



ESQUEMAS POLINOMIAIS UPWIND E SUAS APLICAÇÕES EM ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS 3D TRANSIENTES

Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Departamento de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP
Av. Trabalhador São-carlense, 400 - Centro, São Carlos, SP
Caixa Postal: 668 – CEP: 13560-970
bonfim@icmc.usp.br

Valdemir Garcia Ferreira

pvgf@icmc.usp.br

Resumo: Neste artigo de pesquisa, dois esquemas polinomiais “upwind” para aproximar termos convectivos (advectivos) são propostos. A derivação desses esquemas é baseada nos critérios de limitação CBC e TVD. Os correspondentes limitadores de fluxo são também derivados. O desempenho dos esquemas é verificado em dois problemas unidimensionais - um linear (transporte advectivo de um escalar) e um não linear (tubo de choque). Os resultados computacionais obtidos com esses novos esquemas são comparados com soluções analíticas. A comparação mostra concordância bastante satisfatória entre os dados numéricos e analíticos. Como aplicação, são apresentadas simulações tridimensionais transientes de jatos livres sobre superfícies rígidas impermeáveis.

Palavras-chave: Esquemas convectivos, “upwind”, solução numérica, NVD, TVD.

1. INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de métodos numéricos para estimar termos convectivos (em geral não lineares) em EDP de caráter predominantemente convectivo tem sido assunto de intensas pesquisas nos últimos anos. No processo de solução numérica dessas equações, a precisão dos resultados é, significativamente, afetada pela escolha do esquema de convecção (“upwind”). Por exemplo, esquemas de primeira ordem, tais como FOU (“First Order Upwind”), são estáveis incondicionalmente, mas produzem um caráter difusivo que, em geral, suaviza a solução. Aproximações “upwind” clássicas de alta ordem, tais como QUICK, SOU (“Second Order Upwind”) e CENTRAL, são boas estratégias para melhorar a precisão do método numérico, porém, estas introduzem oscilações não físicas que comprometem a convergência.

Dentro deste cenário, este trabalho apresenta dois esquemas polinomiais tipo “upwind” de, no máximo, terceira ordem para estimar termos convectivos (em geral não lineares). O propósito maior é simular escoamentos transientes 3D com superfícies livres em qualquer regime do número de Reynolds. No contexto de NVD (“Normalized Variable Diagram”) de Leonard (1988), a derivação de tais esquemas é baseada no critério de limitação CBC (Gaskell and Lau, 1988) e voltada para a satisfação das restrições TVD de Harten (1989) (ver também Harten (1983) e Sweby (1984)). Para ambos os esquemas, são obtidos os limitadores de fluxos correspondentes. O desempenho dos esquemas polinomiais “upwind” são investigados em problemas lineares (advecção escalar) e não lineares (tubo de choque) em condições severas de convecção (Sod, 1978; Shu and Osher, 1989). Como aplicação, são apresentadas simulações 3D, por meio das equações de Navier-Stokes completas, de jatos incidentes a superfícies rígidas impermeáveis.

2. NORMALIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS E A RECOMENDAÇÃO DE LEONARD

Considera-se $\phi(x,t)$ como sendo a variação de um escalar na direção normal a uma face f de uma célula computacional, como está mostrado na Figura 1. Nesta figura, as posições a jusante D (“Downstream”), a montante U (“Upstream”) e mais a montante R (“Remote-Upstream”) são definidas segundo a direção de propagação de informação nesta face (isto é, o sinal da velocidade convectiva V_f na face f). Para facilitar a análise, as variáveis originais são transformadas em

variáveis normalizadas (VN) de Leonard (1988) (ver Figura 2), definidas por: $\hat{\phi}(x,t) = \frac{\phi(x,t) - \phi_R}{\phi_D - \phi_R}$.

A vantagem de se utilizar VN é que o valor de $\hat{\phi}_f$ depende somente de $\hat{\phi}_U$, pois $\hat{\phi}_D = 1$ e $\hat{\phi}_U = 0$.

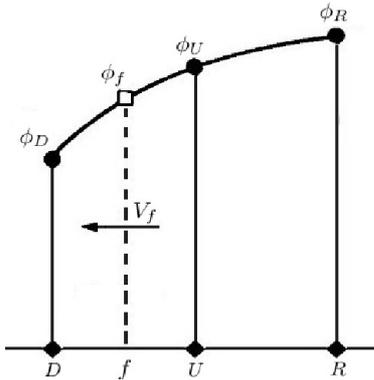


Figura 1: Variáveis Originais.

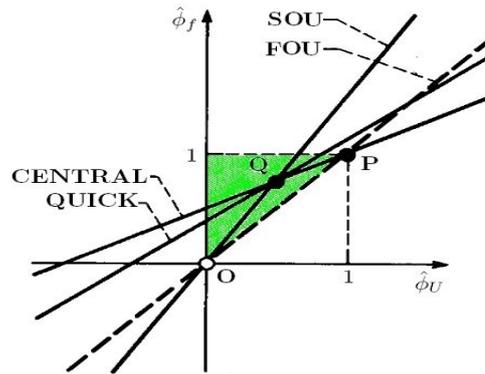


Figura 3: Diagrama de VN para alguns esquemas clássicos.

Como recomendado por Leonard (1988), qualquer esquema (em geral não linear) em NV que passa pelo ponto Q (ver Figura 3) é condição necessária e suficiente para alcançar segunda ordem de precisão; e qualquer esquema que passar por Q com inclinação 0.75 é condição necessária e suficiente para terceira ordem. Ainda mais, Leonard acrescenta que para valores de $\hat{\phi}_U$ menores que 0 e maiores que 1, o esquema deve ser estendido de maneira contínua (FOU).

3. DERIVAÇÃO DOS ESQUEMAS POLINOMIAIS PARA ADVECÇÃO

Nesta seção, são apresentados dois esquemas polinomiais “upwind” novos de, no máximo, terceira ordem, cuja derivação é baseada nas recomendações de Leonard discutidas anteriormente, isto é, eles devem passar obrigatoriamente pelos pontos O(0,0), Q(0.5,0.75), P(1,1) e possuírem inclinações 0.75 em Q. Nesse trabalho, em particular, essas quatro condições são impostas para determinar os coeficientes de um polinômio de grau 3, o qual chamamos de Esquema Convectivo I. Também, essas mesmas condições, mais uma condição livre, são impostas para a determinação de um polinômio de grau 4, chamado de Esquema Convectivo II. Em resumo, esses esquemas satisfazem o critério de limitação CBC de Gaskell e Lau (1988) e são definidos como segue:

3.1 Esquema Convectivo I

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

3.2 Esquema Convectivo II

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

O limitador de fluxo para o esquema I é obtido reescrevendo a Equação 1 como:

$$\hat{\phi}_f = \hat{\phi}_U + 0.5\psi(r_f)(1 - \hat{\phi}_U), \quad (3)$$

onde: ψ é o limitador de fluxo que determina o nível antidifusividade, r_f é razão de dois gradientes consecutivos definida em VN por $r_f = \hat{\phi}_U / (1 - \hat{\phi}_U)$. Das Equações 1 e 3, deduz-se o limitador de fluxo para o esquema I, isto é,

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{3r_f + (r_f)^2}{(1 + r_f)^2}, & r_f > 0, \\ 0, & r_f < 0, \end{cases} \quad (4)$$

O limitador de fluxo para o esquema II é obtido de maneira análoga ao obtido para o esquema I. Em suma, ele é

$$\psi(r_f) = \begin{cases} \frac{6(r_f)^2 + 2r_f}{(1 + r_f)^3}, & r_f > 0, \\ 0, & r_f < 0, \end{cases} \quad (5)$$

Na Figura 4 estão representados graficamente os esquemas I e II na região TVD de Harten (1989). Pode-se notar por esta figura que o esquema II está inteiramente contido nessa região. Na Figura 5 estão representados esses mesmos esquemas (os limitadores) na região TVD de Sweby (1984).

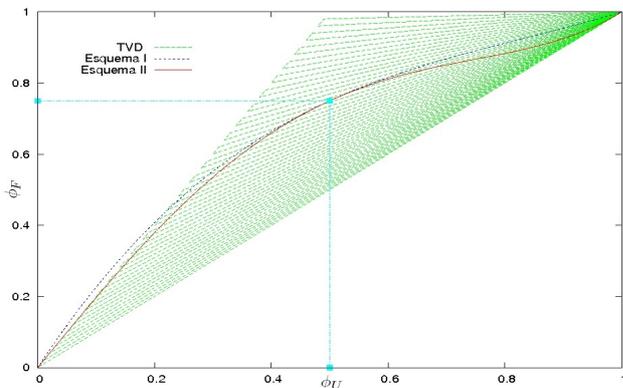


Figura 4: Esquemas “Upwind” na região TVD.

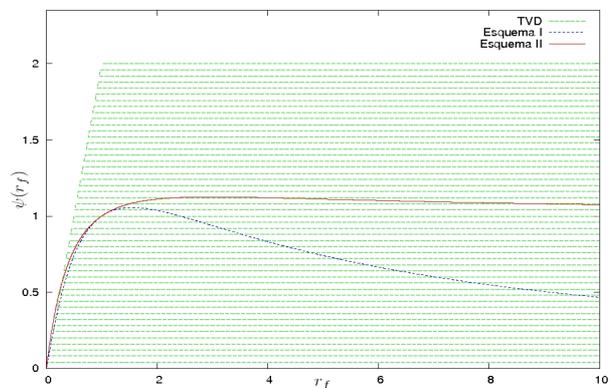


Figura 5: Limitadores de Fluxo.

É importante esclarecer ao leitor que durante os experimentos numéricos realizados para o problema da convecção de um escalar, ambos os esquemas apresentaram oscilações não físicas para o número de Courant (CFL) ≥ 0.5 . Assim, para eliminar essas oscilações indesejáveis foram realizados alguns ajustes para então se obter.

1. Esquema Convectivo I:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 1(\hat{\phi}_U)^3 - \frac{5}{2}(\hat{\phi}_U)^2 + \frac{5}{2}(\hat{\phi}_U), & \hat{\phi}_U \in [a, b], \\ \hat{\phi}_U & \hat{\phi}_U \notin [a, b], \end{cases} \quad (6)$$

2. Esquema Convectivo II:

$$\hat{\phi}_f = \begin{cases} 2(\hat{\phi}_U)^4 - 3(\hat{\phi}_U)^3 + 2(\hat{\phi}_U), & \hat{\phi}_U \in [a, b], \\ \hat{\phi}_U & \hat{\phi}_U \notin [a, b], \end{cases} \quad (7)$$

em que as constantes a e b são determinadas em função do CFL, da seguinte forma:

- † Se $CFL < 0.5$, então $a = 0$ e $b = 1$;
- † Se $0.5 \leq CFL < 0.8$, então $a = (CFL - 0.5) + 0.2$ e $b = 1 - a$;
- † Se $0.8 \leq CFL < 1$, então $a = 0.1375CFL + 0.315$ e $b = 1 - a$;

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção apresentam-se soluções numéricas obtidas com os esquemas propostos para a equação de advecção (linear) e a equação de Euler (não linear). Estes problemas têm sido testes importantes na literatura para averiguar o desempenho de esquemas “upwind” de alta ordem (ver, por exemplo, Kurokawa et al. (2007)). Apresentam-se também simulações de jatos 3D sobre superfícies rígidas impermeáveis.

4.1. Equação de advecção linear

O primeiro problema teste considerado é a equação linear de advecção com várias condições iniciais (Casos 1 e 2 apresentados abaixo), isto é,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + a \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0, \quad (8)$$

cuja solução exata é $\phi(x, t) = \phi_0(x - at)$, em que $\phi_0(x)$ é o dado inicial. Em todas as simulações realizadas, foi utilizada uma malha uniforme de 800 células computacionais e tempo adimensional de simulação $t = 1.0$. Os valores de CFL utilizados foram 0.2 e 0.7.

† Caso 1: Considera-se a forma “W-shape” proposta por Wey e Gu (2002). Neste problema, a condição inicial é:

$$\phi_0(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq 2, \\ 4x - 0.6, & 0.2 \leq x \leq 0.4, \\ -4x + 2.6, & 0.4 \leq x \leq 0.6, \\ 1, & 0.6 \leq x \leq 0.8, \\ 0, & cc \end{cases} \quad (9)$$

As Figuras 8 e 9 mostram a solução exata e os resultados numéricos obtidos com os esquemas de convecção I e II para diferentes CFL. Nota-se neste exemplo que há uma concordância bastante satisfatória entre os dados.

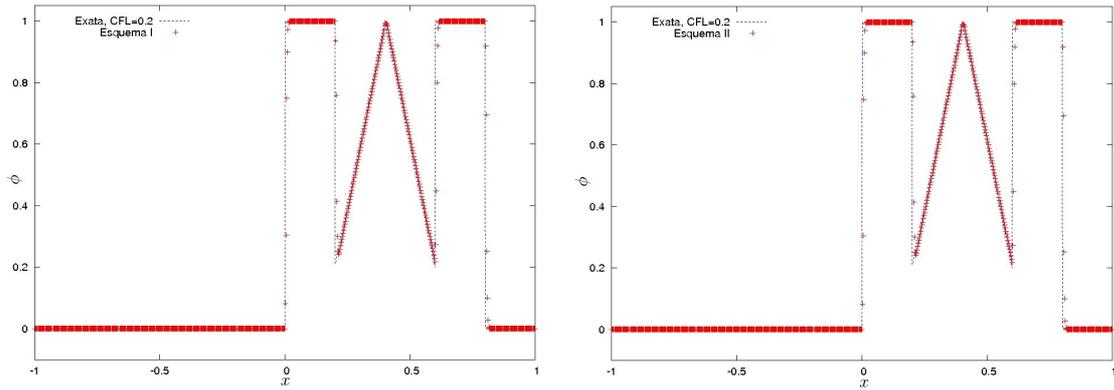


Figura 8: Comparação das soluções numérica e analítica, para a equação de advecção 1D com condição inicial “W-shape” e CFL=0.2.

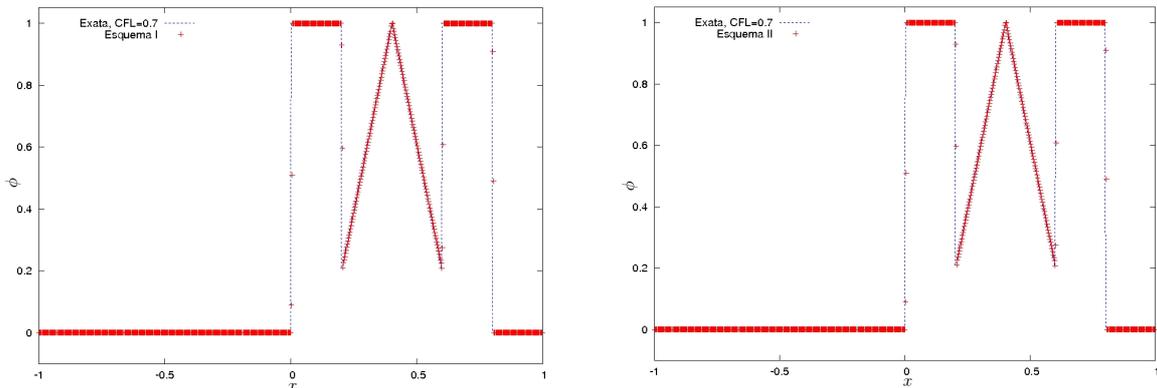


Figura 9: Comparação das soluções numérica e analítica, para a equação de advecção 1D com condição inicial “W-shape” e CFL=0.7.

† Caso 2: Considera-se a aplicação dos esquemas de convecção I e II na solução do problema com “sharp” gradientes de Harten (1989). Neste caso, a condição inicial considerada é

$$\phi_0(x) = \begin{cases} -x \sin\left(\frac{3\pi x^2}{2}\right), & -1 \leq x \leq -\frac{1}{3}, \\ |\sin(2\pi x)|, & |x| < \frac{1}{3}, \\ 2x - 1 - \frac{1}{6} \sin(3\pi x), & \frac{1}{3} \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (10)$$

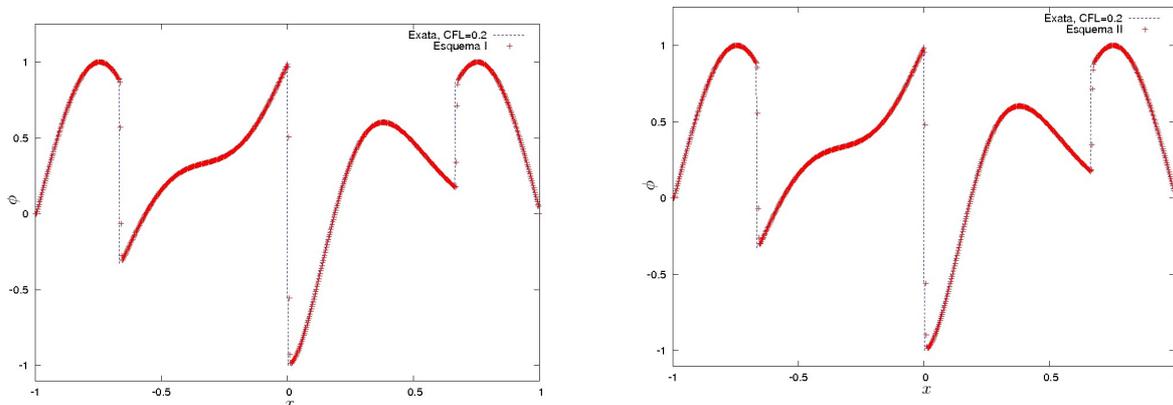


Figura 10: Comparação das soluções numérica e analítica, para o problema com “sharp” gradientes de Harten e CFL=0.2.

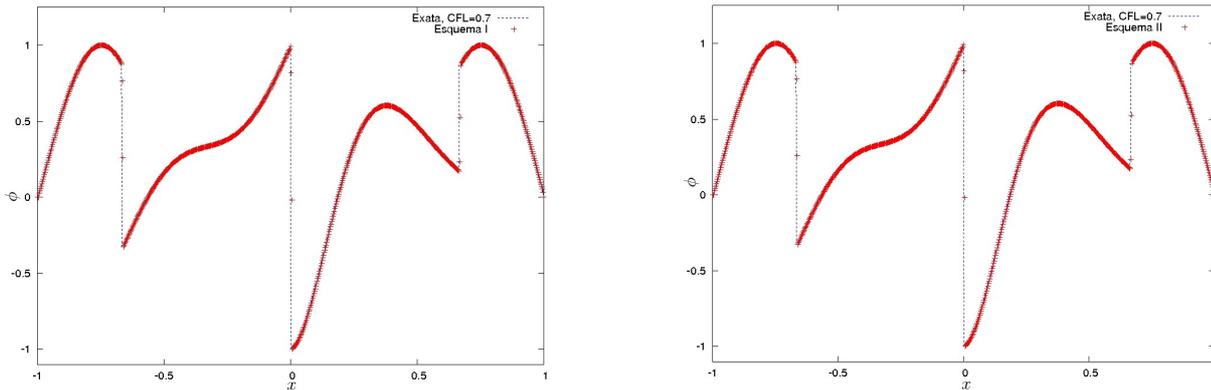


Figura 11: Comparação das soluções numérica e analítica, para o problema com “sharp” gradientes de Harten e CFL=0.7.

4.2. Equação de Euler 1D

Em contraste ao problema linear apresentado na seção anterior, apresenta-se aqui o problema não linear do tubo de choque 1D, modelado pela equação de Euler da dinâmica dos gases

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0, \quad (11)$$

onde

$$U = (\rho, \rho v, E)^T, \quad (12)$$

$$F(U) = (\rho v, \rho v^2 + p, (E + pv))^T. \quad (13)$$

e $\rho, v, \rho v, E, p$, respectivamente, a densidade, velocidade, quantidade de movimento, energia total e pressão.

Para fechar a Equação (11), a equação constitutiva de gás ideal é considerada

$$\rho = (\gamma - 1) \left(E - \frac{1}{2} \rho v^2 \right) \quad (14)$$

onde é considerado com $\gamma = 1.4$.

Na simulação da equação de Euler, utilizaram-se 800 células computacionais e valores de CFL 0.2 e 0.6. Em particular, foram simulados os seguintes problemas de Riemann:

- Tubo de choque de Sod (Sod, 1978), onde se considera a Equação 11 suplementada com a condição inicial:

$$(\rho, v, p)^T = \begin{cases} (1, 0, 1)^T, & x < 0.5, \\ (0.125, 0, 0.1)^T, & x \geq 0.5. \end{cases}$$

Os resultados numéricos e a solução analítica são apresentados nas Figuras 12 e 13. Observa-se nesse caso que os resultados numéricos são bastante precisos.

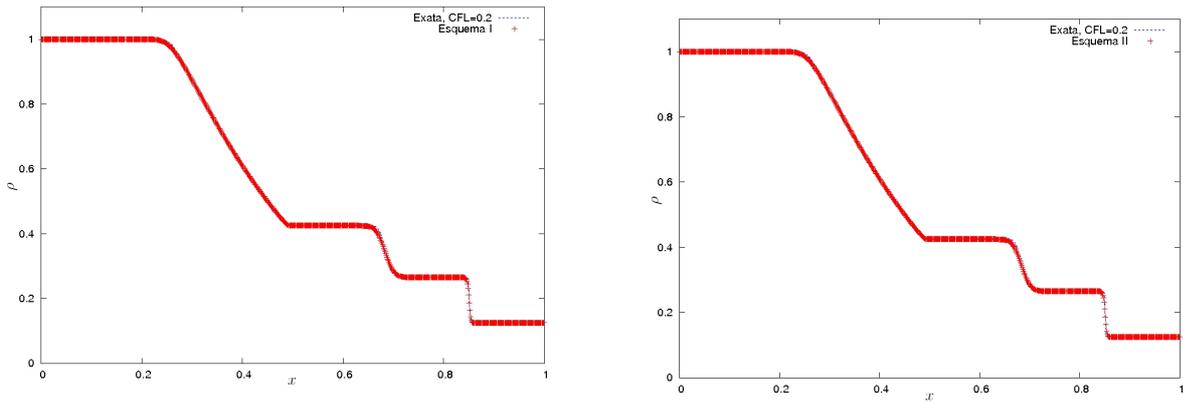


Figura 12: Comparação das soluções numérica e analítica, para o problema do tubo de choque de Sod com CFL=0.2.

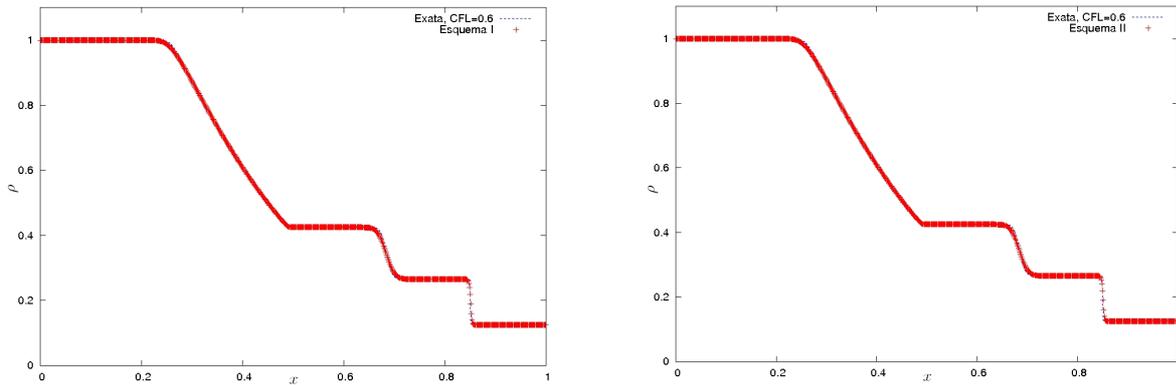


Figura 13: Comparação das soluções numérica e analítica, para o problema do tubo de choque de Sod com CFL=0.6.

- Tubo de choque de Shu-Osher (Shu and Osher, 1989), em que considera-se a Equação 11, no intervalo $[-1,3]$, suplementada com os dados iniciais

$$(\rho, v, p)^T = \begin{cases} (3.86, 2.63, 10.33)^T, & x < -0.8, \\ (1 + 0.2 \sin(5x), 0, 1)^T, & cc. \end{cases} \quad (15)$$

Os resultados numéricos e a solução analítica são apresentados nas Figuras 14 e 15. E mais uma vez, os resultados numéricos mostraram-se de boa qualidade.

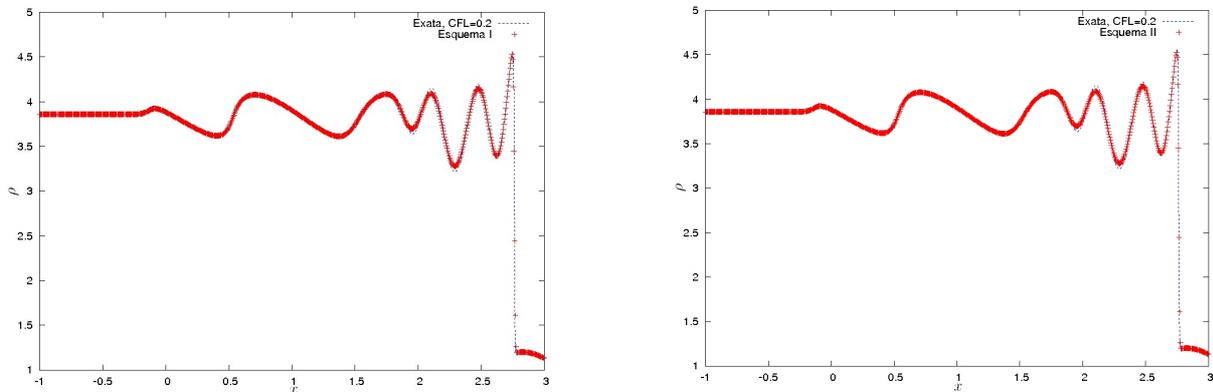


Figura 14: Comparação das soluções numérica e analítica, para o problema do tubo de choque de Shu-Osher com CFL=0.2.

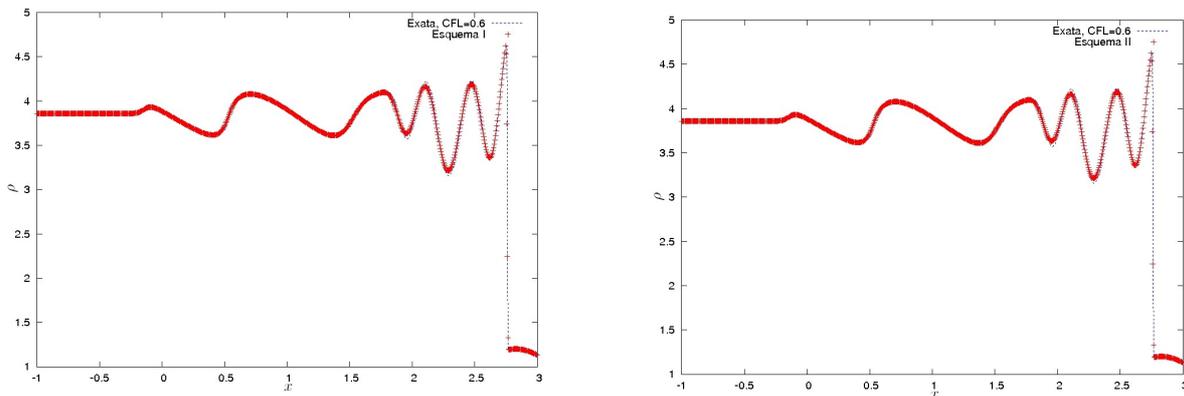


Figura 15: Comparação das soluções numérica e analítica, para o problema do tubo de choque de Shu-Osher com CFL=0.6.

4.3. Aplicação: escoamentos incompressíveis transientes 3D com superfícies livres

Nesta seção, apresentam-se resultados qualitativos de simulações de escoamentos incompressíveis transientes com superfícies livres sob à ação do campo gravitacional $g = 9.8m/s^2$. O objetivo é mostrar que fenômenos físicos podem ser simulados pelo método numérico descrito neste trabalho.

- Salto hidráulico circular. Frequentemente observa-se o fenômeno interessante: abrindo a torneira da cozinha, um jato livre escoa verticalmente, incide sobre uma superfície rígida (a cuba da pia), e espalha lateralmente com uma saliência (uma descontinuidade súbita) aparecendo em alguma distância do ponto de impacto. Este fenômeno é chamado salto hidráulico circular e constitui um excelente teste para a validação de métodos numéricos. O sistema de simulação “Freeflow” de Castelo et al. (2000), equipado com o esquema I aqui apresentado, foi usado para simular este problema 3D com superfície livre, a Reynolds (Re) 100, numa malha de $100 \times 100 \times 20$ ($\delta x = \delta y = \delta z = 0.001m$) células computacionais e tempo 0.5s. O resultado da simulação é apresentado na Figura 16. Como pode-se observar, o salto hidráulico circular foi simulado com sucesso. Optou-se por não apresentar a simulação desse mesmo problema usando-se o esquema II, pois o resultado numérico mostrou-se bastante semelhante àquele obtido com o esquema I.

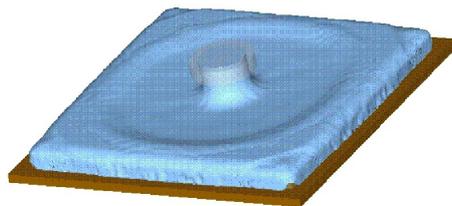
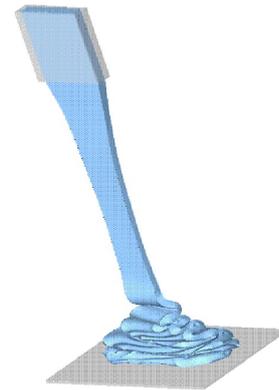
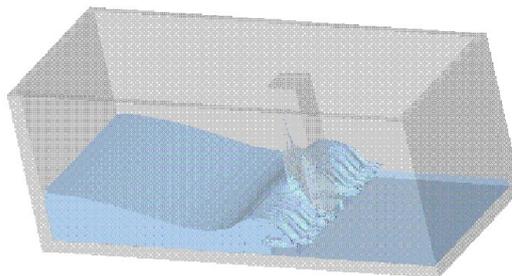


Figura 16: Simulação 3D do salto hidráulico circular

- Jatos oscilantes. Os esquemas de convecção aqui apresentados foram testados em problemas onde as forças viscosas são dominantes, isto é, em problemas de jatos oscilantes. Oscilações em jatos livres incidentes a superfícies rígidas são instabilidades físicas muito interessantes. O objetivo aqui é mostrar que, além de simular essas instabilidades físicas, os esquemas convectivos I e II são também apropriados para simular problemas 3D com superfícies livres a baixos Reynolds. Novamente, o código “Freeflow”, equipado com os esquemas polinomiais I e II, foi usado para simular este problema 3D com superfície livre a Reynolds 0.25, numa malha de $100 \times 100 \times 100$ ($\delta x = \delta y = \delta z = 0.001m$) células computacionais e tempo de simulação 1.5 s. Como pode ser observado nas Figuras 17 e 18, as instabilidades físicas foram simuladas em jatos (circular e planar). Pelo mesmo motivo apresentado no caso do problema do salto hidráulico circular, optou-se também aqui não mostrar os resultados numéricos utilizando-se o esquema II.

Figura 17: Jato circular: $Re=0.25$ Figura 18: Jato Planar $Re=0.50$

• Interação fluido-estrutura. O problema da interação fluido-estrutura é um tópico importante em muitos campos da engenharia, principalmente em estruturas hidráulicas e plataformas de petróleo. Um exemplo simples do problema da interação fluido-estrutura, e útil para a validação de métodos numéricos, é o efeito combinado da superfície livre e o coeficiente de viscosidade de um fluido (ver, por exemplo, (Lin et al. , 2005)). O código “Freeflow”, adaptado com os esquemas de terceira ordem I e II, simulou este problema a Reynolds 514655.223 e em uma malha de $170 \times 70 \times 70$ ($\delta x = \delta y = \delta z = 0.010m$) células computacionais. A Figura 19 mostra a interação de uma onda e um obstáculo após $t=1.5$ s. Como nas simulações anteriores, os resultados obtidos com o esquema II mostraram-se muito semelhantes.

Figura 19: Exemplo da interação fluido-estrutura: $Re=514655.223$

5. CONCLUSÕES

Dois esquemas polinomiais “upwind” novos para aproximar termos convectivos nos contextos TVD/NVD/CBC, e seus respectivos limitadores de fluxo, foram apresentados neste trabalho. De modo geral, a aplicação desses esquemas nas equações 1D de advecção e Euler indica que ambos os esquemas fornecem soluções numéricas bastante satisfatórias e sem oscilações.

O ambiente de simulação “Freeflow” de Castelo et al. (2000), equipado com esses novos esquemas polinomiais “upwind”, foi aplicado na simulação de jatos livres sob a ação do campo gravitacional e na simulação da interação fluido-estrutura. Os resultados numéricos nestes casos indicam que os fenômenos físicos a baixos e a altos Reynolds podem ser simulados com confiança.

Para trabalhos futuros, os autores planejam comparar os resultados obtidos neste trabalho com resultados de esquemas “upwind” consagrados da literatura, tais como Quickest Adaptativo, Superbee, Mimmod, ENO, etc. Também, os autores pretendem comparar as simulações 3D aqui apresentadas com dados experimentais e analíticos disponíveis da literatura.

6. AGRADECIMENTOS

Este trabalho de pesquisa teve o apoio financeiro da FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo), Processo no. 2006/05910-1.

7. REFERÊNCIAS

- Castelo, A. et al., 2000, “Freeflow: An integrated simulation system for three-dimensional free surface flows”, *Journal of Computing and Visualization in Science*, Vol. 2 , pp 199-210.
- Gaskell, P.H. and Lau, A.K., 1988, “Curvature-compensated convective transport: SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 8, pp 617-641.
- Harten, A., 1983, “High resolution schemes for conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 49, 357-393.
- Harten, A., 1989, “ENO schemes with subcell resolution”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 83 , pp 148-184.
- Kurokawa, F. A. et al., 2007, “A comparison of high order upwind schemes for solving strong convection problems”, *Proceedings of the XXVIII CILAMCE - Congresso Ibero Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia*, Porto, Portugal.
- Laney, C. B., 1998, “*Computational Gasdynamics*”, Cambridge University Press.
- Leonard, B.P., 1988, “Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*”, Vol. 8, pp 1291-1318.
- Lin, C.-L. et al., 2005, “A level set characteristic Galerkin finite element method for free surface flows”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 49, pp 521-547.
- Shu, C.-W. and Osher, S., 1989, “Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 83.
- Sod, G., 1978, “A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 27 .
- Sweby, P.K., 1984, “High resolution scheme using flux limiters for hiperbolic conservation laws”, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 21, pp 995-1011.
- Wei, G. W. and Gu, Y., 2002, “Conjugated filter approach for solving Burger's equation”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 149, pp 439-456.

UPWIND POLYNOMIAL SCHEMES AND THEIR APPLICATIONS IN 3 D INCOMPRESSIBLE TRANSIENT FLOWS

Rafael Alves Bonfim de Queiroz

Departamento de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC, USP
 Av. Trabalhador São-carlense, 400 - Centro, São Carlos, SP
 Caixa Postal: 668 – CEP: 13560-970
 bonfim@icmc.usp.br

Valdemir Garcia Ferreira

pvgf@icmc.usp.br

Abstract: *In this research article, two upwind polynomial schemes for approximating convective terms are proposed. The derivation of these schemes is based on CBC and TVD criteria. The associated flux limiters are also obtained. The performance of the schemes is checked by using two unidimensional problems – one linear (advective transport of a scalar) and the other non linear (shock tube). The obtained computational results with these new schemes are compared with analytical solutions. The comparison shows satisfactory agreement among the data. As application, tridimensional transient simulations of free jets onto rigid walls are presented.*

Keywords: *convection schemes, upwind, numerical simulation, NVD, TVD.*