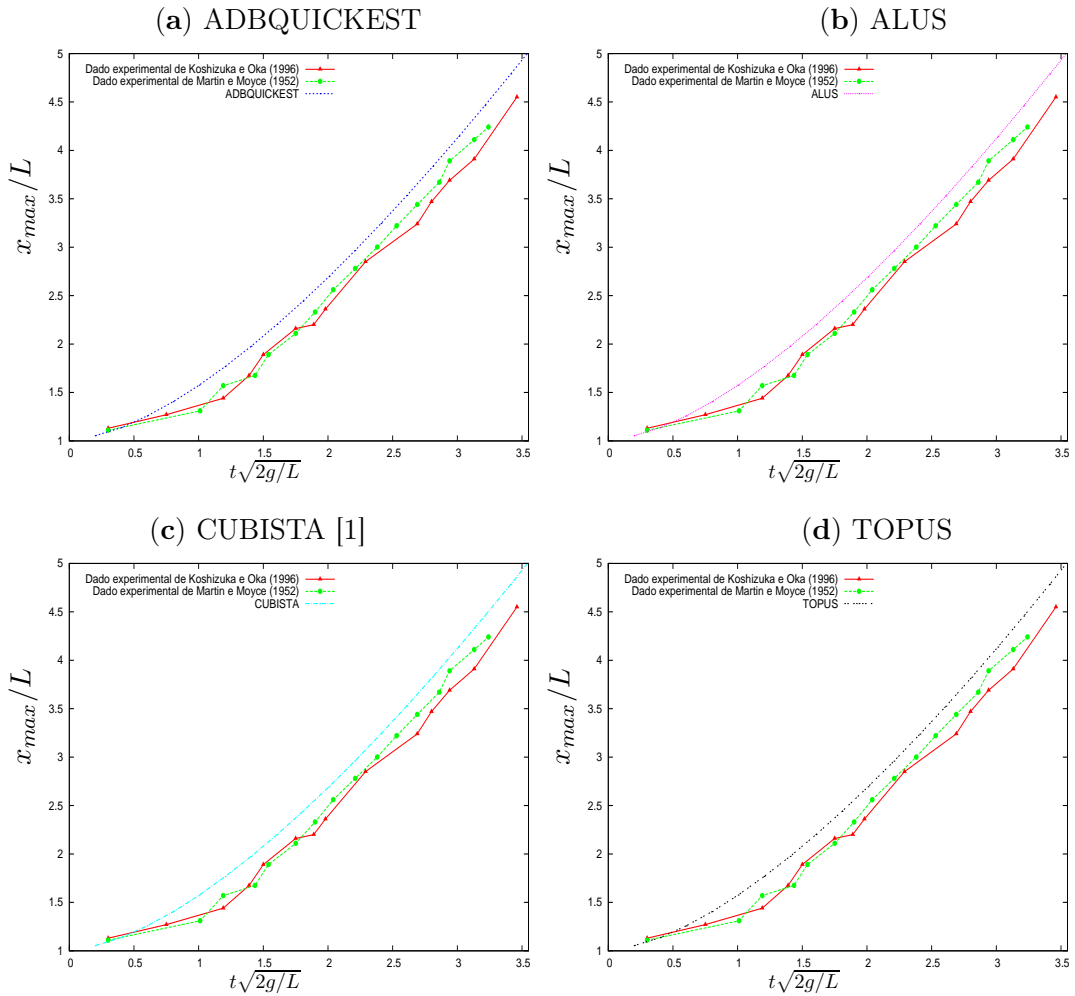


Figura 2: Comparação entre a frente principal x_{max} do fluido, em função do tempo, calculada pelas soluções numéricas e experimentais do colapso de um bloco de fluido 3D.

A Figura 2 mostra o confronto entre os dados numéricos obtidos com o ADBQUICKEST, ALUS, CUBISTA e TOPUS, e os dados experimentais de Koshizuka/Oka [9] e Martin/Moyce [11] para a frente do fluido (x_{max}) em função do tempo. As soluções numéricas são extraídas no plano de corte $y = 0.05m$. De maneira geral, observa-se nessa figura a boa concordância entre os dados numéricos e os dados experimentais.

4. Conclusões

Este trabalho apresenta resultados obtidos durante as simulações dos esquemas ALUS e TOPUS. O desempenho, a validação e a verificação desses novos esquemas foram analisados com respeito a vários testes numéricos na dissertação de Queiroz [14], a saber: advecção de escalares 1D; problemas de convecção-difusão 1D; problemas de Riemann para a equação de Euler, Burgers e águas rasas 1D; escoamentos transônicos/supersônicos 2D ao redor de aerofólios; e escoamentos 2D e 3D laminares e turbulentos com superfícies livres móveis numa ampla faixa do número de Reynolds. Em suma, os resultados demonstram que o esquema TOPUS é uma ferramenta efetiva e robusta para captura de choques e controle da difusão numérica. Em contrapartida, o esquema ALUS pode apresentar um comportamento difusivo em regiões de discontinuidades (choques). Esta pesquisa pode ser incrementada de várias maneiras. Os aspectos mais relevantes dos temas que serão considerados no futuro incluem:

- Os esquemas ALUS e TOPUS podem ser aplicados também numas variedades de problemas

de escoamentos incompressíveis com superfícies livres móveis. Como exemplos, pode-se citar os problemas envolvendo tensão superficial, transferência de calor, fenômenos de convecção e difusão que ocorrem nos fluidos não-newtonianos com efeitos de elasticidade e os problemas multifásicos (em particular gás - sólido);

– O problema fundamental da precisão dos esquemas aqui apresentados em escoamentos 3D realísticos é um assunto importante que precisa ser bem explorado. Para tanto, a simulação das diferentes estruturas poligonais do salto hidráulico circular de Ellegard e colaboradores (ver [3]) constitui um excelente exemplo de validação.

Agradecimentos

Agradecemos imensamente à FAPESP pelo suporte financeiro através do Proc. 06/05910-1.

Referências

- [1] M.A. Alves, P.J. Oliveira, and E.T. Pinho, A convergent and universally bounded interpolation for the treatment of advection, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 41 (2003) 47-75.
- [2] A. Castelo, M.F. Tomé, C.N.L. César, S. McKee, and J.A. Cuminato, Freeflow: An integrated simulation system for three-dimensional free surface flows, *Journal of Computing and Visualization in Science*, 2 (2000) 199-210.
- [3] C. Ellegaard, A.E. Hansen, A. Haaning, K. Hansen, A. Marcussen, and T. Bohr, Polygonal hydraulic jumps, *Nonlinearity*, 12 (1999) 1-7.
- [4] V.G. Ferreira, C.M. Oishi, M.K. Kaibara F.A. Kurokawa, J.A. Cuminato, A. Castelo, M.F. Tomé, and S. McKee, A combination of implicit and adaptive upwind tools for numerical solution of incompressible free surface flows, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 23 (2007) 419-445.
- [5] V.G. Ferreira, Contribuição para o desenvolvimento de esquemas upwind e suas aplicações em dinâmica dos fluidos, “Tese de livre docência”, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC-USP), 2008.
- [6] V.G. Ferreira, F.A. Kurokawa, R.A.B. Queiroz, M.K. Kaibara, C.M. Oishi, J.A. Cuminato, A. Castelo, M.F. Tomé, and S. McKee, Assessment of a high-order finite difference upwind scheme for the simulation of convection-diffusion problems, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, In Press.
- [7] P.H. Gaskell and A.K.C. Lau, Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness preserving transport algorithm, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8 (1988) 617-641.
- [8] A. Harten, High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, *Journal of Computational Physics*, 49 (1983) 357-393.
- [9] S. Koshizuka and Y. Oka, Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluids, *Nuclear Science and Engineering*, 123 (1996) 421-434.
- [10] B.P. Leonard, Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8 (1988) 1291-1318.
- [11] J. Martin and W. Moyce, An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plate, *Philosophical Transactions of Royal Society of London*, 244 (1952) 312-324.

- [12] A. Pascau and C. Perez, A well-behaved scheme to model strong convection in a general transport equation, “In Proceedings of the Eighth International Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow”, page 608, Swansea, July 1993. Pineridge Press.
- [13] R.A.B. Queiroz, V.G. Ferreira, and F.A. Kurokawa, Desenvolvimento e aplicação de esquemas upwind de terceira ordem para transporte convectivo, “In Anais do XXX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - XXX CNMAC”, 2007.
- [14] R.A.B. Queiroz, “Desenvolvimento e teste de esquemas “upwind” de alta resolução e suas aplicações em escoamentos incompressíveis com superfícies livres”, Dissertação de Mestrado, ICMC-USP, 2009.
- [15] R.A.B. Queiroz, R.G. Cuenca, V.G. Ferreira, and L.F. Souza, A new high resolution TVD scheme for unsteady flows with shock waves, “In Proceedings of the 7th Brazilian Conference On Dynamics, Control and Applications - DINCON”, 2008.
- [16] R.A.B. Queiroz, V.G. Ferreira, and R.G. Cuenca, A new high resolution TVD scheme for unsteady flows with shock waves, “Tendências em Matemática Aplicada e Computacional - TEMA”, Seleta do 7th DINCON, 9 (2008) 311-320.
- [17] R.A.B. Queiroz, F.A. Kurokawa, and V.G. Ferreira, A polynomial upwind scheme for convection discretization, “In Anais do XXXI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CNMAC”, 2008.
- [18] R.A.B. Queiroz, F.A. Kurokawa, V.G. Ferreira, and F.P. Martins, Development and implementation of polynomial scheme for the numerical solution of 1D conservation laws, “In Anais do VIII Simpósio Mecânica Computacional - SIMMEC”, 2008.
- [19] R.A.B. Queiroz, V.G. Ferreira, and F.P. Martins, A new upwind scheme for numerical solution of fluid dynamics problems, “In Anais do I Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional - ERMAC”, 2008.
- [20] R.A.B. Queiroz, F.A. Kurokawa, and V.G. Ferreira, Direct computation of incompressible turbulent free surface flow using a new high order upwind scheme, “In Anais da Escola de Primavera e Transição e Turbulência - EPTT”, 2008.
- [21] R.A.B. Queiroz, F.A. Kurokawa, and V.G. Ferreira, New high order upwind techniques for advective term discretizations, “In Proceedings of the 12th Brazilian Congress of thermal sciences and engineering - ENCIT”, 2008.
- [22] P.K. Sweby, High resolution scheme using flux limiters for hyperbolic conservation laws, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21 (1984) 995-1011.
- [23] E.F. Toro, “Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics”, Springer, a practical introduction edition, 1991.
- [24] N.P. Waterson and H. Deconinck, Design principles for bounded higher-order convection schemes - a unified approach, *Journal of Computational Physics*, 224 (2007) 182-207.
- [25] M. Zijlema, “Computational modeling of turbulent flow in general domains”, PhD Thesis, Delft University of Technology, The Netherlands, 1996.
- [26] G. Zhou, “Numerical simulations of physical discontinuities in single and multi-fluid flows for arbitrary Mach numbers”, PhD Thesis, Chalmers University of Technology, Sweden, 1995.