

Interpolação de Alta Ordem Aplicada na Modelagem do Transporte Advectivo para Fluidos Incompressíveis

Gustavo Charles P. de Oliveira, Norberto Mangiavacchi,

Programa de Pós-Graduação em Eng. Mecânica, GESAR/FEN, UERJ,

20940-903, Rio de Janeiro, RJ,

E-mail: tavolesliv@gmail.com, norberto@uerj.br,

José Pontes

Programa de Pós-Graduação em Eng. Metalúrgica e Materiais, PEMM/COPPE, UFRJ,

CP 68505, 21941-972, Rio de Janeiro, RJ,

E-mail: jopontes@metalmat.ufrj.br.

Palavras-chave: *Método dos Elementos Finitos, Interpolação, Método Semi-Lagrangeano, Escoamentos Incompressíveis, Advecção.*

Resumo: *São apresentados estudos com um operador de interpolação que está sendo desenvolvido para simulações computacionais de fluidos incompressíveis no que concerne à modelagem matemática de advecção e sob uma representação Semi-Lagrangeana da Derivada Material. Testes são executados com base em esquemas de Volumes Finitos em duas dimensões, no intuito de pavimentar o caminho para implementações em códigos numéricos mais robustos e voltados ao Método dos Elementos Finitos em três dimensões.*

1 Introdução

Diferentemente do transporte difusivo, aquele incitado pela difusão, o transporte advectivo ou, brevemente, advecção, ocorre quando partículas da matéria são movidas de um lugar a outro por ação de um elemento transportador [2]. Exemplos reais de tal fenômeno são a dispersão de partículas de poeira ou fuligem pelo ar, de contaminantes em um efluente escoante, o espalhamento dos grãos de açúcar em um recipiente contendo líquido quando algum escoamento é provocado, o arrastamento da areia mediado pelo mar após a quebra de uma onda, entre muitos outros.

A maioria de tais eventos são dependentes do tempo e do espaço e podem ocorrer de modo bastante aleatório e desorganizado, fatores que dificultam severamente sua modelagem computacional. Em linguagem matemática, diz-se que a mudança convectiva de uma partícula qualquer viajando ao longo de uma trajetória por um espaço Euclidiano de dimensão $1 \leq m \leq 3$ é representada pela *Derivada Material*, a saber:

$$\frac{D\phi}{D\tau} = \frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi, \quad (1)$$

onde ϕ é uma quantidade material, τ é a dimensão temporal, \mathbf{v} a velocidade e $\nabla\phi$ o vetor gradiente de ϕ (ou simplesmente derivada espacial, quando $m = 1$).

No âmbito da modelagem computacional de fluidos incompressíveis, interessa-nos captar acuradamente o valor de ϕ por todo o espaço, ou melhor, por todo o domínio matemático onde está definida. Para este fim, recorreremos à teoria da interpolação, uma vez que todos os cálculos numéricos desempenham-se sob um universo discreto.

2 Mecanismos de Interpolação Aplicados à Derivada Material

Consideremos uma malha discretizada à moda de Elementos Finitos sobre um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^m$. Seja $\mathcal{T} = \cup_{e=1}^E K_e$ uma discretização de Ω formada por E símlices K geometricamente regulares, cuja interseção entre seus elementos seja unicamente um subconjunto de dimensão $m - 1$. Seja \mathbf{x}_m um nó da malha e também identificando algum vértice dos símlices K . Além disso, sejam $\phi(\mathbf{x}_m) := \phi_{(i_m)}$ o valor de ϕ no ponto \mathbf{x}_m da malha e $\frac{\partial \phi(\mathbf{x}_m)}{\partial x_m} := \partial_m \phi_{(i_m)}$ o valor da derivada parcial de primeira ordem de ϕ em \mathbf{x}_m .

Usando o método Semi-Lagrangeano de primeira ordem, obtemos a seguinte aproximação discreta no tempo para a Eq. (1):

$$\frac{D\phi}{D\tau} \approx \frac{\phi(\mathbf{x}_m)^{\tau=t+\Delta t} - \phi(\mathbf{x}_m)_d^{\tau=t}}{\Delta t}, \quad (2)$$

em que t é um passo de tempo discreto e $(\mathbf{x}_m)_d$ um ponto de “partida” para a trajetória de uma partícula fluida dado por $(\mathbf{x}_m)_d = \mathbf{x}_m - \mathbf{v}\Delta t$.

Para obter $\phi(\mathbf{x}_m)_d$, é necessário, em geral, interpolar a solução no tempo $\tau = t$ e, para este fim, usamos funções de base que combinam funções lineares definidas por

$$\lambda_l(\mathbf{x}) := \sum_{p=0}^P \alpha_{lp} x_p, \quad 1 \leq P \leq m, \quad 1 \leq l \leq m+1, \quad \alpha_{lp} \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Logo, usando (3), podemos construir um interpolante linear para ϕ como:

$$\mathcal{I}_1 \phi(\mathbf{x}_m) = \sum_{l=1}^L \phi_l \lambda_l(\mathbf{x}_m), \quad L \leq m+1. \quad (4)$$

Pode-se demonstrar que esta abordagem coincide, para $\text{CFL} < 1$, com um método Upwind de primeira ordem, que é sabidamente muito difusivo. Para reduzir o erro de difusão espúria introduzido pela interpolação, é de interesse construir interpolantes de ordem mais alta. Uma forma de se construir um tal interpolante, sem usar explicitamente informações em pontos mais distantes do ponto de interpolação, é baseada na utilização da informação dos gradientes no vértice do elemento. Esta informação, por sua vez, pode ser recuperada de forma aproximada, usando a vizinhança do ponto.

Por exemplo, definamos as expressões para as derivadas parciais atrasada e centrada de ϕ em \mathbf{x}_m , respectivamente, por:

$$\overleftarrow{\frac{\partial \phi}{\partial x_m}}|_{(i_m)} = \frac{\phi_{(i_m)} - \phi_{(i_m - \Delta_m)}}{\Delta_m} \quad (5)$$

e

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_m}}|_{(i_m)} = \frac{\phi_{(i_m + \Delta_m)} - \phi_{(i_m - \Delta_m)}}{2\Delta_m}, \quad (6)$$

resultando em

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_m}|_{(i_m)} = \partial_m \phi_{(i_m)} = \frac{1}{2} \left(\overleftarrow{\frac{\partial \phi}{\partial x_m}}|_{(i_m)} + \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_m}}|_{(i_m)} \right), \quad (7)$$

que é uma expressão combinada para a derivada parcial de ϕ em um nó da malha. Haja vista que tanto (5) quanto (6) são usadas para representar a derivada parcial, o termo $\frac{1}{2}$ em (7) serve para equilibrar a duplicação que se obtém com a soma das anteriores.

Usando as Eqs. (3 - 4), construímos um interpolador de terceira ordem dado por:

$$\mathcal{I}_3 \phi(\mathbf{x}_m) = \mathcal{I}_1 \phi(\mathbf{x}_m) + [\mathcal{I}_3^\partial \phi(\mathbf{x}_m)] \Lambda(\mathbf{x}_m), \quad (8)$$

com

$$\mathcal{I}_3^\partial \phi(\mathbf{x}_m) = \{ \partial_m \phi_{(i_m)} \boldsymbol{\xi} - [\partial_m \mathcal{I}_1] \boldsymbol{\xi} \phi(\mathbf{x}_m) \},$$

onde $\boldsymbol{\xi}$ representa uma aresta de um dos símlices e serve para orientar o cálculo de derivadas direcionais, e

$$\Lambda(\mathbf{x}_m) := \frac{1}{2} (\lambda_r \lambda_s + \lambda_r^2 \lambda_s - \lambda_r \lambda_s^2), \quad 1 \leq r, s \leq m+1.$$

A roupagem adquirida pelo operador delineado na Eq. (8), no qual derivadas direcionais sob a aresta dos elementos são proferidas, vem sendo discutida em [3] e [4].

3 Breves Aplicações e Discussão de Resultados

Testamos a Eq. (1) em sua forma $\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + u \frac{\partial \phi}{\partial x_1} = 0$ - conhecida como *equação de Burgers invíscida* - em um domínio retangular bidimensional, com $\mathbf{v} = (u = 1, 0)$. Uma vez que $m = 2$, são estipulados $\mathbf{x}_2 = (x_1, x_2)$, cada K um triângulo regular e $\partial_2 = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}) = (\partial_{x_1}, 0)$. Esta última expressão, do gradiente espacial, impede variações na direção x_2 .

A solução analítica da equação de Burgers supracitada é uma onda que se propaga indefinidamente no tempo com velocidade u , a qual transporta o escalar ϕ ao longo da direção x_2 [1]. As figuras a seguir mostram capturas de uma simulação comparativa executada em programa computacional para simulação de fluidos incompressíveis desenvolvido entre os pesquisadores aqui referidos. Entre elas, destaca-se a interpolação advectiva de alta ordem. Uma onda quadrada de período 2π foi posta como condição inicial para dar uma medida quantitativa dos efeitos dos operadores de interpolação \mathcal{I}_1 e \mathcal{I}_3 ao longo da evolução o temporal. Consequentemente, esta onda assume a posição de uma solução exata.

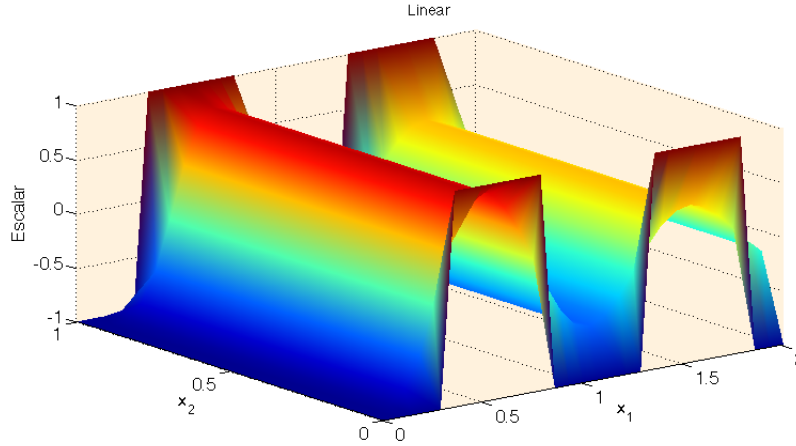


Figura 1: Ação do operador \mathcal{I}_1 .

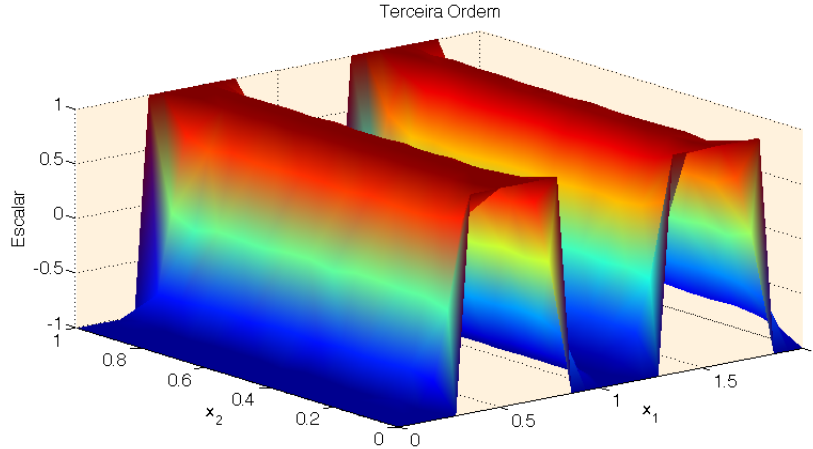


Figura 2: Ação do operador \mathcal{I}_3 .

Como se percebe na Fig. 1, o decaimento do topo da onda interpolada ao longo de x_1 é bastante significativo em relação ao topo permanente da onda quadrada na coordenada $x_2 = 1$ quando apenas uma interpolação linear é executada. Isto propõe que \mathcal{I}_1 é pobre para aproximar e descrever a advecção do escalar ϕ , a qual torna-se muito imprecisa gradativamente com o tempo, incorrendo em um erro que cresce dramaticamente. Por outro lado, a Fig. 2 mostra o mesmo caso discutido, porém, quando uma interpolação cúbica é desempenhada. Neste caso, nota-se um comportamento completamente distinto. O topo da onda interpolada permanece mais próximo do topo da onda quadrada ao longo de x_1 e tende a decair muito mais lentamente, impedindo o crescimento drástico do erro.

4 Conclusão

O mecanismo de interpolação de alta ordem em desenvolvimento tem mostrado resultados satisfatórios e dado motivação à busca de resultados mais arrojados. É notório que o melhor resultado obtido deve-se ao fato do uso das derivadas como termos que corrigem os desvios de variação da quantidade.

Adicionalmente, a abordagem aqui discutida prova-se coerentemente válida para ser estendida ao espaço tridimensional, como já foi apresentado em [3], já que o operador de interpolação age multidirecionalmente. O método Semi-Lagrangeano ainda possui limitações quanto ao tratamento da variação temporal das quantidades escalares, carecendo de maior pesquisa. Tais funções escalares adquirem maior amplitude de uso, por exemplo, quando são agrupadas como funções coordenadas de um campo vetorial tridimensional, em cujo conjunto a velocidade se aninha.

Em termos finais, vale ressaltar a eminente contribuição da teoria da interpolação nas aplicações em fluidos incompressíveis em questão, na qual este desenvolvimento científico essencialmente se baseia.

Referências

- [1] G.W. Griffiths, W.E. Schiesser, “Traveling Wave Analysis of Partial Differential Equation”, Academic Press, Burlington, 2012.
- [2] R.M. Samelson, S. Wiggins, “Lagrangian Transport in Geophysical Jets and Waves - The Dynamical Systems Approach”, Springer, New York, 2000.
- [3] G.C.P. Oliveira, N. Mangiavacchi, J. Pontes, A Semi-Lagrangian Scheme For Fluid Flow Simulations With a Zienkiewicz-Type Finite Element Interpolation, em “Procedimentos do 21st International Congress of Mechanical Engineering” , Natal, RN, Brasil, 2011.
- [4] G.C.P. Oliveira, N. Mangiavacchi, J. Pontes, A Semi-Lagrangian High-Order 3D Interpolation: Survey on a Finite Element a Z-Type Operator, a aparecer.