HiG-Flow

Antonio Castelo Filho

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação ${\rm USP-S\~ao~Carlos}$

25 de Maio, 2017

Motivação

- É notória a importância da área de dinâmica dos fluidos computacional no mundo atual, a saber a previsão de tempo e clima; previsão de alagamentos e enchimentos de reservatórios; prospecção, transporte e refino de petróleo; preenchimento de moldes por polímeros, metais e outros fluidos, entre outras.
- Vários problemas importantes têm como característica a complexidade da geometria e das condições de contorno, como escoamentos com superfícies livres e escoamentos multifásicos.



Áreas do conhecimento

Mecânica dos fluidos Mecânica dos fluidos computacional Métodos numéricos EDP Teoria da aproximação Álgebra linear numérica Engenharia de software Computação distribuída Estrutura de dados Geometria computacional Topologia computacional Computação gráfica

O Sistema HiG-Flow

O sistema HiG-Flow foi desenvolvido durante o período do pós-doutorado na Faculdade de engenharia da Universidade do Porto no período de fevereiro de 2016 a janeiro de 2017 e ainda está em fase de desenvolvimento.

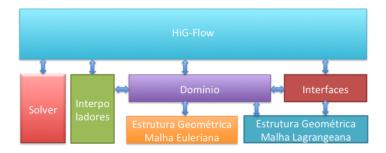
Os objetivos específicos do sistema HiG-Flow são a simulação numérica de escoamentos de fluidos com as seguintes características:

- Equações de Navier-Stokes para escoamentos monofásicos em quaisquer dimensão.
- Escoamentos newtonianos e newtonianos generalizados.
- Escoamentos viscoeásticos com técnicas de estabilização numérica.
- Escoamentos multifásicos utilizando a técnica da fronteira imersa e a forma de representação "front-tracking" (ainda em implementação).

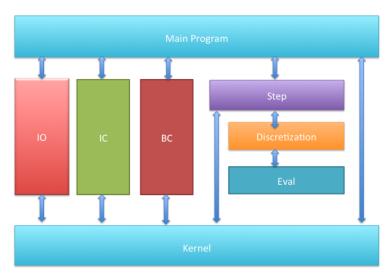
Estrutura do Sistema: HiG-Tree – HiG-Flow



Estrutura do Sistema: HiG-Tree



Estrutura do Sistema: HiG-Flow



Discretização Espaço-Temporal

Foram implementados os mais tradicionais métodos para avanço temporal. Os métodos explícitos implementados são:

- Método de Euler explícito.
- Método de Runge-Kutta TVD de segunda ordem ou método de Euler modificado.
- Método de Runge-Kutta TVD de terceira ordem.

Entre os métodos implícitos, foram implementados os seguintes métodos:

- Método de Euler implícito.
- Método de Crank-Nicolson.
- Método BDF de segunda ordem.

Discretização do Termo Convectivo

Quanto aos métodos para discretização do termo convectivo, foram implementados até o momento 4 esquemas clássicos:

- Esquema central.
- Esquema Upwind de primeira ordem
- Esquema Quick de segunda ordem.
- Método Cubista de segunda ordem (ainda em teste).

As equações governantes são expressas pela equação de conservação da massa

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{1}$$

e da equação da conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g} + \mathbf{F}, \tag{2}$$

$$\mathbf{T} = \frac{2(1-\beta)}{Re}\mathbf{D} + \mathbf{S},\tag{3}$$

Equações reológicas de estado podem ser escritos na forma compacta:

$$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{T} - \left[(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \mathbf{T} + \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{u} \right] = \frac{1}{De} \mathbf{M} (\mathbf{T}). \tag{4}$$

onde De é o número de Deborah e $\mathbf{M}\left(\mathbf{T}\right)$ é definido pelo modelo viscoelástico

$$\mathbf{M}\left(\mathbf{T}\right) = \begin{cases} \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D} - \mathbf{T} & \text{Oldroyd-B,} \\ \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D} - \mathbf{T} - \frac{\alpha \operatorname{Re} \operatorname{De}}{1-\beta} \mathbf{T} \cdot \mathbf{T} & \text{Giesekus,} \\ \frac{2(1-\beta)}{Re} \mathbf{D} - \left(1 + \frac{\epsilon \operatorname{Re} \operatorname{De}}{1-\beta} \operatorname{tr}\left(\mathbf{T}\right)\right) \mathbf{T} - \xi \operatorname{De}\left(\mathbf{T} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{T}\right) & \text{LPTT.} \end{cases}$$
(5)

Em geral a equação para o tensor de conformação ${\bf A}$ pode ser escrita como

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{A} - \left[\mathbf{A} \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^{\mathsf{T}} \mathbf{A} \right] = \frac{1}{De} \mathcal{M}(\mathbf{A}), \tag{6}$$

onde $\mathcal{M}(\mathbf{A})$ é uma função que depende do modelo da equação constitutiva

$$\mathcal{M}(\mathbf{A}) = \begin{cases} \mathbf{I} - \mathbf{A} & \text{Oldroyd-B,} \\ \mathbf{I} - \mathbf{A} - \alpha \left(\mathbf{A} - \mathbf{I} \right) \cdot \left(\mathbf{A} - \mathbf{I} \right) & \text{Giesekus,} \\ \left(1 + \frac{\epsilon \operatorname{Re} De}{1 - \beta} \operatorname{tr} \left(\mathbf{S} \right) \right) \left(\mathbf{I} - \mathbf{A} \right) - 2\xi \operatorname{De} \left(\mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{A} \right) & \text{LPTT.} \end{cases}$$
(7)

que pode ser reescrito como uma relação entre o tensor ${f S}$ e ${f A}$ dado por

$$\mathbf{S} = \frac{1 - \beta}{Re \, De} \left(\mathbf{A} - \mathbf{I} + 2De \, \mathbf{D} \right). \tag{8}$$

Fazendo a decomposição

$$\nabla \mathbf{u}^{\mathbf{T}} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{B} + \mathbf{N}\mathbf{A}^{-1},\tag{9}$$

onde Ω e N são tensores anti-simétricos, B é simétrico e comuta com A.

$$\frac{\partial \mathbb{k}(\mathbf{A})}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \,\mathbb{k}(\mathbf{A}) = \mathbf{\Omega} \mathbb{k}(\mathbf{A}) - \mathbb{k}(\mathbf{A})\mathbf{\Omega} + 2\mathbb{B} + \frac{1}{De}\mathbb{M}$$
 (10)

onde \mathbb{B} e \mathbb{M} são tensores simétricos construídos utilizando os tensores $\mathbf{D}_{\mathbb{B}}$ e $\mathbf{D}_{\mathbb{M}}$, respectivamente. Estes tensores são dados por

$$\mathbb{B} = \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{B}}\mathbf{O}^{T} = \mathbf{O}\widetilde{\mathbf{B}}\mathbf{\Lambda}\mathbf{J}\mathbf{O}^{T}$$

$$\mathbb{M} = \mathbf{O}\mathbf{D}_{\mathbb{M}}\mathbf{O}^{T} = \mathbf{O}\mathcal{M}(\mathbf{\Lambda})\mathbf{J}\mathbf{O}^{T}$$
(11)

Método Numérico Equação Constitutiva

$$\frac{\mathbb{k}^{n+1} - \mathbb{k}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \,\mathbb{k}^n = \mathbf{\Omega}^n \mathbb{k}^n - \mathbb{k}^n \mathbf{\Omega}^n + 2\mathbb{B}^n + \frac{1}{De} \mathbb{M}^n. \tag{12}$$

$$\frac{\mathbb{k}^{n+1} - \mathbb{k}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \,\mathbb{k}^n = \mathbf{\Omega}^n \mathbb{k}^{n+1} - \mathbb{k}^{n+1} \mathbf{\Omega}^n + 2\mathbb{B}^n + \frac{1}{De} \mathbb{M}^n.$$
 (13)

$$\mathbb{k}^{n+1} - \Delta t \ \mathbf{\Omega}^n \mathbb{k}^{n+1} + \mathbb{k}^{n+1} \Delta t \ \mathbf{\Omega}^n = \mathbb{k}^n + \Delta t \left[-\left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla\right) \mathbb{k}^n + 2\mathbb{B}^n + \frac{1}{De} \mathbb{M}^n \right]$$
(14)

Método Numérico Equação Constitutiva

Para facilitar a notação, considere o lado direito da equação (14) como sendo um tensor \mathbb{C} e $\bar{\Omega} = \Delta t \Omega$, e considerando $vec(\mathbb{k}) := X = \sum_{j=1}^{T} a_{j} T_{j}$

$$\begin{bmatrix} k_{11} & \cdots & k_{m1} & k_{12} & \cdots & k_{m2} & \cdots & k_{1m} & \cdots & k_{mm} \end{bmatrix}^{T}, \text{ temos} \\ \mathbb{k} - \overline{\Omega} \mathbb{k} - \mathbb{k} \overline{\Omega} = \mathbb{C} \\ (I - \overline{\Omega}) \mathbb{k} + \mathbb{k} \overline{\Omega} = \mathbb{C} \\ vec \left((I - \overline{\Omega}) \mathbb{k} \right) + vec \left(\mathbb{k} \overline{\Omega} \right) = vec \left(\mathbb{C} \right) \\ [I : (I - \overline{\Omega})] vec(\mathbb{k}) + (\overline{\Omega}^{T} : I) vec(\mathbb{k}) = vec(\mathbb{C}) \end{aligned}$$

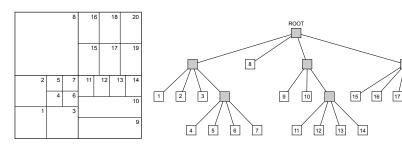
$$(15)$$

Como Ω é um tensor antissimérico e \mathbb{C} é um tensor simétrico, o sistema de equações a ser resolvido é dado por

$$(I: I - I: \bar{\Omega} - \bar{\Omega}: I) vec(\mathbb{k}) = vec(\mathbb{C})$$

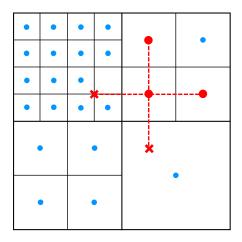
$$\mathbf{A}X = C$$
(16)

Estrutura HiG-Tree

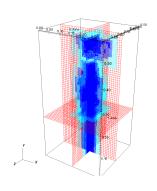


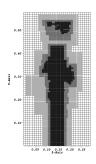
18 19

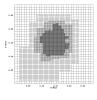
Aproximação das Derivadas



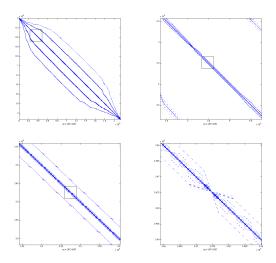
Domínio, Malha, Decomposição de Domínio



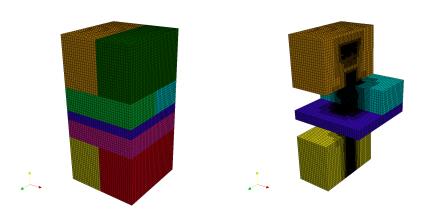




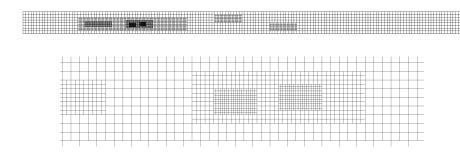
Domínio, Malha, Decomposição de Domínio



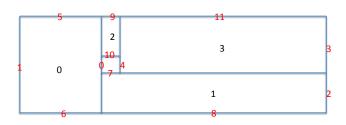
Domínio, Malha, Decomposição de Domínio



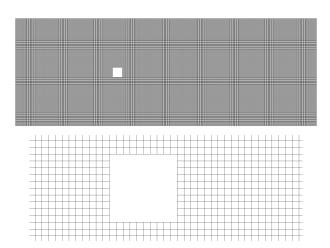
Canal



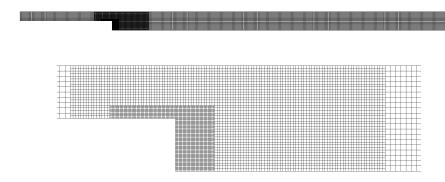
Esteira



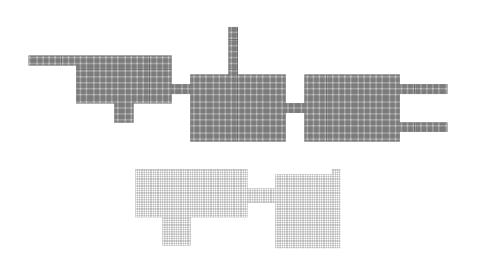
Esteira



Degrau

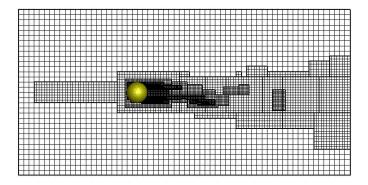


Domínio Complexo 2D

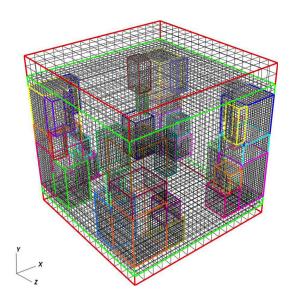


Esteira 3D

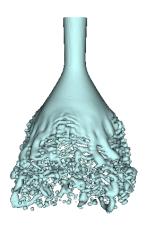




Refinamentos 3D



Spray 3D



Escoamento Complexo 3D

