

Métodos de Marcha no Tempo Dual para Simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional

Palavras-Chave: Método de marcha no tempo, Dinâmica dos fluidos computacional, Dinâmica dos gases

Estudante: Felipe Margonato de Sousa

Orientador: William Roberto Wolf

1 Introdução

A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta numérica capaz de solucionar sistemas de equações para o escoamento de um fluido. Sua aplicação prática se deu a partir do desenvolvimento tecnológico e computacional nos anos de 1960. As técnicas de CFD permitem modelar equações diferenciais não lineares, como as de Navier Stokes [1], a um menor custo financeiro e de tempo quando comparado aos métodos experimentais.

Este trabalho irá discutir sobre uma classe de métodos numéricos conhecida por método de marcha no tempo dual, o qual é capaz de reduzir o custo computacional e manter a qualidade da solução. Métodos de marcha no tempo dual encontram aplicações em problemas com “rigidez” numérica como aqueles envolvendo a propagação de ondas, turbulência e combustão.

2 Metodologia

No início do projeto, buscou-se compreender conceitos relacionados às equações não-lineares na mecânica dos fluidos. Como, por exemplo, as equações de conservação de Euler e Navier-Stokes [1], que descrevem a conservação da massa, momento e energia de um fluido em equações diferenciais parciais não-lineares. Nesse contexto, investigou-se a resolução computacional de equações não-lineares através de métodos numéricos de discretização da equação de Burgers viscosa [2] e equação de Ginzburg-Landau [3].

Independentemente do método numérico a ser utilizado, verificou-se que, para garantir a estabilidade da aplicação, esta deve utilizar um método de discretização adequado ao problema e atender às condições de Courant (CFL) convectiva e viscosa. Assim, os valores de (1-2) ao longo da simulação devem ser menores que os valores limite de estabilidade, que podem ser definidos com base em séries de Fourier.

$$CFL_{convectiva} \leq \frac{|u_{max}| \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (1)$$

$$CFL_{viscosa} \leq \frac{\nu \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \quad (2)$$

2.1 Equação de Burgers Viscosa

Baseado em [2], estudou-se a seguinte equação de Burgers viscosa,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3)$$

que representa a propagação não-linear de uma onda. Assim, a propriedade u se propaga também com velocidade u , permitindo a formação de descontinuidades. No caso, ν representa a viscosidade do fluido. Na condição do método de marcha no tempo dual [4], metodologia de interesse deste projeto, adiciona-se uma derivada no tempo fictício,

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (4)$$

a qual não apresenta sentido físico. Portanto, deseja-se obter a solução que esta derivada atinja o estado estacionário, isto é, seja próxima de zero, retornando à equação original (3).

Para que um método de resolução de equações diferenciais seja aplicável em casos práticos, este deve ser acurado, estável e apresente baixo custo computacional. Para melhor compreensão dessas características utilizando o método de marcha no tempo dual, é relevante comparar seus resultados com métodos de marcha no tempo convencional. Propôs-se, então, simular a condição de propagação de uma onda gaussiana com três estratégias de resolução:

1. Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem Explícito
2. Método de Marcha no Tempo Convencional Implícito
3. Método de Marcha no Tempo Dual Implícito

A primeira metodologia é utilizada como referência de solução, visto que a equação (3) não apresenta solução analítica. Assim, esta será simulada com parâmetros que garantem alta acurácia e estabilidade, sem a necessidade de apresentar baixo custo computacional. Através da segunda e terceira será possível estabelecer conclusões a respeito das vantagens e desvantagens da metodologia dual em relação ao convencional.

2.2 Método de Marcha no Tempo Dual Implícito

Este método consiste em solucionar a equação (4) através de iterações no pseudo-tempo τ enquanto marcha-se no tempo físico t . De modo a relacionar ambos passos no tempo, define-se que $\gamma = \frac{\Delta t}{\Delta \tau}$.

Os artifícios de linearização, discretização numérica no tempo e espaço são modelados conforme equações (5-9),

$$F^{n+1,k+1} = F^{n+1,k} + \left. \frac{\partial F}{\partial u} \right|^{n+1,k} \cdot (u^{n+1,k+1} - u^{n+1,k}) \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{u_j^{n+1,k+1} - u_j^{n+1,k}}{\Delta \tau} \quad (6)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_j^n = \frac{3 \cdot u_j^{n+1,k+1} - 4 \cdot u_j^n + u_j^{n-1}}{2 \cdot \Delta t} \quad (7)$$

$$\left. \frac{\partial \frac{u^2}{2}}{\partial x} \right|_j^{n+1,k+1} = \frac{(u_{j+1}^{n+1,k+1})^2 - (u_{j-1}^{n+1,k+1})^2}{4 \cdot \Delta x} \quad (8)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j^{n+1,k+1} = \frac{u_{j-1}^{n+1,k+1} - 2 \cdot u_j^{n+1,k+1} + u_{j+1}^{n+1,k+1}}{\Delta x^2} \quad (9)$$

resultando no seguinte sistema linear,

$$[A] \cdot \vec{u}^{n+1,k+1} = [B] \cdot \vec{u}^n + [C] \cdot (\vec{u}^{n+1,k})^2 + [D] \cdot \vec{u}^{n+1,k} + [E] \cdot \vec{u}^{n-1} \quad (10)$$

em que os índices (k) e ($k+1$) indicam o instante de tempo atual e seguinte no tempo fictício.

3 Equação de Ginzburg-Landau

Considerando o avanço na aplicação do método de marcha no tempo dual em problemas não lineares, foi de interesse aplicar esse método em equações não-lineares de maior complexidade. Dessa forma, baseado em [3], destacou-se a equação complexa de Ginzburg-Landau (11).

$$\frac{\partial A}{\partial t} = (1 + \alpha i) \cdot \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + R \cdot A - (1 + \beta i) \cdot |A|^2 \cdot A \quad (11)$$

Esta equação é abordada ao estudar fenômenos de supercondutividade, porém também apresenta relevância em aplicações de mecânica dos fluidos, sobretudo ao estudar a equação de Navier-Stokes. No

caso, $A = A(x, t)$ manifesta-se de forma complexa, tal que $i = +\sqrt{-1}$ e α, β, R são reais. As condições de contorno são periódicas, conforme (12-13):

$$A(x_0, t) = A(x_f, t), \quad t > 0 \quad (12)$$

$$\frac{\partial A(x_0, t)}{\partial x} = \frac{\partial A(x_f, t)}{\partial x}, \quad t > 0 \quad (13)$$

Novamente, foi de interesse utilizar o método convencional e dual para comparar seus resultados a partir de diferentes parâmetros. Na aplicação de marcha no tempo dual, a equação (11) resulta em (14).

$$\frac{\partial A}{\partial \tau} + \frac{\partial A}{\partial t} = (1 + \alpha i) \cdot \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + R \cdot A - (1 + \beta i) \cdot |A|^2 \cdot A \quad (14)$$

Em um método convencional, é possível descrever o método de marcha no tempo de forma explícita ou implícita. Assim, A é descrito como em (15), de modo que para $\theta = 1$ o método é implícito e para $\theta = 0$, explícito. No entanto, é possível utilizar um valor de θ intermediário, tal que $0 < \theta < 1$.

$$A = \theta \cdot A^{n+1} + (1 - \theta) \cdot A^n \quad (15)$$

Neste modelo, empregou-se $\theta = 0,5$ na derivada temporal, referenciado como método de Crank-Nicolson. Conciliando, assim, a precisão do método explícito e a estabilidade do método implícito. Dessa forma, propôs-se aplicar o método de marcha no tempo dual e comparar os resultados com a aplicação do método convencional conforme [3], utilizando a condição inicial (16).

$$A_0 = \text{sech}((x + 50)^2) + 0.8 \cdot \text{sech}((x - 50)^2) + \text{ruído} \quad (16)$$

3.1 Método de Marcha no Tempo Dual

Em congruência ao método de marcha no tempo convencional, optou-se por formular a equação de Ginzburg-Landau a partir do parâmetro θ . No entanto, a formulação de A e o valor de θ foram reavaliados. No caso do tempo dual, A é descrito conforme (17) e a equação geral por (18).

$$A = \theta \cdot A^{n+1,k+1} + (1 - \theta) \cdot A^{n+1,k} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial \tau} + \frac{\partial A}{\partial t} = (1 + \alpha i) \cdot \left[\theta \cdot \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \Big|^{n+1,k+1} + (1 - \theta) \cdot \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \Big|^{n+1,k} \right] + R \cdot \left[\theta \cdot A^{n+1,k+1} + (1 - \theta) \cdot A^{n+1,k} \right] \dots \\ - (1 + \beta i) \cdot \left[\theta \cdot (|A|^2 \cdot A)^{n+1,k+1} + (1 - \theta) \cdot (|A|^2 \cdot A)^{n+1,k} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

As discretizações relacionadas às derivadas temporais, espacial e linearização são adaptadas conforme o novo instante de tempo $(n+1, k+1)$, resultando em (19-22).

$$\frac{\partial A}{\partial \tau} = \frac{A_j^{n+1,k+1} - A_j^{n+1,k}}{\Delta \tau} \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \Big|_j^{n*} = \frac{A_{j-1}^{n*} - 2 \cdot A_j^{n*} + A_{j+1}^{n*}}{\Delta x^2} \quad (20)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} \Big|_j^n = \frac{3 \cdot A_j^{n+1,k+1} - 4 \cdot A_j^n + A_j^{n-1}}{2 \cdot \Delta t} \quad (21)$$

$$(|A|^2 \cdot A) \Big|_j^{n+1,k+1} = A_j^{n+1,k+1} \cdot (2 \cdot A_j^2 + |A_j|^2)^{n+1,k} - 2 \cdot (A_j^3)^{n+1,k} \quad (22)$$

4 Resultados

4.1 Equação de Burgers Viscosa

A partir dos parâmetros utilizados, conforme Tabela 1, os resultados dessa modelagem é descrita pela Figura 1.

Tabela 1: Parâmetros utilizados na simulação da equação de Burgers através dos métodos de marcha no tempo convencional e dual

x_0	x_f	Δx	t_f	Δt	ν	CFL_c	CFL_v	γ	N_{iter}
-6	6	0.024	10	1	0.01	41.67	17.36	0.1	15

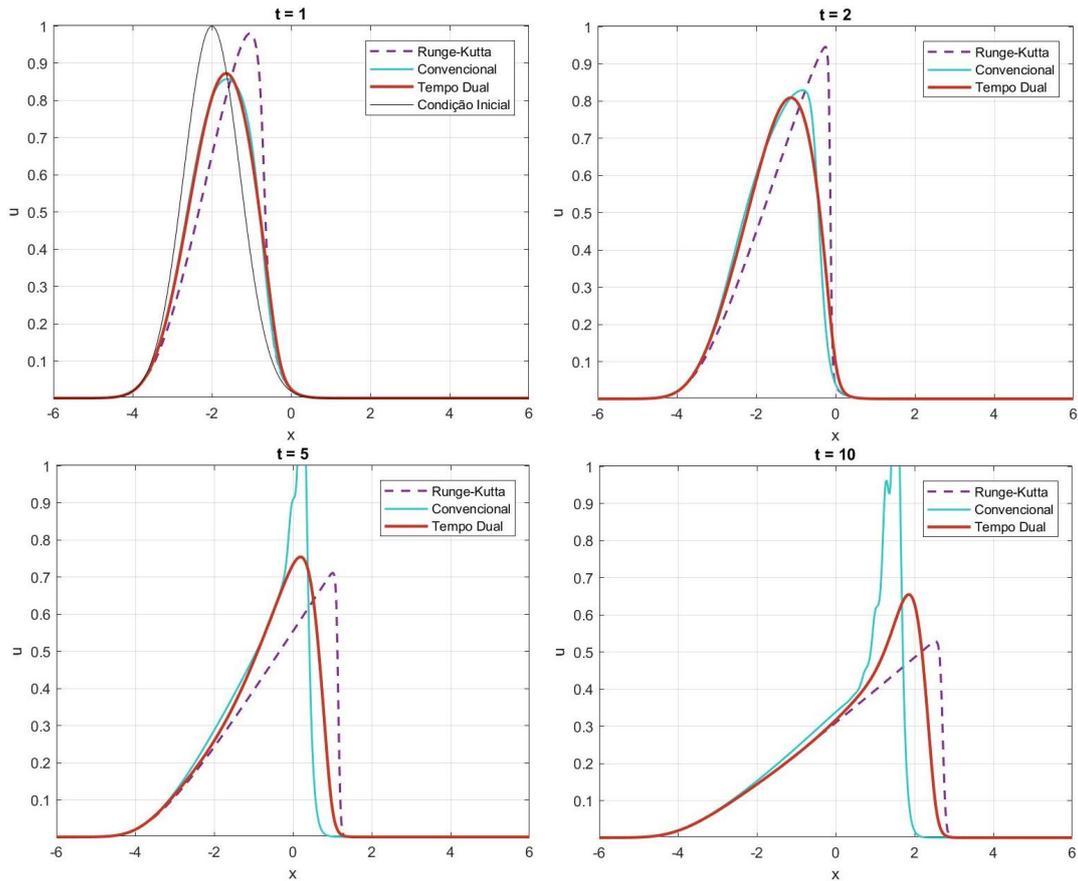


Figura 1: Resultado da propagação da onda gaussiana conforme equação de Burgers em diferentes instantes de tempo

4.2 Equação de Ginzburg-Landau

Os parâmetros aplicados na simulação utilizando o método de marcha no tempo convencional e dual são descritos na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros utilizados na simulação da equação de Ginzburg-Landau através dos métodos de marcha no tempo convencional e dual

x_0	x_f	Δx	t_f	Δt	R	α	β	θ	γ	N_{iter}
-50	50	0.3891	50	0.1	1	0	-4	0.5	0.1	5

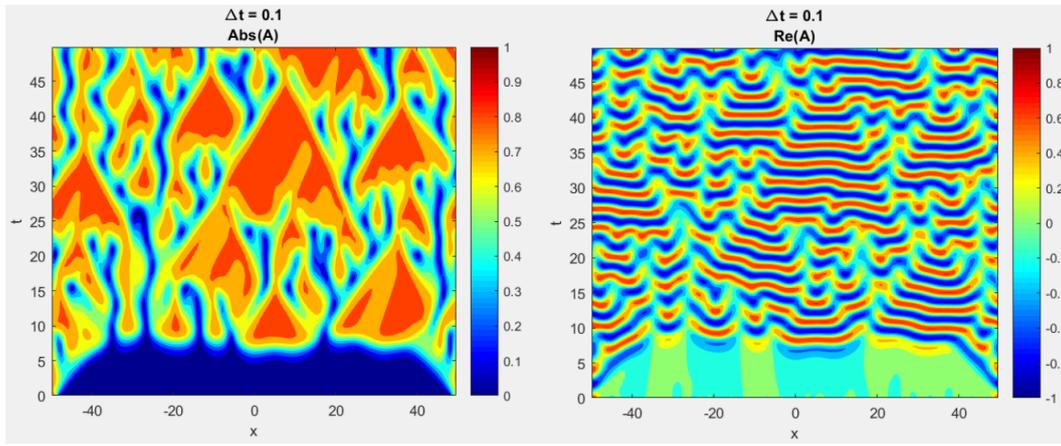


Figura 2: Turbulência observada da parte real e absoluta de A ao longo do tempo utilizando método de marcha no tempo convencional

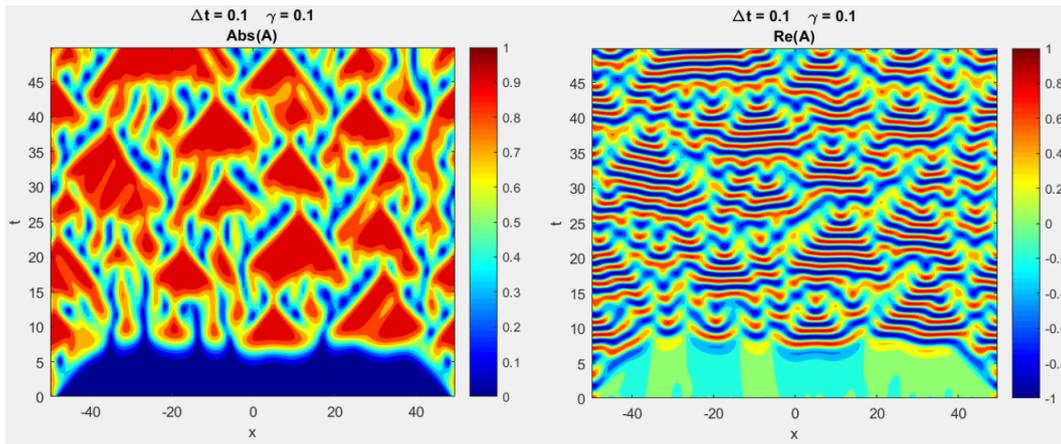


Figura 3: Turbulência observada da parte real e absoluta de A ao longo do tempo utilizando método de marcha no tempo dual

As Figuras 2-3 indicam os resultados do método convencional e dual, respectivamente. Nota-se que, para um mesmo valor de passo no tempo $\Delta t = 0.1$, o método dual é capaz de descrever com melhor refinamento a propagação da onda ao longo do tempo quando comparado ao método proposto por [3].

Vale ressaltar que, caso fosse utilizado um maior número de iterações no pseudo-tempo N_{iter} , o tempo de execução seria maior. Porém, o refinamento da propagação seria ainda maior, característica de interesse em aplicações reais.

5 Conclusões

Através deste estudo foi possível comparar as características do método convencional e método de marcha no tempo dual aplicados a problemas não lineares [4]. Dessa forma, foi possível identificar maior estabilidade do método de marcha no tempo dual, tornando-se viável utilizar maiores valores de CFL sem que a estabilidade do modelo seja comprometida.

Referências

- [1] Temam, R.: Navier–Stokes Equations. Rhode Island, (2001).
- [2] C.Hirsch: Numerical computation of internal and external flows. Brussels, Belgium, (1990)
- [3] J. Willers E.H. Twizell (2003) A Finite-difference Solution of the Ginzburg–Landau Equation, Journal of Difference Equations and Applications, 9:12, 1059-1068, DOI: 10.1080/1023619031000146896
- [4] Jonathan J. Chiew, Thomas H. Pulliam: Stability Analysis of Dual-Time Stepping. Stanford, (2016).