Mecánica Computacional Volúmen XIII Compilado por M. Vénere Bariloche, setiembre de 1992

SIMULACION POR ELEMENTOS FINITOS DE LAS ECUACIONES DE NAVIER-STOKES EN 3-D

Mario A. Storti[†], Norberto M. Nigro^{*} y Sergio R. Idelsohn[†]

INTEC (CONICET-UNL), Casilla de Correo 91, 3000-Santa Fe. Argentina

RESUMEN

Describimos la implementación numérica y computacional de un código *FEM* para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes en dominios tridimensionales. El método de discretización utilizado se inscribe dentro de la tendencia actual de resolver flujos incompresibles como límite de uno compresible con interpolación de igual orden para velocidades y presiones y un resolvedor basado en integración pseudo temporal explícita que hace factible la posibilidad de simular problemas de mediana complejidad utilizando escasos recursos computacionales. El algoritmo incluye la utilización de una elección automática del paso de tiempo local que permite mejorar la convergencia en mallas muy refinadas. Finalmente se muestran resultados de su validación sobre la cavidad cuadrada a Re desde 1 hasta 1000 y se presentan también resultados obtenidos sobre una cavidad cuadrada multiplemente conexa a Re desde 0 hasta 250.

SUMMARY

We describe the computational and numerical aspects of a FEM code solving the Navier-Stokes equations in 3D domains. We use a discretization method belonging to the actual trends to solve incompressible flow as a limit of a compressible one with equal order interpolation functions for velocity and pressure variables and solve the equations appeared by an explicit pseudo transient integration that allow to simulate problems of medium complexity using minimal computational resources. The algorithm include automatic local time stepping to improve the convergence rate specially in refined meshes. Finally we plot results to validate the code for the lid driven square cavity at Re from 1 to 1000 and present a second result over the multiply connected square cavity at Re from 0 to 250

^{*} Becario de Perfeccionamiento del CONICET

[†] Miembro de la Carrera del Investigador Científico del CONICET

A.1 FORMA CONSERVATIVA DE LA ECS. DE NAVIER STOKES

Las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo compresible en forma conservativa son:

$$\mathbf{U}_{,t} + \mathbf{F}_{a,i}^{i} = \mathbf{F}_{d,i}^{i} + \mathbf{b}, \qquad \mathbf{U} = [\rho \ \rho \mathbf{u} \ \rho e]^{T}$$
(1)

Se asume la convención de suma implícita sobre índices repetidos. (), $i = \partial(i)/\partial x_i$. $U \in \mathbb{R}^5$ es el vector de estado local del fluido:

 ρ, \mathbf{u}, e son la densidad, velocidad y energía total (interna+mecánica) del fluido. $\mathbf{F}_a, \mathbf{F}_d \in \mathbb{R}^{5 \times 3}$ son los flujos advectivos y difusivos

$$\mathbf{F}_{a}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho \mathbf{u}^{T} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u}^{T} + p \mathbf{I}_{\mathbf{3} \times \mathbf{3}} \\ (\rho e + p) \mathbf{u}^{T} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{F}_{d}(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{q} \end{bmatrix}$$
(2)

 p, τ, q son la presión termodinámica, tensor de tensiones deviatóricas y vector de flujo calórico. Estos dos últimos se expresan como:

$$\tau_{jk} = \mu(u_{j,k} + u_{k,j}) + \lambda u_{l,l} \delta_{jk}, \qquad q_j = \kappa \theta_{,j}$$
(3)

 μ es la viscosidad dinámica, λ el segundo coeficiente de viscosidad, κ la conductividad térmica y θ la temperatura.

Estas ecuaciones se cierran con la ecuación de estado del gas y una ecuación para la energía.

$$\theta = \theta(p, \rho), \quad e = e(p, \rho)$$
 (4)

Se trata de un sistema de ecuaciones advectivo-difusivo incompletamente parabólico. El sistema no es completamente parabólico debido a que la ecuación de balance de masa no tiene término difusivo. Estas ecuaciones rigen el comportamiento del metal líquido en la medida que hagamos tender el *Mach* a cero. El problema se completa con la introducción de la fase gaseosa, la cual es simulada a través del modelo simple a dos fases explicado en el informe [8].

A.2 EL METODO DE RESIDUOS PONDERADOS - SUPG

Nuestra formulación se basa en el método de Petrov-Galerkin, es decir que se trata de un método de residuos ponderados con funciones de peso que no son necesariamente iguales a las de interpolación y tampoco necesariamente continuas. Este método introduce la disipación numérica necesaria en problemas dominados por advección, manteniendo la consistencia inalterada. Este método es, probablemente, el más referenciado en el área de CFD por elementos finitos [1-3].

Por simplicidad supondremos que:

$$\mathbf{F}_{a}^{i}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}_{i}\mathbf{U} \qquad \mathbf{F}_{d}^{i}(\mathbf{U},\nabla\mathbf{U}) = \mathbf{K}_{ij}\mathbf{U}_{,j} \tag{5}$$

donde A_i y K_{ij} son matrices constantes. Para cada nodo *a* hay una función de interpolación N_a (tipo sombrero en 1*D*, bilineal en 2*D*, en general multilineal) y una de peso $W_a = N_a + P_a$, donde P_a es la llamada función de perturbación. El método de Galerkin-FEM estándar corresponde a tomar $P_a \equiv 0$. Las W_a (y por lo tanto las P_a) no son necesariamente continuas a través de bordes interelemento.

La consistencia está en este caso asegurada ya que la solución del continuo es solución a esta formulación variacional.

A.3 ELECCION DE LA FUNCION DE PERTURBACION

Nuestra formulación se basa en el método de Petrov-Galerkin de forma tal que la consistencia está asegurada ya que la solución del continuo es solución del esquema numérico [1-3].

En lo que sigue nos abocaremos a la búsqueda de la función de perturbación que da orígen a la función de peso empleada. Comenzamos por recordar el problema simple unidimensional escalar, para luego ir extendiéndolo hasta llegar a sistemas multidimensionales.

A.3.1 Advección-difusión escalar 1D

La ecuación a resolver es:

$$a u_{,x} = k u_{,xx} \tag{6}$$

donde a es la velocidad de advección del fluido según la coordenada espacial x, k la difusividad y u la incógnita. Un esquema de elementos finitos (método de Galerkin) lleva a la siguiente discretización :

$$a\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = k\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \tag{7}$$

Este tipo de discretización tiene precisión $O(\Delta x^2)$ pero produce oscilaciones para problemas fuertemente advectivos, es decir, caracterizados por un número adimensional de Pèclet Pe = $u\Delta x/k \gg 1$. La solución exacta al problema 1*D* de advección difusión con paso de malla constante y condiciones de contorno tipo Dirichlet puede ser obtenida si la k (difusión física) del problema discreto es reemplazada por:

$$k' = k + k_{num}, \qquad k_{num} = \frac{a\Delta x}{2}\psi(Pe)$$
 (8)

donde $\psi(Pe)$ es la llamada función o número mágico y está definida por :

$$\psi(\text{Pe}) = \coth\left(\frac{\text{Pe}}{2}\right) - \frac{2}{\text{Pe}}$$
 (9)

Expresión que surge de igualar los valores nodales de la solución exacta a la solución discreta. El sistema discreto modificado es:

$$a\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = (k + k_{\text{num}})\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$
(10)

Este sistema discreto puede ser puesto como una formulación Petrov-Galerkin si tomamos como perturbación para el nodo i, a la siguiente función:

$$P_{i} = \tau a N_{i,x}, \qquad \tau = \frac{\Delta x}{2|a|} \psi(\text{Pe})$$
(11)

A.3.2 Sistemas unidimensionales

La ecuación es ahora:

$$\mathbf{AU}_{,x} = \mathbf{KU}_{,xx}, \qquad \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m}, \ \mathbf{A}, \mathbf{K} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$
(12)

m=número de ecuaciones del sistema.

Proponemos un cambio de base U = SV, S no singular y multiplicamos todo la ecuación por $S^{-1}K^{-1}$:

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{V}_{,x} = \mathbf{V}_{,xx} \tag{13}$$

El problema se desacopla si encontramos una matriz S tal que:

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{\Lambda} \tag{14}$$

con A matriz diagonal. Esto puede hacerse siempre para sistemas parabólicos simetrizables. Efectivamente en el caso de este tipo de sistemas el problema de autovalores anterior es equivalente a diagonalizar la matriz $\mathbf{K}^{\prime(-1/2)}\mathbf{A}^{\prime}\mathbf{K}^{\prime(-1/2)}$, donde $\mathbf{A}^{\prime}, \mathbf{K}^{\prime}$ son las matrices que surgen de transformar a \mathbf{A}, \mathbf{K} a la base en que son simétricas, respectivamente. Ahora bien, la matriz anterior es simétrica y por lo tanto diagonalizable. La ecuación *m*-ésima es entonces:

$$\lambda_m v^m_{,x} = v^m_{,xx} \tag{15}$$

y como hemos visto en el apartado anterior puede resolverse con el esquema:

$$\lambda_m \frac{v_{i+1}^m - v_{i-1}^m}{2\Delta x} = \left(1 + \frac{\lambda_m \Delta x}{2} \psi(\lambda_m \Delta x)\right) \frac{v_{i+1}^m - 2v_i^m + v_{i-1}^m}{\Delta x^2} \tag{16}$$

La forma matricial equivalente transformada a la base de la variable U es

$$\mathbf{A}\frac{\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_{i-1}}{2\Delta x} = \left(\mathbf{K} + \mathbf{A}\psi(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{A}\Delta x)\frac{\Delta x}{2}\right)\frac{\mathbf{U}_{i+1} - 2\mathbf{U}_i + \mathbf{U}_{i-1}}{\Delta x^2}$$
(17)

Por construcción este sistema da resultados nodales exactos tal como el problema escalar. Podemos identificar la matriz de difusión numérica como:

$$\mathbf{K}_{num} = \mathbf{A} \frac{\Delta x}{2} \psi(\mathbf{K}^{-1} \mathbf{A} \Delta x)$$
(18)

similar a la obtenida en el caso escalar (véase ecuación 8). $K^{-1}A\Delta x$ actúa como una matriz de números de Pèclet. La matriz de difusión numérica puede ser reescrita como:

$$\mathbf{K}_{num} = \mathbf{A}\boldsymbol{\tau}\mathbf{A}, \qquad \boldsymbol{\tau} = \frac{\Delta x^2}{2}\phi(\mathbf{K}^{-1}\mathbf{A}\Delta x)\mathbf{K}^{-1}$$
(19)

la función ϕ es una función asociada a la ψ y definida como:

$$\phi(x) = \frac{\psi(x)}{x} \tag{20}$$

A.3.3 La ecuación de advección-difusión escalar multidimensional

Se trata de la extensión de (11) a varias dimensiones espaciales:

$$\mathbf{a} \cdot \nabla u = k \Delta u \tag{21}$$

Una de las formas de extender los resultados unidimensionales para mallas homogéneas equiespaciadas y ortogonales sería tomar:

$$\tau = \frac{\Delta x}{2|\mathbf{a}|} \psi(\text{Pe}) \tag{22}$$

La extensión a mallas generales se hace incluyendo una transformación al elemento master, [4].

A.3.4 Extensión a sistemas multidimensionales

Para problemas puramente advectivos en 3D Mallet [5], propone una matriz τ dada por:

$$\tau = \frac{\Delta x}{2} \|\mathbf{A}\|^{-1}, \quad \|\mathbf{A}\| = (\mathbf{A}_x^2 + \mathbf{A}_y^2 + \mathbf{A}_z^2)^{\frac{1}{2}}$$
(23)

En el caso advectivo-difusivo proponemos usar:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\Delta \boldsymbol{x}}{2} \|\mathbf{B}\|^{-1}, \quad \mathbf{B}_j = \Delta \boldsymbol{x}^{-1} \mathbf{K}_{jj} \{ \phi(\mathbf{K}_{jj}^{-1} \mathbf{A}_j \Delta \boldsymbol{x}) \}^{-1}$$
(24)

Esta expresión para el caso 1D se reduce a la ecuación (19) y para problemas puramente advectivos se reduce a la expresión de Mallet ya que $\phi(x) \rightarrow 1/|x|$ para $|x| \rightarrow \infty$ y por lo tanto:

$$\mathbf{B}_{j} \to \Delta x \frac{1}{\Delta x} \| \mathbf{K}_{jj}^{-1} \mathbf{A} \|^{-1} \mathbf{K}_{jj} = \| \mathbf{A} \|_{K_{jj}}$$
(25)

Donde $\| \|_X$ denota la norma de la matriz en la métrica dada por la matriz X.

A.4 EL SISTEMA DE STOKES SIMPLIFICADO

Este método no es directamente aplicable a las ecuaciones de Navier-Stokes ya que la expressión (19) degenera debido al cáracter singular de K. Esto se traduce en que el problema de autovalores (14) es degenerado y el valor límite de los autovalores no está determinado. Esto se resuelve introduciendo un parámetro ϵ positivo en la ecuación de balance SÓLO AL EFECTO DE CALCULAR LAS FUNCIONES DE PESO para el método SUPG. Haciendo tender ϵ a cero se recupera el límite correcto. Usaremos un sistema simple que retiene alguna de las características salientes de las ecuaciones de Navier-Stokes. El sistema de Stokes simplificado en variables adimensionales es:

$$p_{,t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = b_m$$

$$\mathbf{u}_{,t} + \nabla p = \frac{1}{\operatorname{Re}_c} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{b}$$
 (26)

con: $\operatorname{Re}_c = cL/\nu = \rho cL/\mu$.

Las suposiciones fundamentales para obtener este sistema a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes compresible (1-4) son:

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho \mathfrak{u} L}{\mu} \ll 1, \qquad M = \frac{\mathfrak{u}}{c} \ll 1$$
(27)

Donde Re, M son los números de Reynolds y Mach respectivamente. También se ha supuesto que las ondas de presión son a entropía constante. c es la velocidad del sonido a entropía constante:

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} \bigg|_{\bullet}$$
(28)

Este sistema retiene los efectos viscosos, la incompresibilidad en el caso estacionario y las ondas de presión en el no-estacionario. Si bien el término viscoso es diferente en el caso no-estacionario, solo cambia ligeramente la disipación viscosa de las ondas de presión.

Este sistema puede ser puesto en la forma de sistemas advectivos-difusivos lineales homogéneos:

$$\mathbf{U}_{,t} + \mathbf{A}_{j}\mathbf{U}_{,j} = \mathbf{K}_{jl}\mathbf{U}_{,jl} + \mathbf{B}$$
⁽²⁹⁾

con :

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} p \\ \mathbf{u} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_j k_j = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{k}^T \\ \mathbf{k} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K}_{jl} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \delta_{jl} \mathbf{I} / \operatorname{Re}_c \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_m \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} eqno(30)$$

Comenzaremos con el caso 1D tomando $\text{Re}_c = 1$. Por simple que parezca este sistema, los problemas de compresibilidad en el caso de considerar las ecuaciones estacionarias, o la rigidez de las ondas de presión en el caso no-estacionario permanecen y por lo tanto es un buen terreno para estudiar la aplicabilidad del método.

Aplicando la expresión (18) para la K_{num} tomando para tal fin como matriz de difusión

$$\mathbf{K} = \operatorname{diag}\{\epsilon, 1, 1, 1\},\tag{31}$$

como escala de longitud para la adimensionalización $L = \Delta x$ y utilizando que para $\epsilon \to 0$, $1/\sqrt{\epsilon} \to \pm \infty$, $\psi(\pm 1/\sqrt{\epsilon}) \to \pm 1$: se llega a

$$\mathbf{K}_{num} = \frac{1}{2}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}\operatorname{diag}\{1, -1, 0, 0\}\mathbf{S} = \frac{1}{2}\operatorname{diag}\{\sqrt{\epsilon}, 1/\sqrt{\epsilon}, 0, 0\}$$
(32)

Nótese que este método tiene semejanzas con aquellos que agregan penalización o viscosidad "bulk" pero a diferencias de estos, el método aqui propuesto lo hace en forma consistente, siguiendo la línea de Petrov-Galerkin con todo el aval que existe detrás del mismo, en especial el de caer dentro de los llamados métodos de residuos ponderados.

La extensión al caso $\text{Re}_c \neq 1$ se logra mediante una transformación de escala y finalmente arribamos a:

$$\mathbf{K}_{\text{num}} = \frac{1}{2} \operatorname{diag} \{ \operatorname{Re}_c \sqrt{\epsilon}, 1/(\operatorname{Re}_c \sqrt{\epsilon}), 0, 0 \}$$
(33)

A.5 EXTENSION AL CASO Re > 0

Al introducir los término de advección con la velocidad del fluido las matrices del sistema simplificado generan una matriz de Pèclets $K^{-1}A$ diagonal por bloques. El primer bloque es de 2×2 y da raíces de expresión complicada que tienden a $\pm \infty$. No analizaremos esto porque no agrega nada nuevo a lo ya visto. Es interesante notar que para las ecuaciones en las direcciones normales (3 y 4) aparecen como elementos diagonales de la misma los números de Reynolds que representan físicamente los números de Pèclet para el transporte de vorticidad lo cual es de esperar ya que estas componentes representan velocidades transversales al flujo medio.

A.6 INTEGRACION PSEUDOTEMPORAL - PRECONDICIONAMIENTO

El sistema de ecuaciones resultantes es resuelto a través de una integración pseudo-temporal mediante un esquema explícito tipo Euler hacia adelante. Ya que el objetivo es obtener la solución estacionaria del problema, se precondicionó el sistema usando un paso de tiempo local por nodo y por ecuación con lo cual se ha logrado mejorar las tasas de convergencia.

A.7 VALIDACION



Figura 1: Cavidad cuadrada-Geometria y malla.

Se corrieron 2 ejemplos numéricos en pos de validar los resultados teóricos alcanzados. El primero se trata de la cavidad cuadrada a Re = [1; 40; 100; 1000] sobre una malla de 20 \times 20 elementos (ver figura 1). Los resultados se muestran en las figuras 2 y 3. Estos fueron comparados con los obtenidos por Schreiber et-al [7] usando diferencias finitas sobre una malla de 121×121 nodos. Hemos superpuesto una mira (trazada con línea de puntos) indicando la ubicación del centro del vórtice principal, de acuerdo con la solución de referencia. En todos los casos (salvo para Re=1000) la coincidencia es muy buena, del orden de una pequeña fracción del elemento en cuestión. Para Re=1000 el centro del vórtice se desplazaba muy lentamente en la dirección correcta y por razones de tiempo se muestran los resultados finales obtenidos, habiendo una diferencia en las posiciones del centro del orden de un elemento. Con respecto a los vórtices secundarios, no han sido tenidos en cuenta en esta etapa de validación aunque se manifiesta en los casos de las mallas refinadas en las esquinas un comportamiento cualitativamente bueno. Consideramos que este punto puede mejorarse mediante refinamiento local. El segundo ejemplo se trata de una cavidad cuadrada de lado unitario pero multiplemente conexa. Esta posee unas regiones sólidas en su interior centradas en $(x, y) = (\frac{1}{3}, \frac{1}{2}) y(\frac{2}{3}, \frac{1}{2})$ con un espesor de $\frac{1}{15}$ y una altura de $\frac{1}{3}$. (ver figura 4) Se corrieron casos a Re = [0; 50; 250] y en todos los casos los resultados fueron satisfactorios comparados con los obtenidos por Lippke et-al [6] usando aproximadamente la misma cantidad de elementos (3600). En las figuras 4 y 5 se muestran las líneas de corriente para estos casos.



Figura 2: Cavidad cuadrada - Resultados Campo de velocidades. a) Re = 1. b) Re = 40.



Figura 3: Cavidad cuadrada - Resultados Campo de velocidades. a) Re = 100. b) Re = 1000.







Figura 5: Cavidad multiplemente conexa-Resultados. Línes de corriente. a) Re = 50. b Re = 250.

CONCLUSIONES

Se presentó una exposición resumida de los alcances teóricos que posibilitaron la confección de esta novedosa formulación SUPG para las ecuaciones de Navier-Stokes que mostraron por un lado una muy buena precisión en los resultados y por otro ausencia total de bloqueo usando interpolación del mismo órden, lo que desde el punto de vista computacional resulta ser muy ventajoso. Además se logró reunir un código compresible con uno incompresible, logrando éste último como límite del anterior y la disminución del Mach no ha motivado inconvenientes numéricos muy severos. Si bien en el caso de flujo de Stokes se puede hacer un análisis analítico simplificado que permite evitar la diagonalización numérica por otro de índole exacta, su extensión al caso de Navier-Stokes resulta ser complicada y en este momento se esta trabajando en lograr el mismo resultado que para flujo de Stokes lo cual en principio redunda en un ahorro importante de tiempo de CPU. Por último estamos trabajando en uno de los puntos más débiles de la presente formulación, su velocidad de convergencia, pero ya existen evidencias de que esto puede ser solucionable.

REFERENCIAS

[1] Hughes, T. J. R. and Tezduyar T. E., Finite element methods for first-order hyperbolic systems with particular emphasis on the compressible Euler equations, Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng. 45, (1984), 217-284

[2] Hughes T. J. R. and Mallet M., A new finite element method for CFD: III. The generalized streamline operator for multidimensional advection-difusion systems, Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng. 58, (1986), 305-328

[3] Hughes T. J. R. and Mallet M., A new finite element method for CFD: IV. A discontinuity capturing operator for multidimensional advective-diffusive systems, Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng. 58, (1986), 329-336

[4] Hughes T. J. R. Mallet M. and Mizukami A., A new finite element method for CFD: II. Beyond SUPG, Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng. 54, (1986), 341-355

[5] Mallet M., A finite element method for CFD, Ph.D Thesis, Stanford University, Nov 1985.

[6] Lippke A. and Wagner H. Numerical solution of the Navier-Stokes equations in multiply domains connected Computers & Fluids, vol 20, N°1, 19-27, (1991).

[7] Schreiber R. and Keller H. Driven Cavity Flows by efficient numerical techniques, J. Comp. Phys., vol. 49, 310-333, (1983)

[8] Storti M., Un modelo simple de flujo a dos fases para la pluma gaseosa en un horno de cuchara, Informe Interno $GI_M/10-91$