Universidade Estadual de Campinas

Faculdade de Engenharia Mecânica

Métodos Numéricos de Alta Resolução Aplicados em Problemas de Interação Choque-Turbulência

Aluno:
Brener d'Lélis Oliveira Ramos

Orientador:
Dr. William Roberto Wolf

2016

Sumário

1 Introdução **2**

2 Metodologia **2**

2.1 Condições iniciais . . . 3

2.1.1 Tubo de choque de Sod . . . 3

2.1.2 Problema de Shu-Osher . . . 4

2.2 Condições de contorno . . . 5

2.3 Métodos Numéricos . . . 5

2.3.1 Método de Roe . . . 6

2.3.2 Reconstrução WENO . . . 7

2.3.2.1 Caso escalar . . . 7

2.3.2.2 Desacoplamento das Equações de Euler . . . 9

2.3.3 Método de Roe com Interpolações WENO . . . 9

2.3.3.1 Interpolação WENO . . . 10

2.3.4 Método Compacto com Viscosidade Artificial Localizada . . . 10

2.3.4.1 Método Compacto . . . 10

2.3.4.2 Viscosidade Artificial Localizada . . . 11

2.3.5 Runge Kutta TVD . . . 12

3 Resultados e Discussão **13**

3.1 Tubo de Choque de Sod . . . 13

3.2 Problema de Shu-Osher . . . 18

4 Conclusões **22**

Referências **23**

Perspectivas de continuidade dos trabalhos **24**

Agradecimentos **24**

Apoio **24**

1 Introdução

Escoamentos compressíveis de alta velocidade apresentam gradientes elevados de propriedades que surgem na forma de ondas de choque e superfícies de contato. Ao mesmo tempo, esses escoamentos são usualmente turbulentos e, portanto, ocorre a interação entre as estruturas turbulentas e as ondas de choque. Esse tipo de interação é comum em problemas de camadas-limite supersônicas que se desenvolvem sobre asas de aeronaves ou em bocais de foguetes onde ocorre a formação de ondas de choque internas.

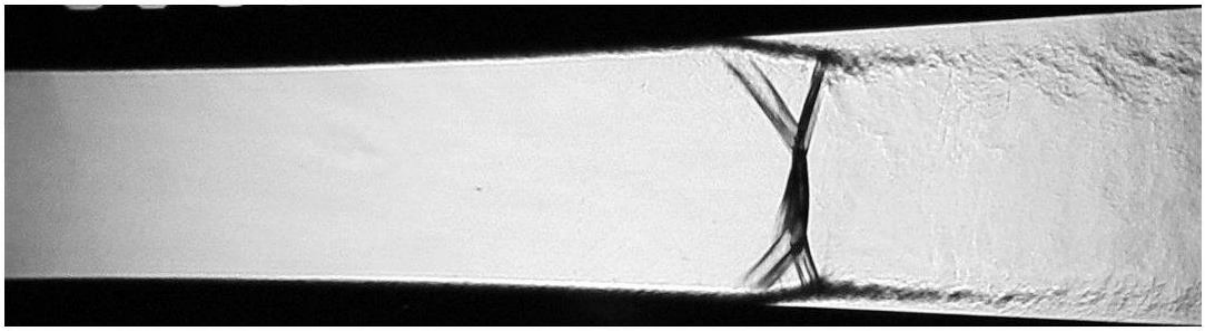


Figura 1: Bocal com iterações choque-turbulência visíveis.

Assim, simulações numéricas de escoamentos compressíveis devem representar com acurácia ambos os mecanismos físicos descritos acima. Nesse trabalho, métodos numéricos de alta resolução serão aplicados na solução de problemas de escoamentos compressíveis envolvendo tanto gradientes elevados de propriedades, representados na forma de ondas de choque e superfícies de contato, quanto estruturas suaves com diversas escalas espaciais e de frequência, comuns em escoamentos turbulentos.

Equações diferenciais parciais não-lineares serão resolvidas com condições iniciais representativas de problemas de interação choque-turbulência. Em particular, o conjunto de equações de Euler será resolvido para representar os efeitos de conservação de massa, quantidade de movimento e energia em escoamentos compressíves. Métodos de diferenças finitas compactos de alta ordem [1, 2] serão aplicados para se resolver essas equações juntamente com filtros compactos para altos números de onda e uma viscosidade artificial [1, 7]. Além disso, métodos essencialmente não-oscilatórios [3, 4], assim como métodos clássicos para captura de choque também serão implementados. As soluções obtidas por todos os métodos serão comparadas com soluções disponíveis na literatura.

Deve-se mencionar que esta proposta de pesquisa está vinculada a um projeto Jovem Pesquisador-FAPESP coordenado pelo professor responsável. Além disso, essa proposta está diretamente alinhada com as necessidades da indústria nacional como, por exemplo, a Embraer, que seria um dos clientes principais da ciência e tecnologia desenvolvidas durante este trabalho. Finalmente, deve-se mencionar que o professor orientador resposável por este projeto de pesquisa tem ampla experiência no desenvolvimento e aplicação de métodos de alta-ordem como os propostos neste trabalho [4, 5].

2 Metodologia

Um código escrito na linguagem Matlab foi feito para resolver as equações de Euler, as quais representam a conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Para resolvê-las, as

mesmas foram agrupadas na seguinte forma

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0, \text{ com } U = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{Bmatrix} \text{ e } F(U) = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ (E+P)u \end{Bmatrix} \tag{1}$$

onde ρ é a densidade, u é a velocidade, E é a energia interna total por unidade de volume e P é a pressão absoluta. U é chamado de vetor de variáveis conservadas, enquanto que F representa o fluxo dessas variáveis. Além disso, é importante salientar que essa equação também pode ser escrita na seguinte forma, já que $F(U)$ é uma função homogênea de grau 1 com respeito a U

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A\frac{\partial U}{\partial x} = 0$$

onde A é um jacobiano $\frac{\partial F}{\partial U}$ obtido a partir da expressão

$$A = S^{-1}C_a^{-1}\Lambda C_a S \tag{2}$$

onde

$$S^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ u & \rho & 0 \\ \alpha u & \rho u & 1/\beta \end{bmatrix}, C_a^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2c^2} & \frac{1}{2c^2} \\ 0 & \frac{1}{2\rho c} & -\frac{1}{2\rho c} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \Lambda = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u+c & 0 \\ 0 & 0 & u-c \end{bmatrix},$$

$$C_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{c^2} \\ 0 & \rho c & 1 \\ 0 & -\rho c & 1 \end{bmatrix}, S = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{u}{\rho} & 0 & 0 \\ \alpha\beta & -u\beta & \beta \end{bmatrix}, \text{ com } \alpha = \frac{u^2}{2} \text{ e } \beta = \gamma - 1$$

OBS: Na expressão acima, Λ equivale à matriz diagonal de autovalores do jacobiano, sendo c a velocidade do som.

Para se alcançar o mesmo número de equações e incógnitas, também foi usada a equação de gás ideal na forma

$$P = (\gamma - 1)(E - \tfrac{1}{2}\rho u^2) \tag{3}$$

onde $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ e foi tomado como 1.4 (ar).

2.1 Condições iniciais

2.1.1 Tubo de choque de Sod

Um problema clássico para se observar o comportamento de métodos numéricos para descontinuidades é o do Tubo de Choque de Sod (*Sod's Shock Tube Problem*). A configuração do problema consiste em dois fluidos iguais, ambos em repouso, em estados termodinâmicos diferentes e separados por um diafragma localizado numa posição x_0 (Figura 2). É considerado que as bordas do tubo estão suficientemente afastadas a ponto de não influenciar nos fenômenos que acontecem no centro do mesmo.

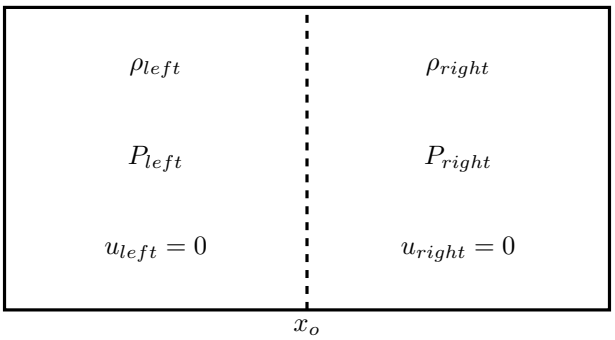


Figura 2: Ilustração do Tubo de Choque antes do rompimento do diafragma.

No instante $t = 0$, esse diafragma é rompido e com o passar do tempo se formam uma onda de choque, uma superfície de contato e uma onda de expansão (Figura 3), as quais possuem solução analítica.

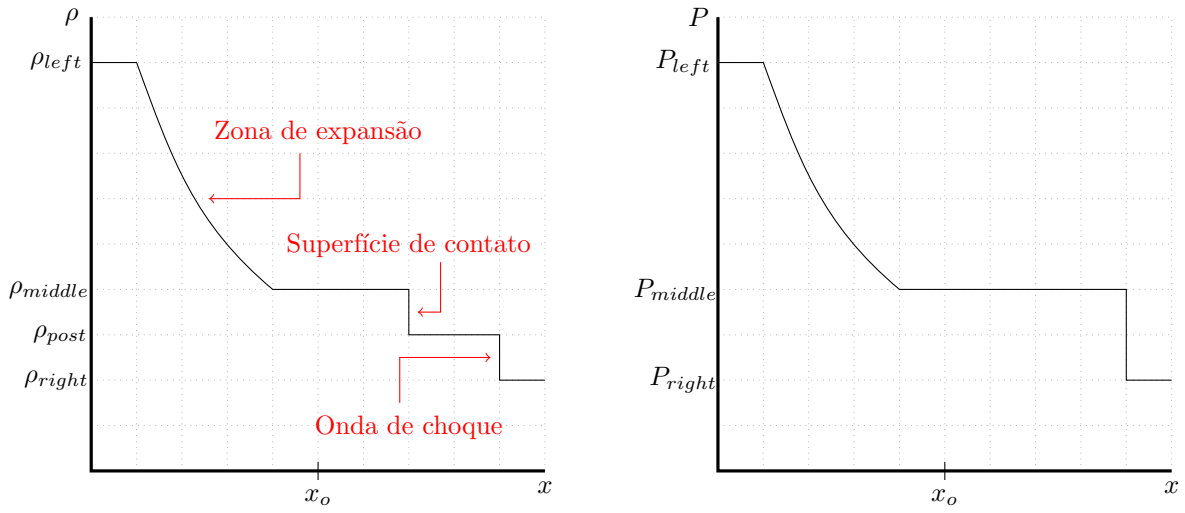


Figura 3: Comportamento das variáveis ρ e P para um $t > 0$ admitindo que $\rho_{left} > \rho_{right}$ e $P_{left} > P_{right}$.

Nos testes feitos para essa condição incial, $x \in [-5, 5]$ com 101 pontos, $x_o = 0$, $\rho_{right} = 0.125$, $P_{right} = 0.1$, $P_{left} = P_{right} * Ratio$ e $\rho_{right} = P_{right}$. Foram testados três valores de $Ratio$: 5, 10 e 20. Além disso, esse fenômeno possui solução analítica, a qual pode ser encontrada em [11]. Foram feitas simulações até o instante de tempo $t = 2$.

2.1.2 Problema de Shu-Osher

Uma configuração que permite observar o comportamento de métodos numéricos numa situação onde há interação entre descontinuidades e oscilações suaves é o problema de Shu-Osher. A condição inicial do problema se caracteriza por uma onda de choque com densidade ρ_{left}, velocidade u_{left} e pressão P_{left} entrando em contato num ponto x_o com um campo oscilatório de densidade, em repouso e com pressão P_{right} constante.

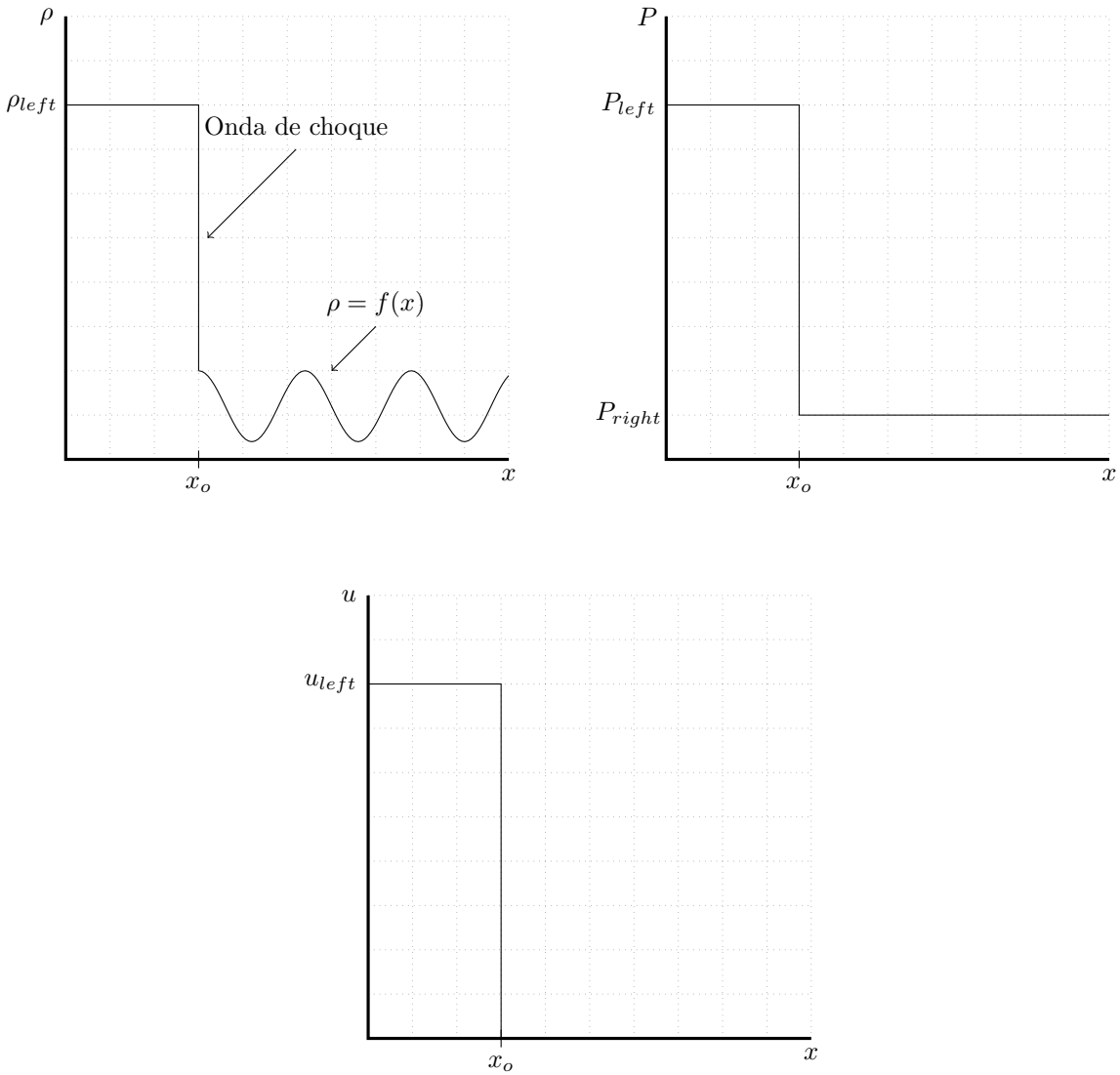


Figura 4: Condições iniciais da densidade, pressão e velocidade no problema de Shu-Osher.

O caso implementado nesse trabalho possui $x \in [0, 1]$, $x_o = \frac{1}{8}$, $\rho_{left} = 3.857143$, $f(x) = 1 + 0.2sin(16\pi x)$, $P_{left} = 10.3333$, $P_{right} = 1$ e $u_{left} = 2.629369$. Devido à complexidade do fenômeno, não existe uma solução analítica para tal. As simulações foram feitas com 3 malhas de tamanhos diferentes: 200 pontos, 400 pontos e 1000 pontos. As simulações foram feitas até o instante de tempo $t = 0.178$.

2.2 Condições de contorno

Como pode ser visto a partir da física dos problemas estudados, as soluções obtidas não terão influência das bordas do domínio computacional. Por esse motivo, condições de contorno constantes foram adotadas para todos os métodos implementados.

2.3 Métodos Numéricos

Nessa seção, serão apresentados todos os métodos numéricos utilizados nesse trabalho, os quais foram:

- Derivada espacial

- Separação dos vetores de diferença de fluxos de Roe (*Roe Flux Difference Vector Splitting Method*).
- Reconstrução WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) de 5º ordem com separação de fluxos a partir dos autovalores dos jacobianos.
- Separação dos vetores de diferença de fluxos de Roe mesclado com uma interpolação WENO de 5º ordem.
- Método compacto de 10º ordem com viscosidade artificial localizada.

• Derivada temporal

- Runge Kutta TVD (*Total Variational Diminishing*) de 3º ordem.

2.3.1 Método de Roe

Por uma questão de organização e praticidade, chamará-se o método de separação dos vetores de diferença de fluxos de Roe de método de Roe. Esse método é bastante utilizado para simulações numéricas que envolvem choques e por essa razão ele será implementado para fornecer uma base de comparação para os outros métodos. Para utilizar esse esquema, é necessário que as equações estejam na forma conservativa abaixo

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = 0 \tag{4}$$

Dessa forma, o objetivo desse método é calcular os valores do fluxo F nas interfaces $i + \frac{1}{2}$. Isso é obtido a partir da expressão

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{F_i + F_{i+1}}{2} - \frac{1}{2}|\hat{A}_{i+\frac{1}{2}}|(U_{i+1} - U_i)$$
$$\text{onde } |\hat{A}_{i+\frac{1}{2}}| = \hat{A}^+_{i+\frac{1}{2}} - \hat{A}^-_{i+\frac{1}{2}}$$

o que pode ser interpretado como um método centrado com um termo de dissipação.

Para calcular $\hat{A}_{i+\frac{1}{2}}$, utiliza-se (2) numa forma modificada

$$\hat{A}^{\pm}_{i+\frac{1}{2}} = S^{-1}_{i+\frac{1}{2}} C^{-1}_{a_{i+\frac{1}{2}}} \Lambda^{\pm}_{i+\frac{1}{2}} S_{i+\frac{1}{2}} C_{a_{i+\frac{1}{2}}}$$

onde $S^{-1}_{i+\frac{1}{2}}, C^{-1}_{a_{i+\frac{1}{2}}}, \Lambda^{\pm}_{i+\frac{1}{2}}, S_{i+\frac{1}{2}}$ e $C_{a_{i+\frac{1}{2}}}$ são calculados a partir de

$$\hat{\rho}_{i+\frac{1}{2}} = \sqrt{\rho_i \rho_{i+1}}$$
$$\hat{u}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\rho_i} u_i + \sqrt{\rho_{i+1}} u_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}$$
$$\hat{h}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\rho_i}\dfrac{E_i + P_i}{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}\dfrac{E_{i+1} + P_{i+1}}{\rho_{i+1}}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}}$$
$$\hat{c}_{i+\frac{1}{2}} = \sqrt{(\gamma - 1)(\hat{h}_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}\hat{u}_{i+\frac{1}{2}^2})}$$

É importante notar que Λ^+ corresponde à matriz de autovalores valores positivos e Λ^- à matriz de autovalores negativos.

No entanto, o método de Roe cria pequenos "choques" puramente numéricos em regiões de Mach 1, como em zonas de expansão. Por isso é necessário uma correção nos autovalores quando estes tendem a zero (regiões de Mach 1). Dessa forma, foi adotada uma fórmula para correção de entropia modificada a partir daquela proposta em [8].

$$\begin{cases} \epsilon = 20\, max[0, (\hat{\lambda} - \lambda^L), (\lambda^R - \hat{\lambda})] \\ \hat{\lambda}_{new} = \dfrac{\hat{\lambda}^2 + \epsilon^2}{2\epsilon} \qquad |\hat{\lambda}| < \epsilon \end{cases}$$

onde $\hat{\lambda}$ são os autovalores calculados a partir das médias de Roe, λ^L são os autovalores calculados no ponto i e λ^R são os autovalores calculados no ponto $i+1$.

2.3.2 Reconstrução WENO

2.3.2.1 Caso escalar

Para realizar a reconstrução WENO, é necessário que as equações estejam numa forma conservativa semelhante a (4). Supondo um caso escalar

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = 0$$

onde $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}$ corresponde a um fluxo numérico consistente com o fluxo físico f e é Lipshitz contínuo.

Para obter uma forma de calcular $\hat{f}$, parte-se da função implícita $h(\xi)$

$$\frac{1}{\Delta x}\int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} h(\xi)d\xi = f(u) \tag{5}$$

o que leva a

$$\frac{1}{\Delta x}[h(x_{i+\frac{1}{2}}) - h(x_{i-\frac{1}{2}})] = \frac{\partial f(u)}{\partial x}\Big|_{x=x_i}$$

Dessa maneira, $h_{i+\frac{1}{2}} = \hat{f}_{i+\frac{1}{2}}$. Logo, é necessário obter um polinômio $p(x) = h(x) + O(\Delta x^k)$. Para efetuar esse cálculo com a ordem de precisão desejada, consideram-se k pontos, distribuídos em $r = \frac{k+1}{2}$ pontos por stencil S. Nesse trabalho $k = 5$ e a malha utilizada é uniforme, logo $r = 3$ e o cálculo de $p(x_{i+\frac{1}{2}})$ e $p(x_{i-\frac{1}{2}})$ deve ser feito utilizando os stencils da figura abaixo.

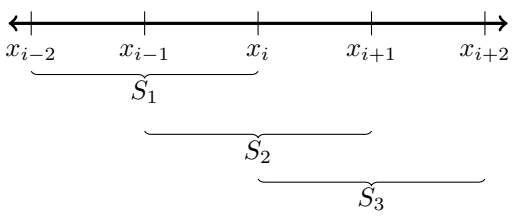


Figura 5: Stencils usados para uma reconstrução WENO de 5º ordem de precisão.

Para realizar-se as interpolações $p_l(x_{i+\frac{1}{2}})$ e $p_l(x_{i-\frac{1}{2}})$, pode-se recorrer à tabela de coeficientes cedida em [9], pois nesse trabalho as malhas são uniformes. Para $k = 5$

$$p_1(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{3}f_{i-2} - \frac{7}{6}f_{i-1} + \frac{11}{6}f_i \qquad p_1(x_{i-\frac{1}{2}}) = -\frac{1}{6}f_{i-2} + \frac{5}{6}f_{i-1} + \frac{1}{3}f_i$$
$$p_2(x_{i+\frac{1}{2}}) = -\frac{1}{6}f_{i-1} + \frac{5}{6}f_i + \frac{1}{3}f_{i+1} \qquad p_2(x_{i-\frac{1}{2}}) = -\frac{1}{3}f_{i-1} + \frac{5}{6}f_i - \frac{1}{6}f_{i+1}$$
$$p_3(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{3}f_i + \frac{5}{6}f_{i+1} - \frac{1}{6}f_{i+2} \qquad p_3(x_{i-\frac{1}{2}}) = \frac{11}{6}f_i - \frac{7}{6}f_{i+1} + \frac{1}{3}f_{i+2}$$

Como existem três stencils, serão obtidos três polinômios $p_1(x), p_2(x)$ e $p_3(x)$, os quais fornecem $p(x_{i+\frac{1}{2}})$ e $p(x_{i-\frac{1}{2}})$ a partir de

$$p(x_{i+\frac{1}{2}}) = w_1 p_1(x_{i+\frac{1}{2}}) + w_2 p_2(x_{i+\frac{1}{2}}) + w_3 p_3(x_{i+\frac{1}{2}})$$
$$p(x_{i-\frac{1}{2}}) = w_1^* p_1(x_{i-\frac{1}{2}}) + w_2^* p_2(x_{i-\frac{1}{2}}) + w_3^* p_3(x_{i-\frac{1}{2}})$$

onde w_l e w_l^* são coeficientes que fornecem uma média ponderada das interpolações realizadas. Para $k = 5$, caso a função seja contínua em todos os stencils, os coeficientes da equação acima devem valer $w_1 = \frac{1}{10}$, $w_2 = \frac{3}{5}$, $w_3 = \frac{3}{10}$ e $w_l^* = w_{r-l+1}$ para que $p(x) = h(x) + O(\Delta x^5)$. Caso existam descontinuidades num stencil l, w_l e w_l^* deverão tender a zero, o que diminui a ordem de precisão do método mas evita oscilações numéricas. Assim, w_l e w_l^* são calculados a partir de

$$w_l = \frac{\alpha_l}{\sum_{s=1}^{r} \alpha_s} \qquad w_l^* = \frac{\alpha_l^*}{\sum_{s=1}^{r} \alpha_s^*}$$
$$\alpha_l = \frac{d_l}{(\epsilon + \beta_l)^2} \qquad \alpha_l^* = \frac{d_l^*}{(\epsilon + \beta_l)^2}$$
$$\beta_l = \sum_{j=1}^{r} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Delta x^{2j-1} \Big(\frac{\partial^j p_l(x)}{\partial^j x} \Big)^2 dx$$

onde d_l e d_l^* são os coeficientes que fornecem a precisão desejada quando a função é contínua em todos os stencils (para $k = 5$, $d_1 = \frac{1}{10}$, $d_2 = \frac{3}{5}$, $d_3 = \frac{3}{10}$ e $d_l^* = d_{r-l+1}$), ϵ é um número muito pequeno, cujo intuito é evitar que exista uma divisão por zero (nesse trabalho $\epsilon = 1e-8$) e β_l é um indicador de oscilação, o qual não passa da soma dos quadrados das normas L^2 em escala de todas as derivadas da interpolação polinomial $p_l(x)$ no intervalo $(x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$. Caso exista uma descontinuidade num stencil l, β_l deverá ser um número muito grande, o que fará com que w_l tenda a zero. Em [9], esses indicadores foram fornecidos explicitamente

$$\beta_1 = \frac{13}{12}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i)^2 + \frac{1}{4}(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)$$
$$\beta_2 = \frac{13}{12}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(f_{i-1} - f_{i+1})$$
$$\beta_3 = \frac{13}{12}(f_i - 2f_{i+1} + f_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(f_i - 4f_{i+1} + 3f_{i+2})$$

É importante notar que, utilizando a configuração dos stencils acima, $p(x_{i+\frac{1}{2}}) = h(x_{i+\frac{1}{2}})^L$, visto que o centro da molécula de cálculo está à esquerda da face $i+\frac{1}{2}$. Analogamente, $p(x_{i-\frac{1}{2}}) = h(x_{i-\frac{1}{2}})^R$, pois o centro da molécula de cálculo está à direita da face $i - \frac{1}{2}$. Dessa forma, por uma questão de estabilidade deve-se efetuar uma separação de fluxos

$$f = f^+ + f^-$$

onde f^+ é o fluxo que "sopra da esquerda para direita" e f^- na direção oposta. Assim, a reconstrução WENO é feita nos fluxos f^+ e f^-, de modo que f^+ será usado para calcular $h(x_{i+\frac{1}{2}})^L$ e f^- para $h(x_{i+\frac{1}{2}})^R$. Ao final dos cálculos, tem-se $h(x_{i+\frac{1}{2}}) = h(x_{i+\frac{1}{2}})^L + h(x_{i+\frac{1}{2}})^R = \hat{f}(x_{i+\frac{1}{2}})$. Mais detalhes sobre a separação de fluxos serão apresentados na seção a seguir.

2.3.2.2 Desacoplamento das Equações de Euler

Na seção anterior foi apresentada a metodologia para realizar a reconstrução WENO pra um caso escalar. Para poder realizar esse procedimento nas equações de Euler, estas devem ser desacopladas, tomando a forma (6). Ao final do procedimento, existirão três equações independentes umas das outras e então a reconstrução WENO poderá ser feita em cada uma delas usando a metodologia apresentada anteriormente.

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} = \frac{\partial G}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial G}{\partial x} = 0 \tag{6}$$

Para desacoplar as equações de Euler utilizando uma lógica de diferenças finitas, seguem-se os passos

1. Calculam-se os autovetores da esquerda R_i^{-1} e da direita R_i do jacobiano $A_{i+\frac{1}{2}} = A(\frac{U_i+U_{i+1}}{2})$
2. Calcula-se o vetor de variáveis características $G_i = R_i^{-1}U_i$
3. Calculam-se os vetores de fluxos característicos W_i^+ e W_i^- a partir do procedimento abaixo, feito para cada autovalor.
   (a) Se o autovalor $\lambda > 0$, então $w^+ = \lambda g$ e $w^- = 0$
   (b) Caso contrário, $w^- = \lambda g$ e $w^+ = 0$

Dessa maneira, utiliza-se a reconstrução WENO em cada componente dos fluxos W^+ e W^-, obtendo os fluxos numéricos $\hat{W}^+_{i+\frac{1}{2}}$ e $\hat{W}^-_{i+\frac{1}{2}}$. Os fluxos numéricos no campo real são obtidos a partir da transformação $\hat{F}^+_{i+\frac{1}{2}} = R_i\hat{W}^+_{i+\frac{1}{2}}$ e $\hat{F}^-_{i+\frac{1}{2}} = R_i\hat{W}^-_{i+\frac{1}{2}}$, finalizando o esquema.

2.3.3 Método de Roe com Interpolações WENO

Uma abordagem proposta pelos autores desse trabalho foi a criação de um método híbrido, o qual consiste num método de Roe que utiliza valores interpolados a partir do algoritmo WENO. Logo, será necessário utilizar a forma conservativa (4). Antes de prosseguir, é importante salientar que existe uma diferença entre o polinômio obtido para uma reconstrução WENO e para uma interpolação WENO. O primeiro satisfaz (5) enquanto que o segundo consiste em interpolar as **variáveis conservadas** u nas interfaces $i + \frac{1}{2}$, obtendo $U^R_{i+\frac{1}{2}}$ e $U^L_{i+\frac{1}{2}}$ de modo que

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{F^R_{i+\frac{1}{2}} + F^L_{i+\frac{1}{2}}}{2} - \frac{1}{2}|\hat{A}_{i+\frac{1}{2}}|(U^R_{i+\frac{1}{2}} - U^L_{i+\frac{1}{2}})$$

onde todos os termos com os sobrescritos ^{L} e ^{R} são obtidos a partir do vetor de variáveis conservadas interpolado. Assim, as médias de Roe usadas em $|\hat{A}_{i+\frac{1}{2}}|$ se tornam

$$\hat{\rho}_{i+\frac{1}{2}} = \sqrt{\rho^L_{i+\frac{1}{2}}\rho^R_{i+\frac{1}{2}}}$$

$$\hat{u}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\rho^L_{i+\frac{1}{2}}}u^L_{i+\frac{1}{2}} + \sqrt{\rho^R_{i+\frac{1}{2}}}u^R_{i+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\rho^L_{i+\frac{1}{2}}} + \sqrt{\rho^R_{i+\frac{1}{2}}}}$$

$$\hat{h}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\rho^L_{i+\frac{1}{2}}}\dfrac{E^L_{i+\frac{1}{2}} + P^L_{i+\frac{1}{2}}}{\rho^L_{i+\frac{1}{2}}} + \sqrt{\rho^R_{i+\frac{1}{2}}}\dfrac{E^R_{i+\frac{1}{2}} + P^R_{i+\frac{1}{2}}}{\rho^R_{i+\frac{1}{2}}}}{\sqrt{\rho^L_{i+\frac{1}{2}}} + \sqrt{\rho^R_{i+\frac{1}{2}}}}$$

$$\hat{c}_{i+\frac{1}{2}} = \sqrt{(\gamma-1)(\hat{h}_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}\hat{u}^2_{i+\frac{1}{2}})}$$

2.3.3.1 Interpolação WENO

Já que as malhas computacionais utilizadas nesse trabalho são uniformes, pode-se efetuar a interpolação a partir de coeficientes constantes. Dessa forma, o procedimento se assemelha àquele usado para obter os polinômios usados na reconstrução WENO, rejeitando stencils onde a função a ser interpolada é descontínua, com as seguintes diferenças

- Os valores de d_r e d^*_r são diferentes para satisfazer a ordem de precisão desejada.
- As expressões para os indicadores de oscilação β_r também são diferentes para satisfazer a ordem de precisão desejada.
- Na reconstrução WENO, o *input* do algoritmo da interpolação polinomial eram fluxos f^+ ou f^-, enquanto que no método apresentado aqui, ele será uma variável conservada u.

Para o caso $k = 5$, essas expressões foram fornecidos explicitamente em [10]. Assim, usando a mesma notação daquela da seção 2.3.2, $d_1 = \frac{1}{16}$, $d_2 = \frac{5}{8}$, $d_3 = \frac{5}{16}$ e $d^*_l = d_{r-l+1}$ com

$$\beta_1 = \frac{1}{3}(4u^2_{i-2} - 19u_{i-2}u_{i-1} + 25u^2_{i-1} + 11u_{i-2}u_i - 31u_{i-1}u_i + 10u^2_i)$$

$$\beta_3 = \frac{1}{3}(4u^2_{i-1} - 13u_{i-1}u_i + 13u^2_i + 5u_{i-1}u_{i+1} - 13u_iu_{i+1} + 4u^2_{i+1}$$

$$\beta_3 = \frac{1}{3}(10u^2_i - 31u_iu_{i+1} + 11u^2_{i+1} + 25u_iu_{i+2} - 19u_{i+1}u_{i+2} + 4u^2_{i+2})$$

OBS: Todos os coeficientes não mostrados aqui são calculados usando o mesmo procedimento da seção 2.3.2.

2.3.4 Método Compacto com Viscosidade Artificial Localizada

2.3.4.1 Método Compacto

Abaixo está descrita a formulação para um método Compacto geral. Note que devido à molécula de cálculo ser centrada, o método não possuirá dissipação numérica [2].

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = c\frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6\Delta x} + b\frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4\Delta x} + a\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \tag{7}$$

onde as constantes β, α, c, b e a são calculadas a partir da expansão em série de Taylor de (7). Para um método de 10º ordem de precisão, foi mostrado em [1] que

$$\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{20}, a = \frac{17}{12}, b = \frac{101}{150}, c = \frac{1}{100}$$

Assim, primeiro é calculado o lado direito de (7) para cada i e então um sistema linear, cuja solução fornece f_i' em todo o domínio, é resolvido. No entanto, apesar de sua alta ordem de resolução, quando esse método se depara com descontinuidades, é possível observar o fenômeno de Gibbs devido à falta de dissipação numérica.

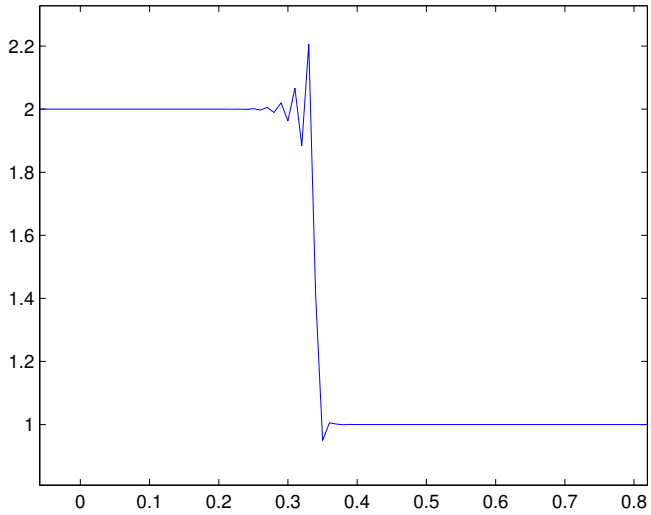


Figura 6: Exemplo do fenômeno de Gibbs.

Dessa maneira, uma viscosidade artificial deve ser adicionada nas regiões de gradientes elevados para evitar oscilações numéricas.

2.3.4.2 Viscosidade Artificial Localizada

As equações de Euler não possuem termos viscosos e por isso é possível ocorrer o fenômeno de Gibbs em métodos numéricos centrados. Logo, uma viscosidade artificial adicionada somente em regiões de elevados gradientes foi proposta em [7]. Antes de apresentá-la, é necessário analisar a equação de Navier-Stokes 1-D com calores específicos constantes disposta abaixo.

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{Bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x}\begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P - \tau \\ (E + P - \tau)u + q \end{Bmatrix} \tag{8}$$

onde $\tau = \mu u' + (\beta - \frac{2}{3}\mu u')$ é o tensor de viscosidade e q é o vetor de fluxo de condução de calor. μ e β representam a viscosidade dinâmica e cinemática, respectivamente. Para um caso adiabático, uma comparação entre (1) e (8) deixa claro que o termo dissipativo da equação de Navier-Stokes é τ.

Dessa forma, para se resolver as equações de Euler usando métodos Compactos, μ e β deverão ser não-nulos em regiões com descontinuidades e nulos em todas as outras. Isso é obtido a partir de

$$\mu = \mu_{artificial} = C_\mu^r \eta_r, \qquad \beta = \beta_{artificial} = C_\beta^r \eta_r, \qquad \eta_r = \Delta x^{r+2} \overline{\rho |\nabla^r S|}$$

onde C_μ^r e C_β^r são constantes especificadas pelo usuário, ∇ é um operador poliarmônico e $\overline{f}$ simboliza um filtro Gaussiano calculado a partir de

$$\overline{f}_i = \frac{3565}{10368} f_i + \frac{3091}{12690}(f_{i-1}+f_{i+1}) + \frac{1997}{25920}(f_{i-2}+f_{i+2}) + \frac{149}{12960}(f_{i-3}+f_{i+3}) + \frac{107}{103680}(f_{i-4}+f_{i+4})$$

Esse procedimento é feito após cada marcha completa no tempo. No entanto, para garantir a estabilidade durante as sub-iterações do Runge-Kutta, um filtro compacto de oitava ordem é usado a cada sub-iteração. A expressão para tal está disposta abaixo.

$$\beta \hat{f}_{i-2} + \alpha \hat{f}_{i-1} + \hat{f}_i + \alpha \hat{f}_{i+1} + \beta \hat{f}_{i+2} = a f_i + \frac{b}{2}(f_{i-1}+f_{i+1}) + \frac{c}{2}(f_{i-2}+f_{i+2}) + \frac{d}{2}(f_{i-3}+f_{i+3}) + \frac{e}{2}(f_{i-4}+f_{i+4})$$

onde $\hat{f}$ é a variável filtrada e

$$\alpha = 0.66624, \qquad \beta = 0.16688, \qquad a = 0.99965, \qquad \frac{b}{2} = 0.66652$$
$$\frac{c}{2} = 0.16674, \qquad \frac{d}{2} = 4e{-}5, \qquad \frac{e}{2} = -5e{-}6$$

2.3.5 Runge Kutta TVD

A derivada temporal em todos os casos simulados foi resolvida a partir de um esquema Runge-Kutta TVD de 3º ordem, o qual foi escolhido devido a sua estabilidade e por ser amplamente empregado para resolução de equações diferenciais hiperbólicas. A dedução desse método não faz parte do escopo desse trabalho e sua expressão final, para um CFL=1 e uma função f num instante n, está disposta abaixo.

$$\begin{aligned}
f^{(1)} &= f_n + \Delta t L(f_n) \\
f^{(2)} &= \frac{3}{4} f_n + \frac{1}{4} f_{(1)} + \frac{1}{4} \Delta t L(f_{(1)}) \\
f^{n+1} &= \frac{1}{3} f_n + \frac{2}{3} f_{(2)} + \frac{2}{3} \Delta t L(f_{(2)}) \\
L(f) &= -\frac{\partial f}{\partial x}
\end{aligned}$$

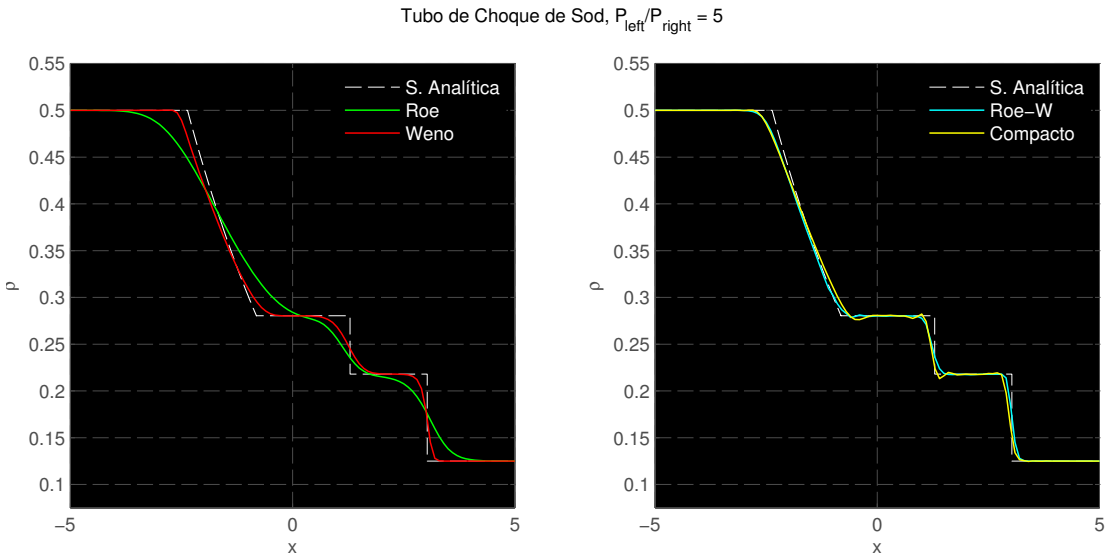
O passo no tempo Δt foi calculado a partir do parâmetro CFL, inserido pelo usuário, da seguinte forma

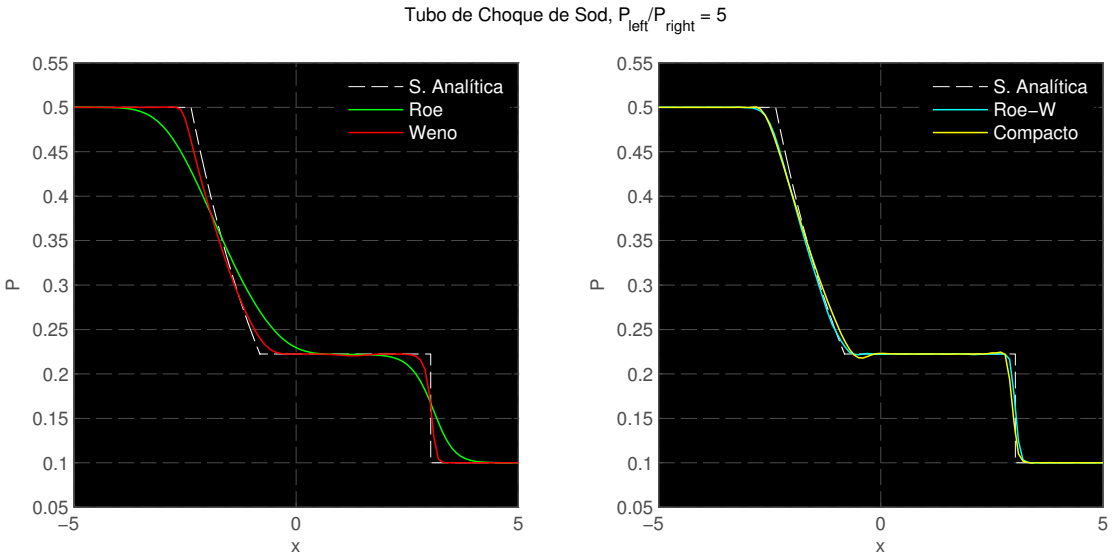
$$\Delta t = CFL \frac{\Delta x}{c_{left}} \qquad \text{(Tubo de Choque de Sod)}$$
$$\Delta t = CFL \frac{\Delta x}{u_{left} + c_{left}} \qquad \text{(Problema de Shu-Osher)}$$

3 Resultados e Discussão

Ao todo, foram feitas 6 simulações com parâmetros diferentes: 3 para o problema de Shu-Osher, variando-se o refino da malha e 3 para o tubo de choque de Sod, variando-se a diferença entre as pressões e densidades iniciais. Os resultados estão dispostos a seguir juntamente com todos os *inputs* utilizados. Nas legendas, *Roe* equivale ao método de Roe, $Weno$ à reconstrução WENO, $Roe-W$ ao método de Roe com interpolação WENO e Compacto ao método Compacto com viscosidade artificial localizada. Os resultados abaixo fornecem as soluções da densidade (ρ), pressão (P), velocidade (u) e número de Mach (M).

3.1 Tubo de Choque de Sod





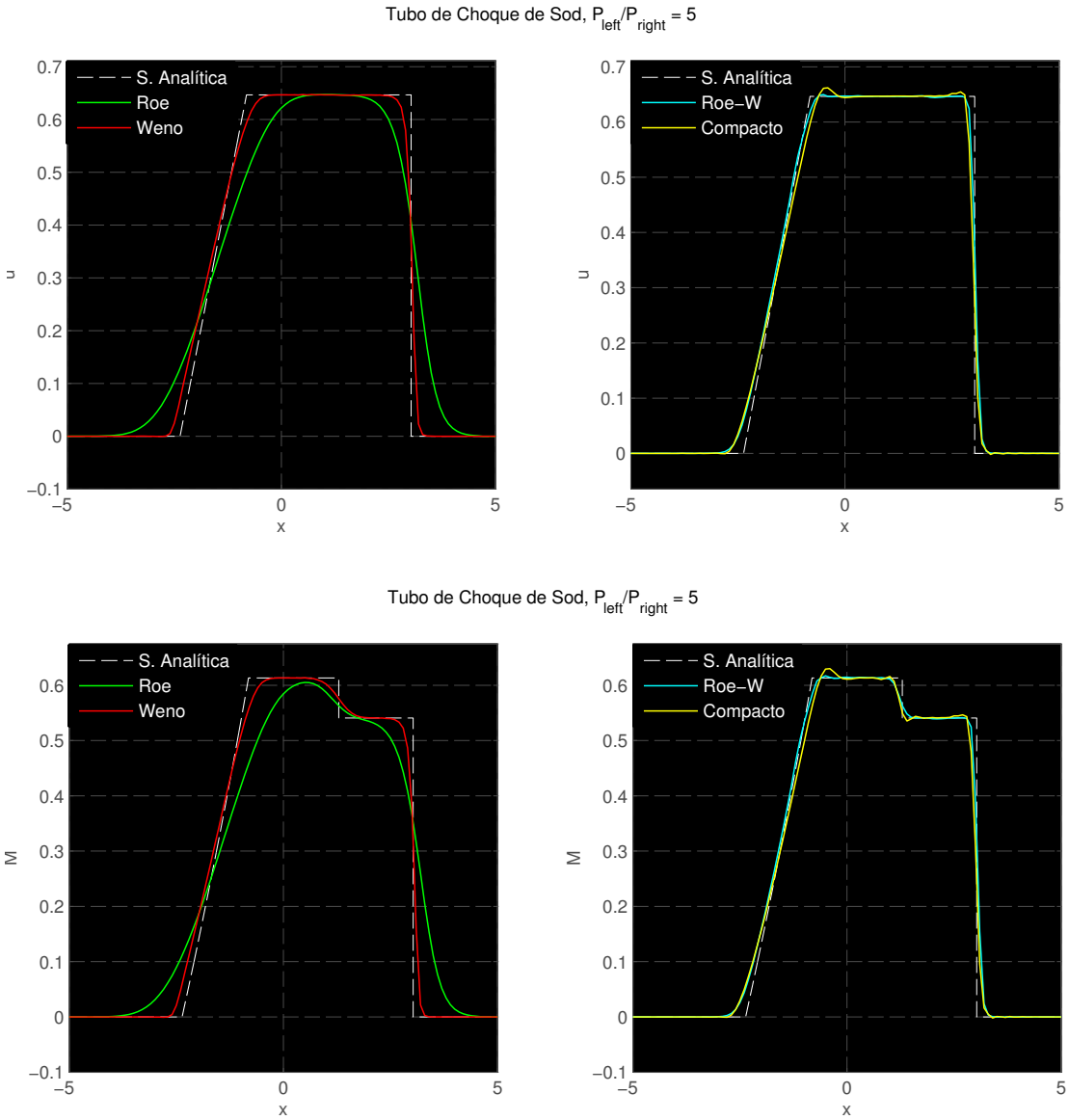
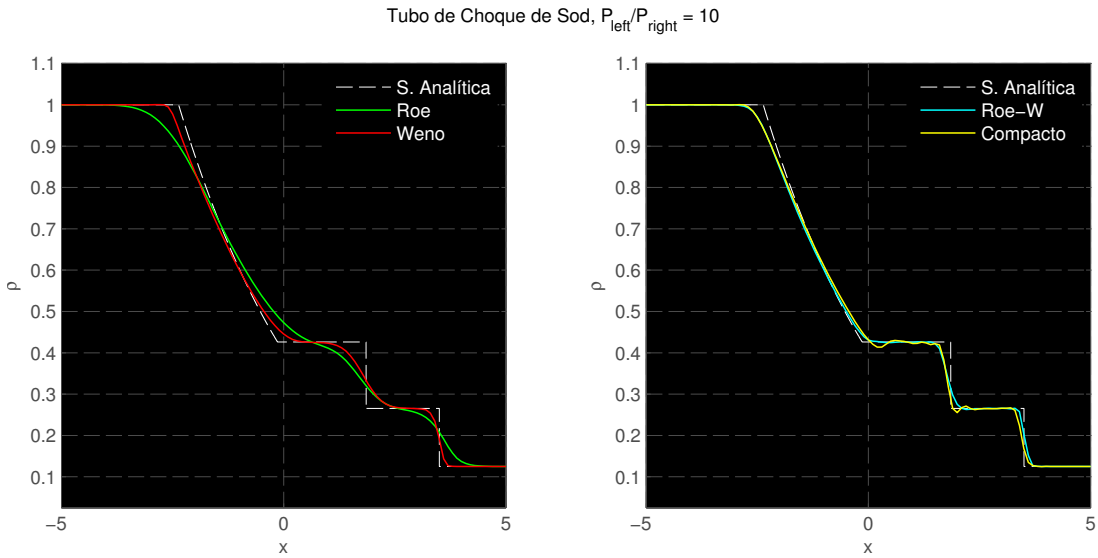


Figura 7: Resultados das simulações utilizando $CFL = 0.5$ para Roe, WENO, Roe-W e $CFL = 0.01$ para Compacto ($C_\mu^4 = 35$ e C_β^4=0).



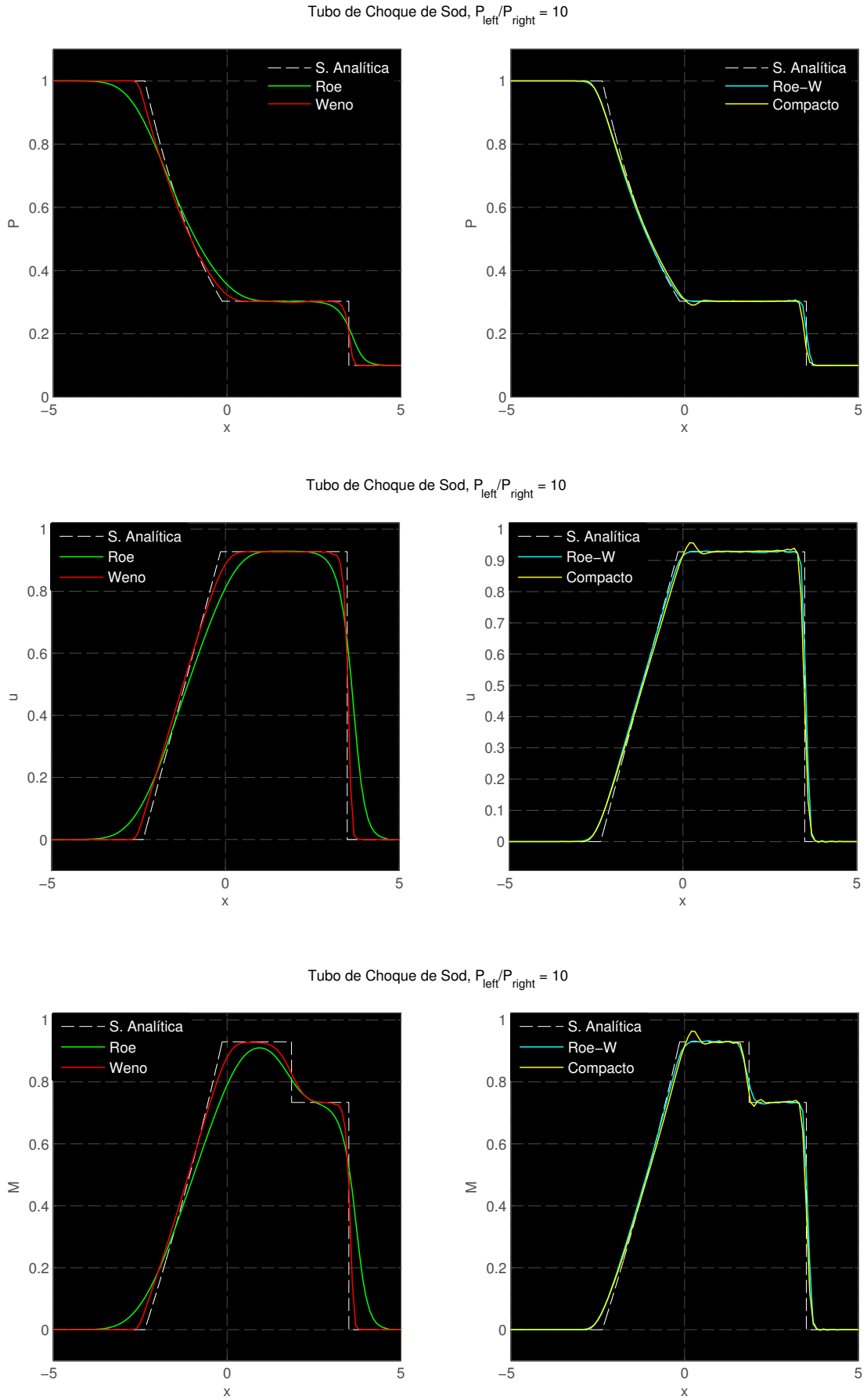
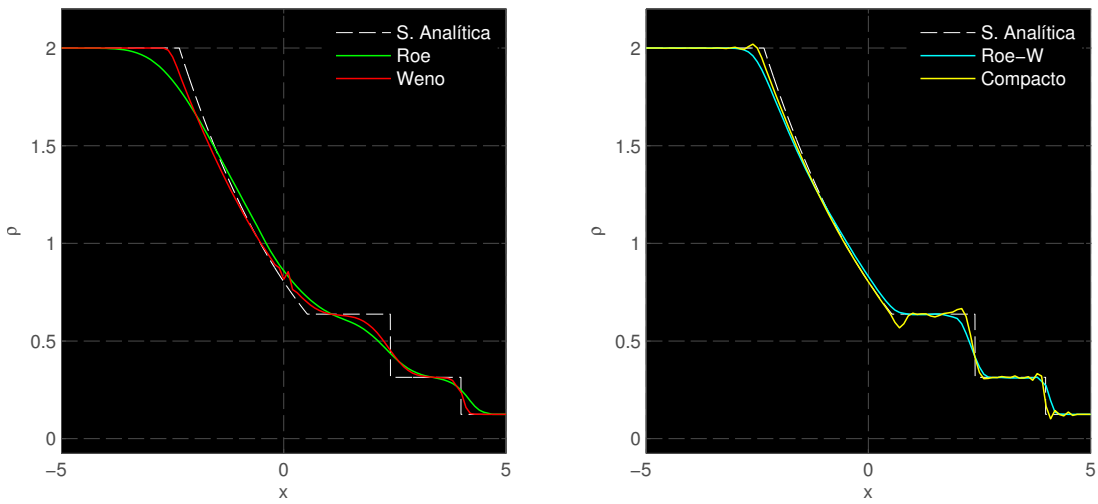
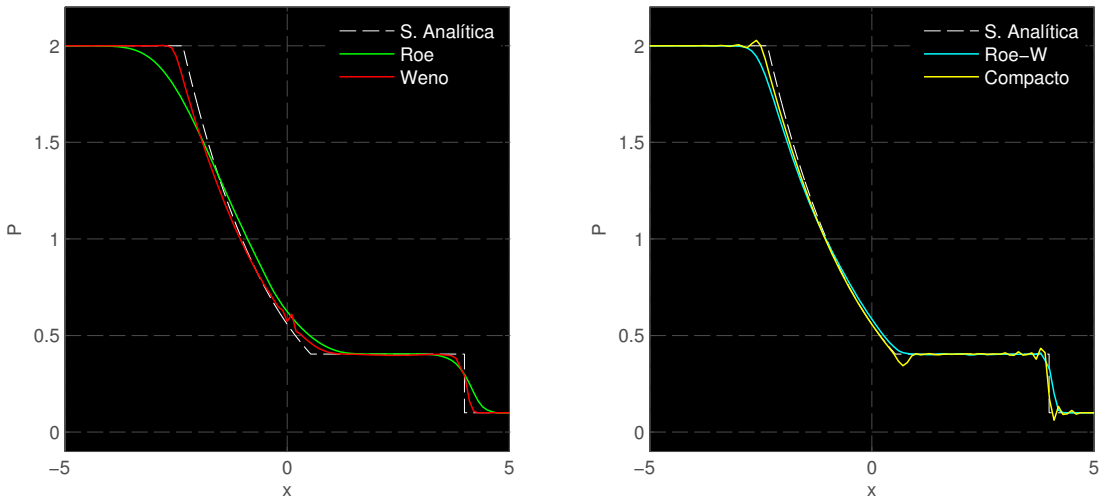


Figura 8: Resultados das simulações utilizando $CFL = 0.5$ para Roe, WENO, Roe-W e $CFL = 0.01$ para Compacto ($C_\mu^4 = 35$ e C_β^4=0).

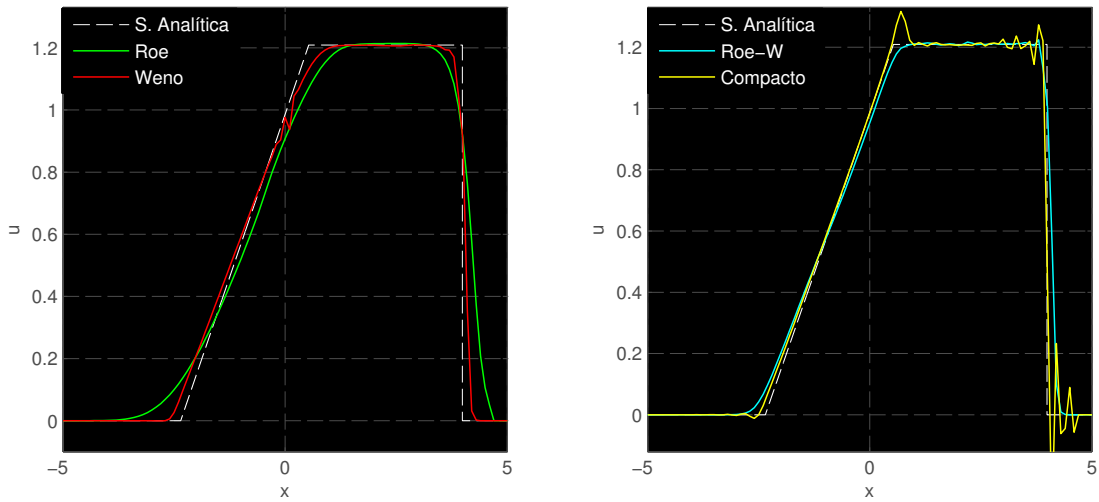
Tubo de Choque de Sod, $P_{left}/P_{right} = 20$



Tubo de Choque de Sod, $P_{left}/P_{right} = 20$



Tubo de Choque de Sod, $P_{left}/P_{right} = 20$



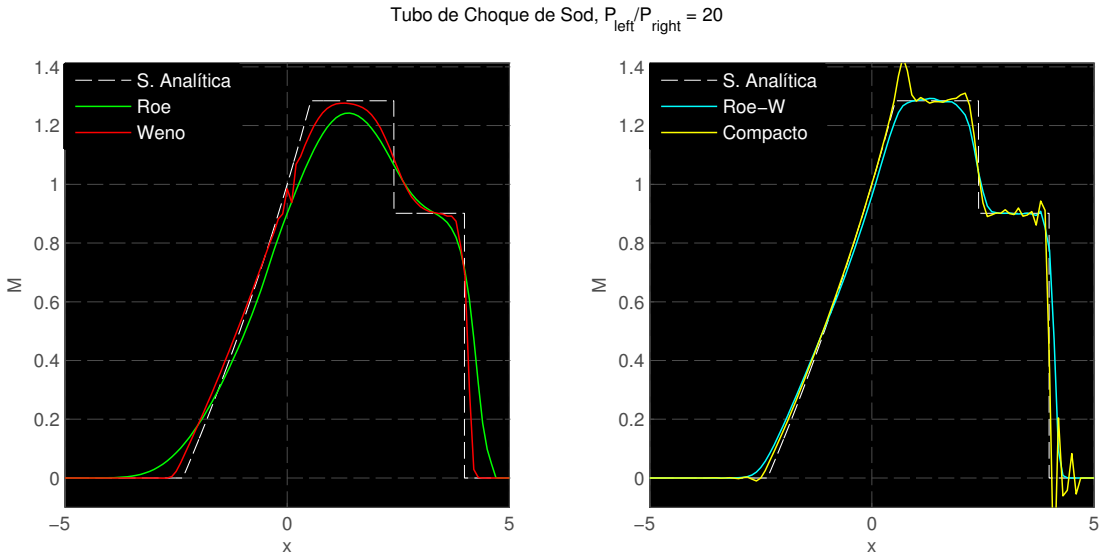


Figura 9: Resultados das simulações utilizando $CFL = 0.5$ para Roe, WENO, Roe-W e $CFL = 0.01$ para Compacto ($C_\mu^4 = 0.1.$ e C_β^4=0).

Após analisar os resultados das simulações, percebeu-se que o método de Roe é o mais barato computacionalmente, mas também é o mais dissipativo. Claramente sua aplicação é restrita a fenômenos com choques bastante elevados e malhas com certo grau de refinamento. Além disso ele não apresenta nenhum tipo de oscilação numérica, sendo um método bastante estável. Outro ponto que vale a pena citar diz respeito a sua facilidade de implementação quando comparado aos outros métodos.

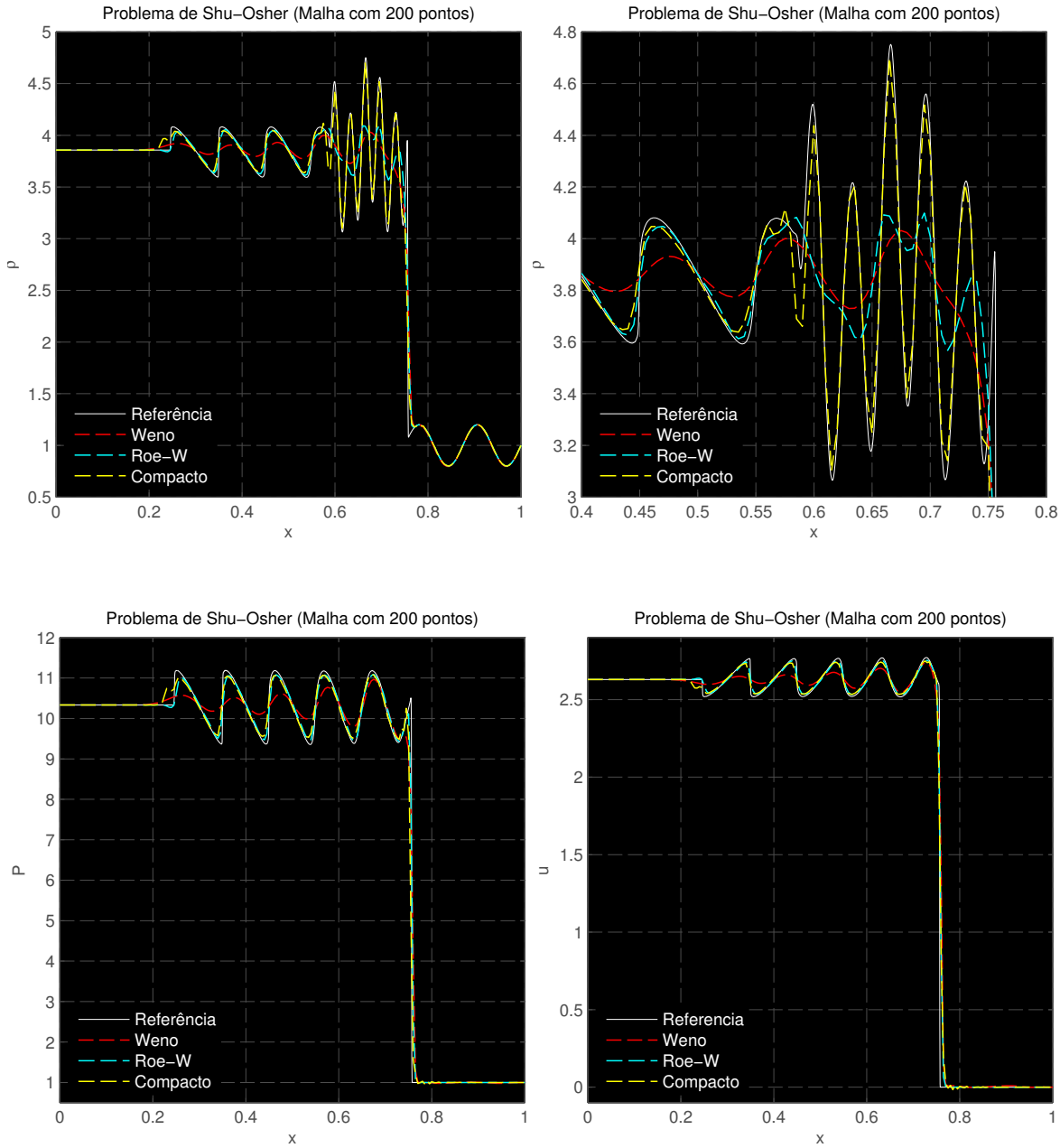
A reconstrução WENO mostrou bons resultados em geral, o que era de se esperar para um método construído especificamente para captura de choques. A ideia de rejeitar interpolações cujo stencil possui descontinuidades se mostrou bastante eficiente. No entanto, um adendo deve ser feito para os resultados utilizando $Ratio = 20$. Na região de transição $Mach = 1$, ocorrem pequenas oscilações numéricas, o que pode ter como causa um dos autovalores do jacobiano ser bem próximo de zero. Pela maneira como foi feita a separação dos fluxos, não há nenhum tipo de correção para esse caso como é feita no método de Roe ou no método de Roe com interpolação WENO. Dessa maneira, esse problema pode ser investigado com mais cuidado no futuro, e uma correção semelhante pode ser necessária. De todos os métodos, esse foi o que possuiu implementação mais complicada.

O método de Roe com interpolação WENO, proposto pelos autores desse trabalho, alcançou resultados muito satisfatórios. De todos os métodos implementados, ele se mostrou o que conseguiu capturar melhor os fenômenos do tubo de choque. Tanto para $Ratio = 5$ como para $Ratio = 20$, as soluções foram bem próximas da solução analítica, com oscilações numéricas muito tênues. Seus resultados foram uma surpresa, visto que seu custo computacional não possui diferenças perceptíveis daquele da reconstrução WENO mas sua implementação foi mais simples.

O último método a ser analisado é o Compacto com viscosidade artificial localizada. Para as configurações $Ratio = 5$ e $Ratio = 10$, ele apresentou bons resultados para a onda de choque, se assemelhando ao método de Roe com interpolação WENO. No entanto, nas superfícies de contato e zonas de expansão o fenômeno de Gibbs ocorre. Isso se deve ao fato dessas regiões não apresentarem gradiente de velocidade, o que torna a viscosidade artificial nula. Logo, como não há nenhum termo dissipativo no fluxo de densidade, oscilações numéricas surgirão. Já para o caso $Ratio = 20$, os resultados não foram tão bons. Isso ocorreu pelo fato de que, para continuar utilizando aquele CFL, menos viscosidade tinha que ser adicionada para que o método continuasse estável, o que acabou possibilitando o surgimento de oscilações numéricas.

Logo, duas importantes observações foram feitas: é necessário algum tipo de dissipação no fluxo da densidade para situações onde há descontinuidades sem gradientes de velocidade e para o esquema de marcha no tempo utilizado, o método precisa de um CFL muito baixo para ser estável. Dessa maneira, futuramente podem ser investigados métodos de marcha no tempo mais adequados afim de possibilitar o uso de um CFL mais alto e correções no fluxo de densidade podem ser feitas, o que começou a ser investigado em [12]. Caso o CFL utilizado fosse igual ao dos outros esquemas, o custo computacional desse método seria muito baixo. No final, esse foi o método mais instável mas também é aquele com mais possibilidades para melhorias.

3.2 Problema de Shu-Osher



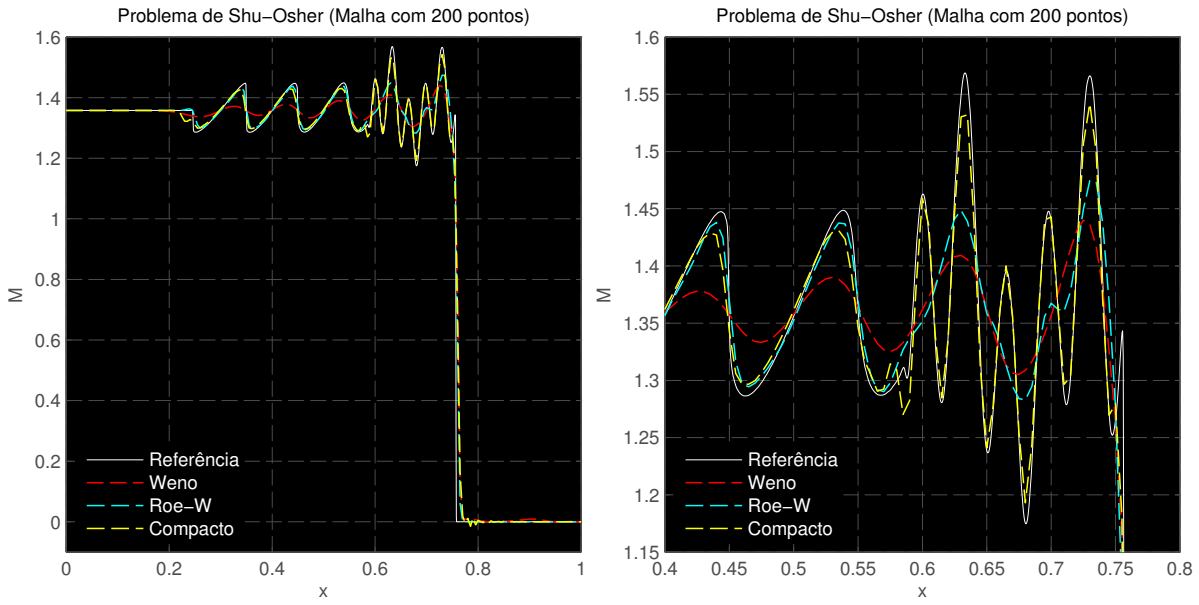
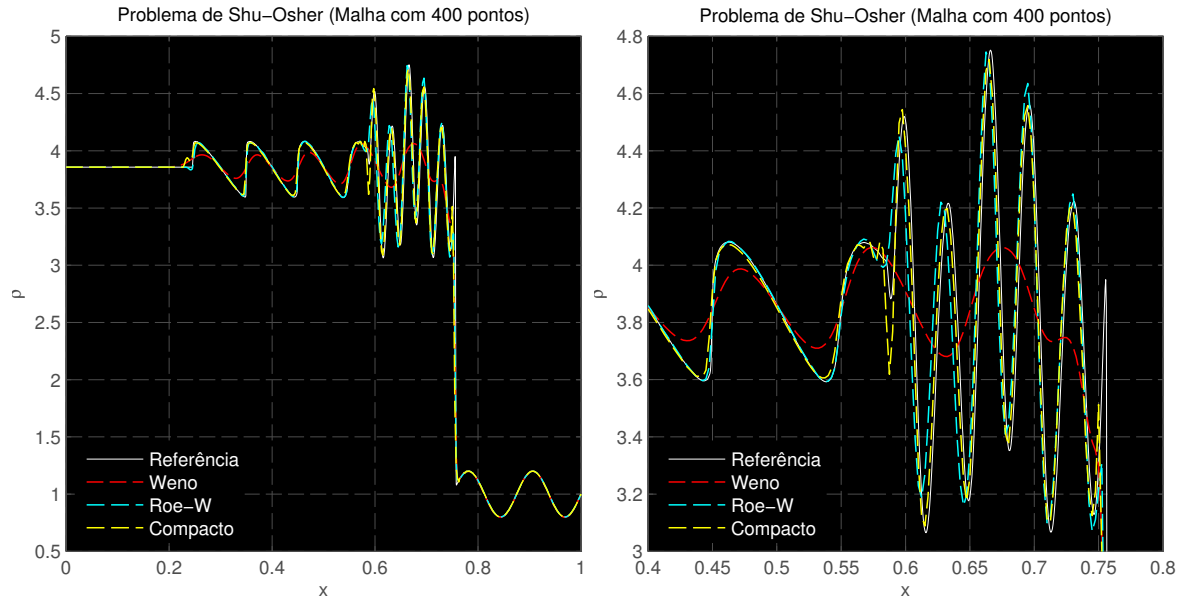


Figura 10: Resultados das simulações utilizando $CFL = 0.5$ para Roe, WENO, Roe-W e $CFL = 0.1$ para Compacto ($C_{\mu}^{4} = 22.$ e C_{β}^{4}=0).



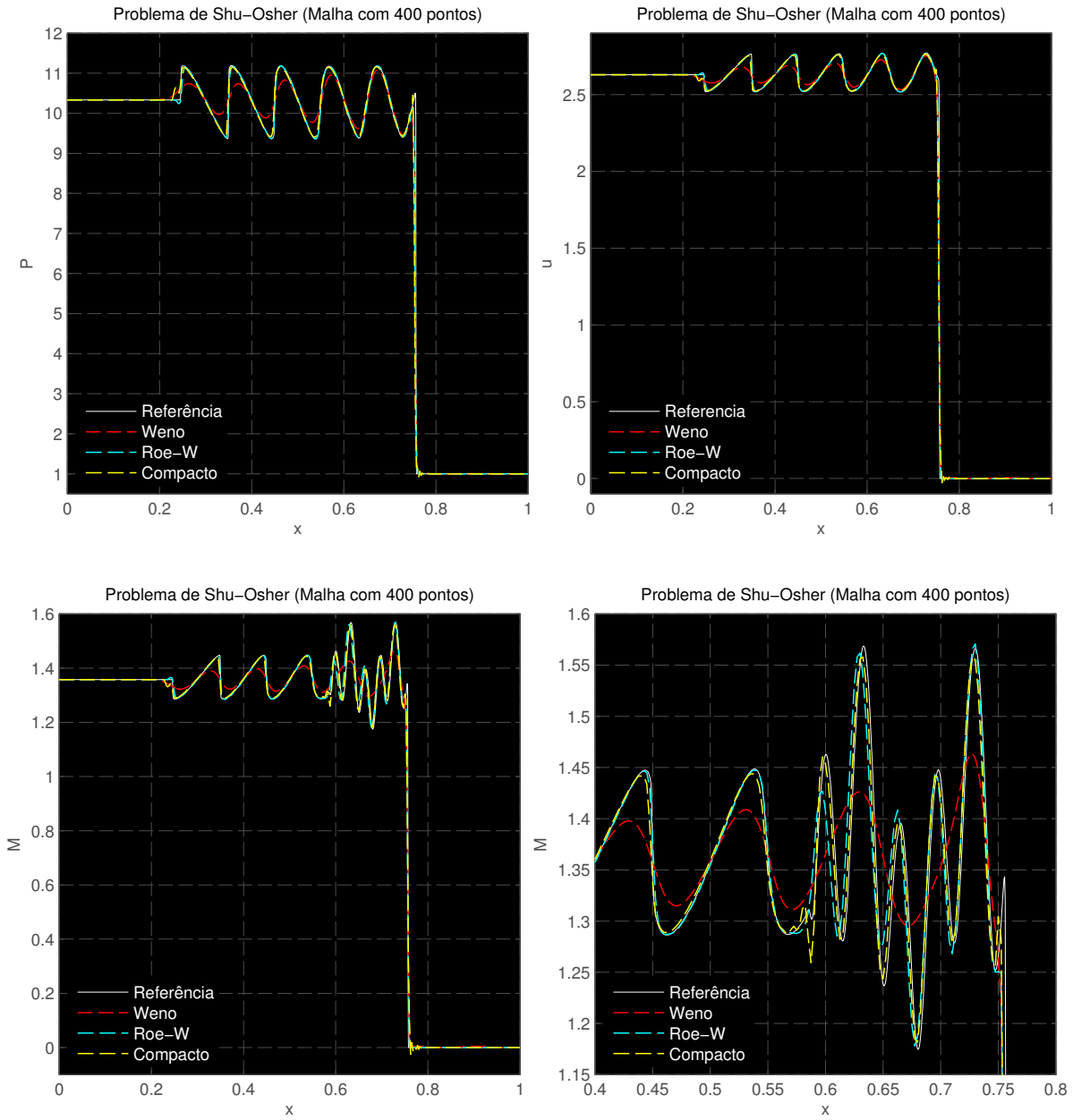
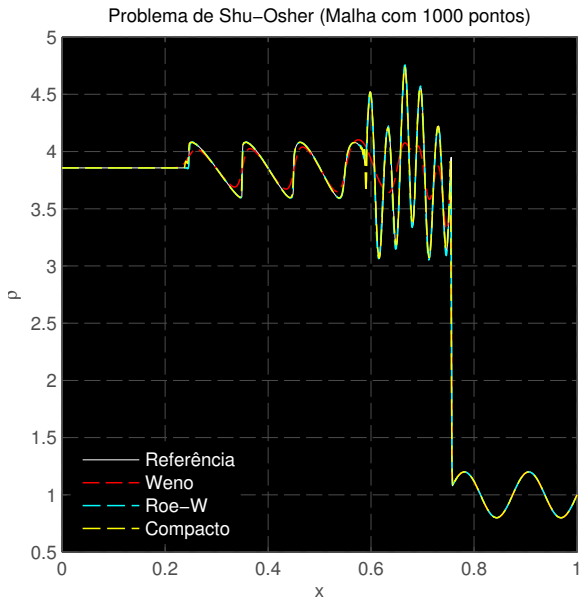
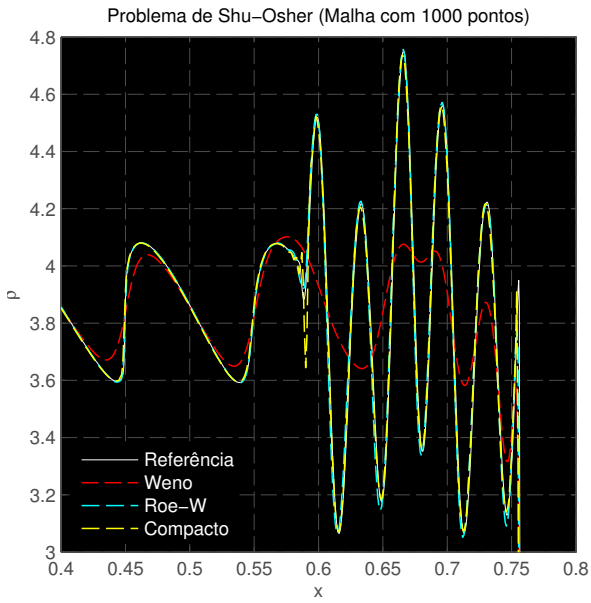
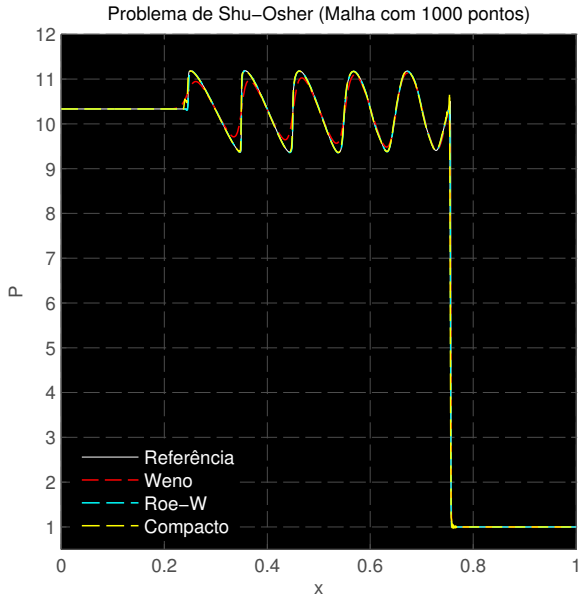
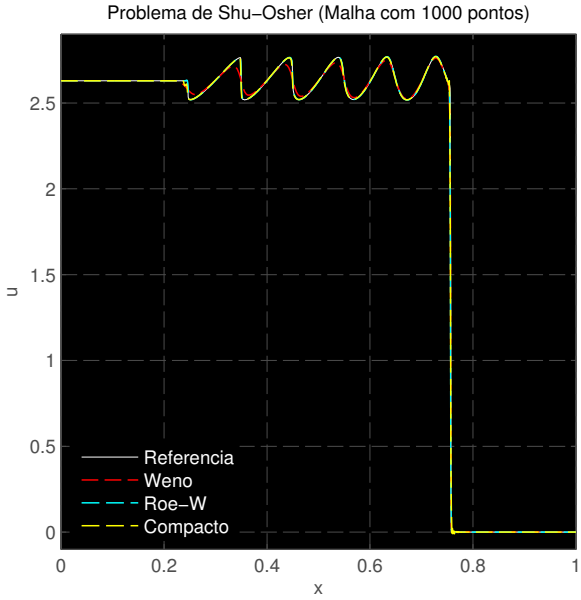


Figura 11: Resultados das simulações utilizando $CFL = 0.5$ para Roe, WENO, Roe-W e $CFL = 0.1$ para Compacto ($C_\mu^4 = 22.$ e C_β^4=0).


Problema de Shu−Osher (Malha com 1000 pontos)
ρ
x
Referência
Weno
Roe−W
Compacto


Problema de Shu−Osher (Malha com 1000 pontos)
ρ
x
Referência
Weno
Roe−W
Compacto


Problema de Shu−Osher (Malha com 1000 pontos)
P
x
Referência
Weno
Roe−W
Compacto


Problema de Shu−Osher (Malha com 1000 pontos)
u
x
Referencia
Weno
Roe−W
Compacto

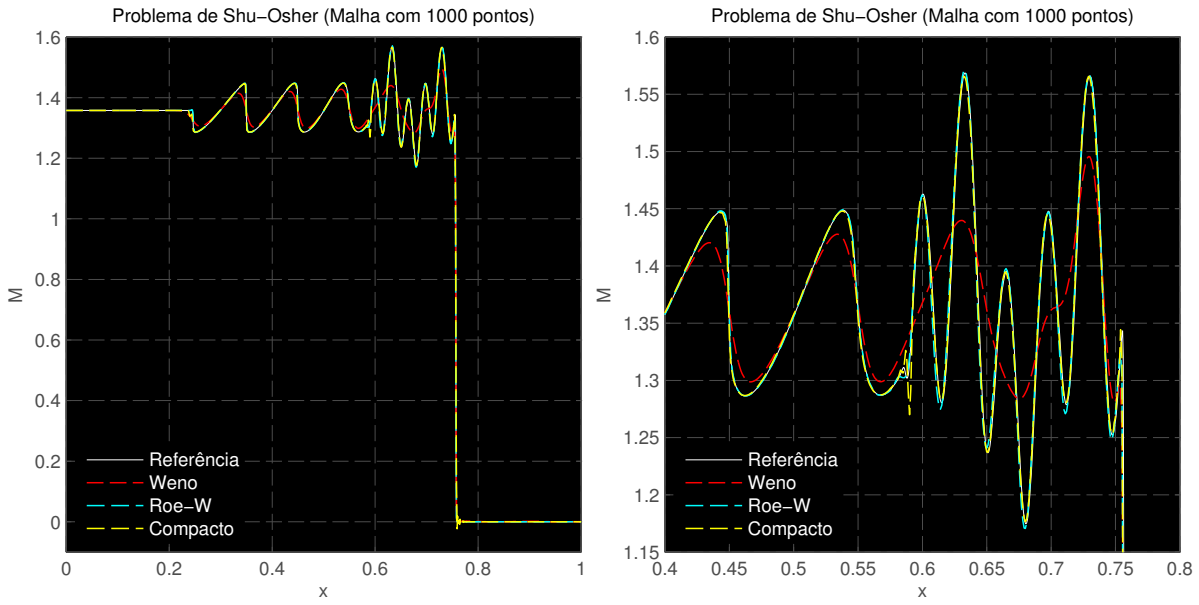


Figura 12: Resultados das simulações utilizando $CFL = 0.5$ para Roe, WENO, Roe-W e $CFL = 0.1$ para Compacto ($C_\mu^4 = 22.$ e C_β^4=0).

Nos resultados acima, as simulações para o método de Roe não foram dispostas, visto que devido à natureza excessivamente dissipativa do método, ele não foi capaz de capturar as oscilações em nenhuma das malhas utilizadas, tornanto seus resultados pouco pertinentes. Uma solução obtida com uma malha de 2000 pontos utilizando o método de Roe com interpolação WENO foi usada como referência. Na malha com 200 pontos, foi possível perceber o poder da alta ordem do método Compacto, pois com uma malha grosseira, seus resultados ficaram bastantes próximos daqueles da referência, enquanto que os resultados da reconstrução WENO e do método de Roe com interpolação WENO não conseguiram uma boa resolução para as oscilações de alta frequência. Contudo, o método de Roe com interpolação WENO consegue resolver as estruturas de menor frequência quase tão bem quanto o Compacto.

Para a malha de 400 pontos, o método de Roe com interpolação WENO e o Compacto fornecem resultados bem próximos da referência, enquanto que a reconstrução WENO ainda não consegue resolver bem as oscilações de alta frequência. Por último, foi feita uma simulação com uma malha de 1000 pontos, comprovando a equiparidade de resultados entre os métodos, com exceção da reconstrução WENO, a qual não conseguiu resolver as oscilações de alta frequência mesmo com uma malha tão refinada.

Foram observados certos comportamentos semelhantes àqueles do tubo de choque de Sod. O método Compacto necessitou de um CFL muito menor do que aquele usado nos outros esquemas, e ,além disso, existem oscilações puramente numéricas no começo das estruturas semelhantes a barbatanas e no começo das oscilações de alta frequência. Novamente, acredita-se que isso se deve a um erro numérico introduzido no começo da simulação devido à falta de um componente dissipativo no fluxo da densidade.

4 Conclusões

A proposta desse trabalho consiste em implementar métodos numéricos capazes de resolver problemas onde há interações choque-turbulência, comuns em asas de aeronaves e bocais de foguetes, afim de observar a validade de seus resultados. O método de Roe se mostrou barato, estável e de fácil implementação. Contudo, ele necessita de uma malha relativamente refinada e é recomendado apenas para fenômenos governados marjoritariamente por descontinuidades. Já a

reconstrução WENO também é estável, mas com uma implementação relativamente complicada. Ela é capaz de capturar tanto descontinuidades, como oscilações de baixa frequência, sendo necessário um cuidado especial na separação de fluxos em regiões de $Mach$ 1.

O método de Roe com interpolação WENO proposto pelos autores desse trabalho se mostrou bastante adequado para capturar tanto descontinuidades como oscilações de alta frequência, desde que houvesse um refinamento mínimo de malha. Por se tratar de uma abordagem desconhecida, esperava-se que o método se comportasse de maneira mais instável, o que não ocorreu, além de ter um custo computacional semelhante à reconstrução WENO. Por último, o método Compacto com viscosidade artificial localizada, o qual forneceu resultados mistos. Seus resultados mostraram que ele é capaz de capturar choques tão bem quanto o método de Roe com interpolação WENO, mas necessita de melhorias para capturar superfícies de contato e outras regiões com descontinuidades onde não há gradientes de velocidade. Além disso, ele se mostrou um esquema relativamente instável, fazendo com que fosse necessário valores de CFL muito baixos. Outra desvantagem foi a necessidade dos parâmetros C_μ e C_{beta} serem inseridos pelo usuário. Contudo, acredita-se que suas principais desvantagens possam ser superadas com um esquema de marcha no tempo mais estável e termos adicionais de dissipação, pois caso esse método seja estável com valores de CFL mais altos, seu custo computacional seria bastante reduzido devido ao seu algoritmo e à possibilidade de se utilizar malhas menos refinadas.

Referências

[1] S. K. Lele *Compact Finite Difference Schemes with Spectral-Like Resolution*, Journal of Computational Physics, Vol. 103, 1992, pp. 16-42

[2] H. Lomax, T. H. Pulliam, D. W. Zingg *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, Springer, 2002

[3] A. Harten, S. Osher, B. Engquist, S. R. Chakravarthy *Uniformly High-Order Accurate Essentially Non-Oscillatory Schemes*, Journal of Computational Physics, Vol. 71, 1987, pp. 231–303

[4] W. R. Wolf, J. L. Azevedo, *High–Order ENO and WENO Schemes for Unstructured Grids*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 55, 2007, pp. 917–943

[5] W. R. Wolf, J. L. Azevedo, S. K. Lele *Convective Effects and the Role of Quadrupole Sources for Aerofoil Aeroacoustics*, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 708, 2012, pp. 502–538.

[6] Shu, C., Osher, S. *Efficient Implementation of Essentially Non-Oscillatory Shock-Capturing Schemes II*, Journal of Computational Physics, Vol. 83, 1989, pp. 32–78

[7] A. W. Cook, W. H. Cabot *Hyperviscosity for shock-turbulence interactions* Journal of Computational Physics, Vol. 203, 2005, pp. 379–385

[8] M. J. Kermani, E. G. Plett, *M*odified Entropy Correction Formula for the Roe Scheme, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2001, Paper 0083.

[9] C. W. Shu *E*ssentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws, ICASE Report No. 97-65, 1997.

[10] C. W. Shu, *High Order Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Convection Dominated Problems*, Division of Applied Mathematics at Brown University.

[11] C. Hirsch *Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*, Jhon Wiley & Sons, 1990.

[12] B. Fiorina , S. K. Lele *An artificial nonlinear diffusivity method for supersonic reacting flows with shocks*, Journal of Computational Physics, Vol. 222, 2007, pp. 246–264.

Perspectivas de continuidade dos trabalhos

Atualmente o orientando deste trabalho está ingressando no mestrado na FEM (Faculdade de Engenharia Mecânica) com intuito de continuar a simular problemas com descontinuidades, não necessariamente na área de mecânica dos fluidos, utilizando boa parte dos conhecimentos adquiridos durante essa iniciação científica.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao Pibic pela bolsa concedida e a todo o apoio recebido dos integrandes do *CFD Lab* e principalmente do meu orientador William Wolf. Também agradeço ao Nicholas Dicati e Sergio Pérez pelas dicas na implementação da reconstrução WENO. Além disso, o apoio pessoal da minha família e namorada foi fundamental.

Apoio

CNPq
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico