

ANÁLISIS DE PROBLEMAS DE FLUJO COMPRESIBLE TRIDIMENSIONAL POR ELEMENTOS FINITOS

FERNANDO QUINTANA.

División Mecánica Computacional. Centro Atómico Bariloche. CNEA. Argentina.

RESUMEN

En este trabajo se estudia la solución de problemas de flujo compresible tridimensional de número de Mach moderado por medio de elementos finitos. El dominio ha sido discretizado utilizando un generador automático de mallas desarrollado dentro del grupo de trabajo que utiliza una técnica Delaunay. Se obtiene una malla de tetraedros de tipo no estructurada. Las ecuaciones que se han considerado son las de Euler (flujo no viscoso) y Navier Stokes para flujo laminar. El algoritmo utilizado es de tipo explícito para permitir trabajar con mallas de elevado número de elementos y no se han incluido técnicas de aceleración de la convergencia.

ABSTRACT

The solution of 3D compressible flow for moderated Mach numbers using Finite Element Techniques is here presented. A Delaunay 3D automatic mesh generator developed in the group is used to discretize the domain with non structured tetrahedra. The Euler equations (inviscid flow) and laminar Navier Stokes have been considered. To allow the study of meshes with large number of elements, an explicit algorithm has been used and no acceleration techniques have been introduced.

1. INTRODUCCION

Los métodos de solución de flujo compresible tridimensional mediante elementos finitos, utilizando mallas de tipo no estructurada, reciben cada vez mayor atención, debido a las enormes posibilidades en cuanto a la libertad de poder modelar geometrías arbitrarias y al costo continuamente decreciente de los recursos computacionales necesarios.

En cuanto a las técnicas de discretización, las mallas de tipo no estructurada presentan una ventaja con relación a las estructuradas, que consiste en que se pueden introducir técnicas de adaptividad con relativa facilidad si se trabaja con los elementos más simples (tetraedros). Sin embargo, el uso de mallas no estructuradas no permite utilizar algoritmos simples de diferencias finitas que prevengan una distribución espacial determinada de los nodos y elementos.

Debido a que las geometrías que se esperan resolver requieren un número considerable de nodos -del orden de 10^5 - resulta conveniente el empleo de algoritmos de tipo explícito. En el presente trabajo, el autor ha preferido extender a tres dimensiones herramientas que han probado comportarse satisfactoriamente en 2D [10].

Sin embargo, por tratarse de los primeros resultados en tres dimensiones, se ha utilizado una malla relativamente simple, con un número moderado de elementos, y sin refinamiento adaptivo en proximidades de variaciones importantes en la solución (capas límite en ecuaciones de N. Stokes).

2. ECUACIONES DIFERENCIALES DEL PROBLEMA

El problema que se desea estudiar, es el flujo laminar de un fluido compresible y viscoso, en equilibrio termodinámico, en el cual se supone que no existen fuentes ni sumideros y que no hay fuerzas de volumen externas. Se asume, además que el fluido es Newtoniano, y que obedece la ley de Fourier para conducción de calor. Luego de aplicar conocidos principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía [7] se obtienen las conocidas ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_i \\ \rho \varepsilon \end{bmatrix} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \begin{bmatrix} \rho u_j \\ \rho u_i u_j + p \delta_{ij} \\ (\rho \varepsilon + p) u_j \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \begin{bmatrix} 0 \\ \kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i \sigma_{ij} \end{bmatrix} \quad i = 1, \dots, 3 \quad (1)$$

Es preciso reconocer las cinco variables: la densidad ρ , tres componentes de velocidad, y la energía específica total ε . El sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (1) es un sistema de ecuaciones no-lineales acoplado, y presenta un carácter mixto parabólico-hiperbólico, o elíptico-hiperbólico, mientras que en el caso de las ecuaciones de Euler, donde el segundo miembro de (1) es nulo, se trata de un sistema hiperbólico (Ver Capítulo 1 de la ref. 10).

También puede escribirse este sistema:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial x_i} \quad i = 1, 3 \quad (2)$$

con:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho \varepsilon \end{bmatrix} \quad \text{incógnitas nodales} \quad (3)$$

$$\mathbf{f}_i = \begin{bmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p \delta_{1i} \\ \rho u_i u_2 + p \delta_{2i} \\ \rho u_i u_3 + p \delta_{3i} \\ (\rho \varepsilon + p) u_i \end{bmatrix} \quad \text{flujos advectivos} \quad (4)$$

$$\mathbf{g}_i = \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_{1i} \\ \sigma_{2i} \\ \sigma_{3i} \\ \kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} + u_i \sigma_{ji} \end{bmatrix} \quad \text{flujos viscosos} \quad (5)$$

Donde \mathbf{u} representa el vector de incógnitas nodales, u_k corresponde a la componente k del vector velocidad \mathbf{V} , δ_{ij} es la delta de Kronecker, ε es la energía total por unidad de volumen (cinética más interna), y p es la presión, que para el caso del aire se calcula en base a la ecuación de estado para un gas perfecto:

$$p = \rho R T \quad (6)$$

donde R es una constante del gas, que está relacionada con los calores específicos a presión y volumen constante C_p y C_v por medio de:

$$R = C_p - C_v = (\gamma - 1) C_v \quad (7)$$

y T es la temperatura $T = \frac{[\varepsilon - 0.5u_i u_i]}{C_v}$, con lo cual, la ecuación de estado (6) puede escribirse:

$$p = \rho(\gamma - 1)[\varepsilon - 0.5u_i u_i] \quad (8)$$

3. PLANTEO NUMERICO

Se ha preferido en primera instancia, programar un algoritmo que el autor ha probado con éxito en dos dimensiones, dejando por el momento técnicas específicas como el remallado adaptativo para una segunda instancia que requiera una mayor definición en determinadas regiones del dominio.

El algoritmo programado es el de Taylor-Galerkin [2],[4],[10] de dos pasos. Se ha preferido un algoritmo de tipo explícito para disponer de una herramienta capaz de abordar problemas de un número elevado de elementos. Se introducen a continuación de manera sintética los fundamentos del algoritmo empleado. El punto de partida es un desarrollo en serie de Taylor:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \frac{\partial \mathbf{u}^n}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}^n}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) \quad (9)$$

Puede reescribirse la (2) como:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \quad i = 1, 3 \quad (10)$$

Y derivando otra vez respecto al tiempo:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) \quad i = 1, 3 \quad (11)$$

En esta ecuación se reemplaza ahora $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ por $-\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i}$, que es la (10) donde se ha prescindido de derivadas o productos de derivadas de orden mayor que dos. Este procedimiento es consecuencia de la imposibilidad de representar tales derivadas o productos mediante las aproximaciones lineales por elemento que se usarán.

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \simeq \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mathbf{A}_i \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad i = 1, 3 \quad (12)$$

Donde $\mathbf{A}_i = \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial \mathbf{u}}$ y $\mathbf{G} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial x_i} \right)$. Reemplazando (10) y (12) en (9) puede escribirse:

$$\mathbf{u}^{n+1} \simeq \mathbf{u}^n + \Delta t \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right)^n + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left\{ \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mathbf{A}_i \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_k}{\partial x_k} \right) \right] \right\}^n \quad (13)$$

Aplicando residuos ponderados (Galerkin) para completar la discretización ahora en la variable espacial:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) d\Omega &\simeq \Delta t \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \left(\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right)^n d\Omega + \\ &+ \frac{(\Delta t)^2}{2} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \left\{ \mathbf{G} \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mathbf{A}_i \left(-\frac{\partial \mathbf{f}_k}{\partial x_k} \right) \right] \right\}^n d\Omega \end{aligned} \quad (14)$$

Integrando por partes y operando:

$$\int_{\Omega} \mathbf{N}^T (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) d\Omega \simeq \Delta t \left\{ - \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_j} \mathbf{g}_j d\Omega + \oint_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{g}_n d\Gamma \right\}^n +$$

$$+ \frac{(\Delta t)^2}{2} \left\{ - \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \left(\mathbf{G} \frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right)^n d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_i} \left(\mathbf{A}_i \frac{\partial \mathbf{f}_k}{\partial x_k} \right)^n d\Omega + \oint_{\Gamma} \mathbf{N}^T \left[\mathbf{A}_i \left(\frac{\partial \mathbf{f}_k}{\partial x_k} \right)_n \right]^n d\Gamma \right\} \quad (15)$$

En las expresiones anteriores, el subíndice \hat{n} indica la proyección en el sentido de la normal a la frontera, mientras que el superíndice n indica que las magnitudes han de evaluarse al tiempo $n\Delta t$. Si bien desde el punto de vista computacional, esta expresión está completamente discretizada, no resulta muy eficiente pues la evaluación de las matrices \mathbf{A} , y \mathbf{G} y los productos matriciales correspondientes son consumidores de tiempo de *cpu* y de espacio en la memoria. Por este motivo se arregla el cálculo del segundo miembro de (15) en *dos pasos*. En el capítulo 4 de la ref [10] el lector interesado puede encontrar detalles de la obtención de este esquema.

Primer paso

$$\int_{\Omega} \mathbf{Q}^T \mathbf{u}^{n+1/2} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{Q}^T \mathbf{u}^n d\Omega - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Omega} \mathbf{Q}^T \left(\frac{\partial \mathbf{f}_i}{\partial x_i} \right)^n d\Omega + O(\Delta t)^2 \quad (16)$$

Donde las funciones \mathbf{Q} son funciones de forma constantes por elemento

Segundo paso

Se recurre nuevamente a una desarrollo en Serie de Taylor para $\mathbf{f}_i^{n+1/2}$, se ignoran derivadas o productos de derivadas de orden mayor que dos, se integra por partes y se obtiene [10]:

$$\int_{\Omega} \mathbf{N}^T (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) d\Omega \simeq$$

$$\Delta t \left\{ \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_j} (\mathbf{f}_j^{n+1/2} - \mathbf{g}_j) d\Omega + \oint_{\Gamma} \mathbf{N}^T (\mathbf{g}_n - \mathbf{f}_n^{n+1/2}) d\Gamma \right\} \quad (17)$$

Puede notarse que introduciendo en la ecuación (17) las aproximaciones ya propuestas para las variables \mathbf{u} , \mathbf{f}_i y \mathbf{g}_i (lineales por elemento) se obtiene un sistema de ecuaciones del tipo $\mathbf{M} \Delta \mathbf{u} = \mathbf{f}$, siendo \mathbf{M} una matriz llena. Como un método directo daría como resultado un elevado costo computacional, se emplea en este trabajo un procedimiento iterativo:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^D + [\mathbf{M} - \mathbf{M}^D] \quad (18)$$

$$\mathbf{M}^D \Delta \mathbf{u}^{r+1} = \mathbf{f} - [\mathbf{M} - \mathbf{M}^D] \Delta \mathbf{u}^r \quad (19)$$

$$\mathbf{M}^D (\Delta \mathbf{u}^{r+1} - \Delta \mathbf{u}^r) = \mathbf{f} - \mathbf{M} \Delta \mathbf{u}^r \quad (20)$$

En las expresiones (18) a (20) el subíndice r indica iteración mientras \mathbf{M}^D indica la matriz \mathbf{M} diagonalizada por alguno de los procedimientos conocidos.

Estabilidad

El algoritmo es *condicionalmente estable*, siendo la condición de estabilidad

$$C \leq \sqrt{\frac{1}{(P\epsilon)^2} + \frac{1}{3}} - \frac{1}{P\epsilon} \quad (21)$$

Donde C es el número de Courant $C = \frac{V\Delta t}{h}$, siendo V el módulo de la velocidad (se toma para cada elemento el promedio de las velocidades nodales), Δt el incremento de tiempo, y h una variable escalar relacionada con el tamaño del tetraedro, y Pe es el número de Péclet $Pe = \frac{Vh}{2K}$.

Si se utiliza una matriz de masas diagonal, el requerimiento de estabilidad es más severo:

$$\leq \sqrt{\frac{1}{(Pe)^2} + 1} - \frac{1}{Pe} \quad (22)$$

Integración

Para calcular las integrales pueden utilizarse conocidos procedimientos de integración numérica. Sin embargo, dicha tarea es costosa desde el punto de vista computacional, por lo que se ha preferido hacer uso de conocidas fórmulas de integración exacta para dichos tetraedros lineales [9]

Viscosidad artificial

El algoritmo introduce una *viscosidad numérica* que es proporcional a $\frac{V^2\Delta t}{2}$ [10]. Se ha identificado a esta viscosidad numérica como la razón por la cual el algoritmo exhibe un buen comportamiento en la resolución de problemas de advección dominante. Para el tipo de problemas a resolver, en el cual aparecen discontinuidades de contacto (capas límite), es necesario atenuar las oscilaciones (*undershoots*, *overshoots*) que inevitablemente aparecen en las proximidades de dichas discontinuidades y que comprometen localmente la estabilidad del algoritmo.

La técnica empleada en este trabajo consiste en la aplicación de una *viscosidad artificial* de manera selectiva, sin afectar la solución en el resto del dominio. La técnica consiste en post-procesar la solución obtenida al final de cada paso temporal suavizándola. El procedimiento puede sintetizarse mediante:

$$[M^D(\mathbf{u}_r - \mathbf{u})]_r = C\Delta t \sum_e K_e [(M - M^D)\mathbf{u}_e]_r \quad (23)$$

donde C es un parámetro que el usuario puede cambiar y que normalmente es necesario ajustar para obtener una solución óptima, \mathbf{u}_e es la solución *suavizada*, M representa la matriz de masas $M_{ij} = \int_{\Omega_e} N_i N_j d\Omega$, Ω_e el volumen elemental, K_e es un coeficiente de difusividad elemental cuya elección es importante [10], y vale la regla de Euler para los índices repetidos.

EJEMPLOS

Se presenta un ejemplo de flujo viscoso laminar alrededor de una configuración geométrica clásica: una esfera. Las condiciones de flujo son Número de Mach 0.5, Número de Reynolds: 1000, Número de Prandtl: 0.72 (valor razonable para gases biatómicos a temperaturas moderadas), temperatura del gas igual a la de la pared 273°K.

En la figura 1 puede verse la discretización del dominio espacial. La malla es de tetraedros y la frontera exterior del dominio es un cilindro de diámetro 80 veces mayor que el de la esfera. Puede observarse a través del corte el tamaño de la esfera.

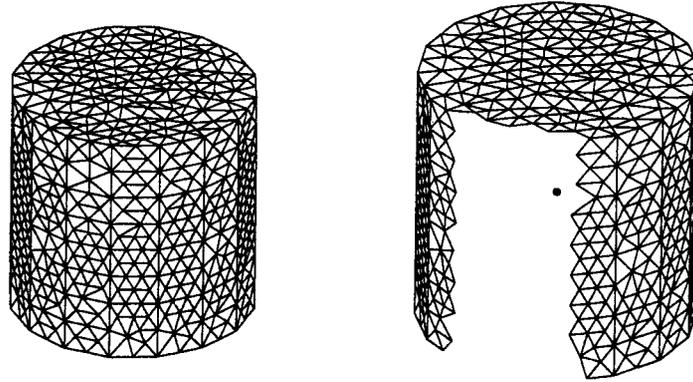


Fig. 1 Vista exterior de la discretización del dominio y corte de la superficie exterior mostrando la esfera en el interior. Número de nodos: 5565 Número de elementos: 27522

En la figura 2 se esquematiza las condiciones del flujo alrededor de la esfera ($V_z = 1, V_x = V_y = 0$). La superficie de la misma ha sido discretizada con 952 triángulos lineales, mientras que el cilindro exterior tiene 1800.

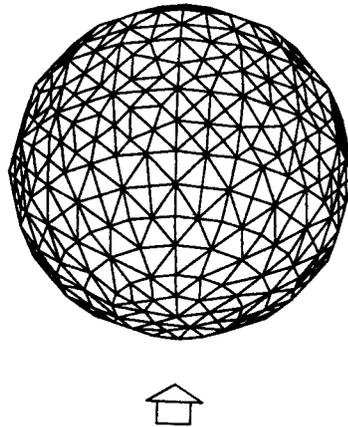


Fig. 2 Vista de la discretización de la superficie de la esfera (952 triángulos) y la dirección del flujo. Número de Mach en el infinito=0.5, $Re=1000$

Para las figuras 3 y 4 debe hacerse la siguiente salvedad: Se ha cortado el dominio con un plano pasante por el eje z (eje del cilindro), se han removido los tetraedros de un lado del semiplano, y los que intersectan el plano, y luego sobre la superficie resultante se han trazado las isolíneas. Las mismas

son observadas desde un punto perpendicular al plano de corte.

En la figura 3 se presentan las líneas de igual velocidad z . Se observa la existencia de una variación importante en proximidad a la pared -capa límite-, de manera que casi toda la variación se ve concentrada en la primera capa de tetraedros. Esta situación no es la más favorable y produce oscilaciones en la presión sobre la superficie como puede verse en las isolíneas de presión de la figura 4. Para corregir esta situación deberá disminuirse el tamaño de los elementos de la malla en la superficie y los tetraedros más próximos

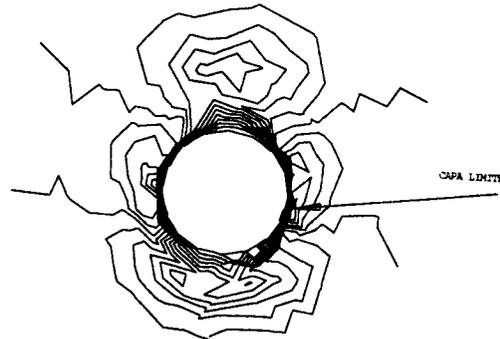


Fig. 3 Isolíneas de velocidad z mostrando la capa límite alrededor del cuerpo. Número de Mach en el infinito=0.5, $Re=1000$

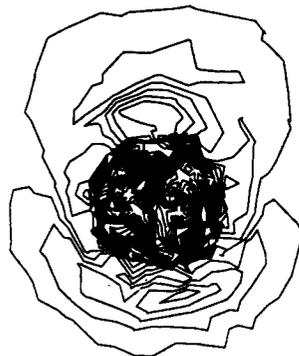


Fig. 4 Isolíneas de presión para el mismo caso (Mach 0.5, Reynolds 1000)

REFERENCIAS

- 1) **K. Morgan, J. Peraire, R.R. Thareja & J.R. Stewart.** "An adaptive finite element scheme for the Euler and Navier Stokes equations". AIAA paper 87-1172-CP (1987).
- 2) **J. Donea.** "A Taylor-Galerkin Method for the convective transport problems." Int. Journal Num. Methods in Engineering 20, 101-119, (1984).
- 3) **H. Liepmann & A. Roshko.** "Elements of Gasdynamics." Galcit Aeronautical Series. John Wiley & Sons Ed, (1957).
- 4) **J. Miquel, E. Oñate, & F. Quintana.** "A Formulation for the Solution of Euler Equations for Compressible Flow using Finite Elements." Proceedings of the 5th Int. Symp. on Num. Methods in Engineering, Lausanne (Switzerland) September 1989 Springer Verlag Ed, (1989).
- 6) **E. Oñate, J. Périaux, A. Samuelson Editors** "The Finite Element Method in the 1990's" Springer-Verlag (1991). ISBN 84-87867-04-9 CIMNE, Barcelona
- 7) **D. Potter.** *Computational Physics.* John Wiley & Sons, (1980). (First Edition 1972).
- 8) **W. J. Usab & E. Murman.** *Embedded Mesh Solutions of the Euler Equations Using a Multiple Grid Method,* en *Advances in Computational Transonics* (W. G. Habashi, Ed). Pineridge Press (UK) 447-472, (1985).
- 9) **O.C. Zienkiewicz & R.L. Taylor.** *The Finite Element Method.* Fourth edition. Mc. Graw-Hill, (1989).
- 10) **J.F. Quintana.** *Análisis de problemas de flujo compresible de advección dominante por el método de elementos finitos.* Tesis Doctoral. ETSECCPB - Universidad Politécnica de Cataluña (España). Marzo (1993)
- 11) **C. Hirsch.** *Numerical Computation of Internal and External Flows.* John Wiley & Sons (1990)