Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

continuamos con….

Método de Volúmenes Finitos (FVM)

→ se usa fuertemente en fluidos → *Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)*

Ecuaciones de Navier-Stokes para un flujo incompresible 2D

Forma alternativa: ecs en términos de la vorticidad-función corriente (solo en 2D)

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \nabla^2 v_x$$

$$(\mathbf{v}\cdot\nabla)\, v_x$$

Se extiende fácilmente al caso 3D

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} + \nu \nabla^2 v_y$$

$$(\mathbf{v}\cdot\nabla)\, v_y$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v}$$

tomando div

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0$$ (incompresibilidad)

$$\nabla^2 p = -\rho\, \nabla \cdot [(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}]$$

Podemos reescribir las ecs de esta forma

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + \nabla \cdot (v_x \mathbf{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (p\, \hat{\mathbf{x}}) + \nu\, \nabla \cdot (\nabla v_x)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + \nabla \cdot (v_y \mathbf{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (p\, \hat{\mathbf{y}}) + \nu\, \nabla \cdot (\nabla v_y)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

Integramos en volumen (y aplicamos Gauss)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V v_x\, dV = -\int_S v_x \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}\, dS - \frac{1}{\rho} \int_S p\, n_x\, dS + \int_S \nu \nabla v_x \cdot \hat{\mathbf{n}}\, dS$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V v_y\, dV = -\int_S v_y \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}\, dS - \frac{1}{\rho} \int_S p\, n_y\, dS + \int_S \nu \nabla v_y \cdot \hat{\mathbf{n}}\, dS$$

$$\int_S \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}\, dS = 0$$

flujos

Lo que se hace es resolver primero para el campo de velocidades "sin la presión" y calcular posteriormente la presión para satisfacer la condición de divergencia nula (incompresibilidad) y luego actualizar el campo de velocidad con el gradiente de esta presión obtenida en el paso previo
→ se llama método de proyección

(también se lo conoce con el nombre de algoritmo SIMPLE)

Para fijar ideas, supongamos hacemos Euler en el tiempo y llamemos $A_{i,j}$ al término advectivo

y $D_{i,j}$ al término difusivo. El esquema sería:

$$\frac{\tilde{\mathbf{v}}_{i,j} - \mathbf{v}_{i,j}^{n}}{\Delta t} = -\mathbf{A}_{i,j}^{n} + \mathbf{D}_{i,j}^{n} \qquad \text{(paso 1)}$$

$$\frac{\mathbf{v}_{i,j}^{n+1} - \tilde{\mathbf{v}}_{i,j}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p \qquad \text{(paso 3)}$$

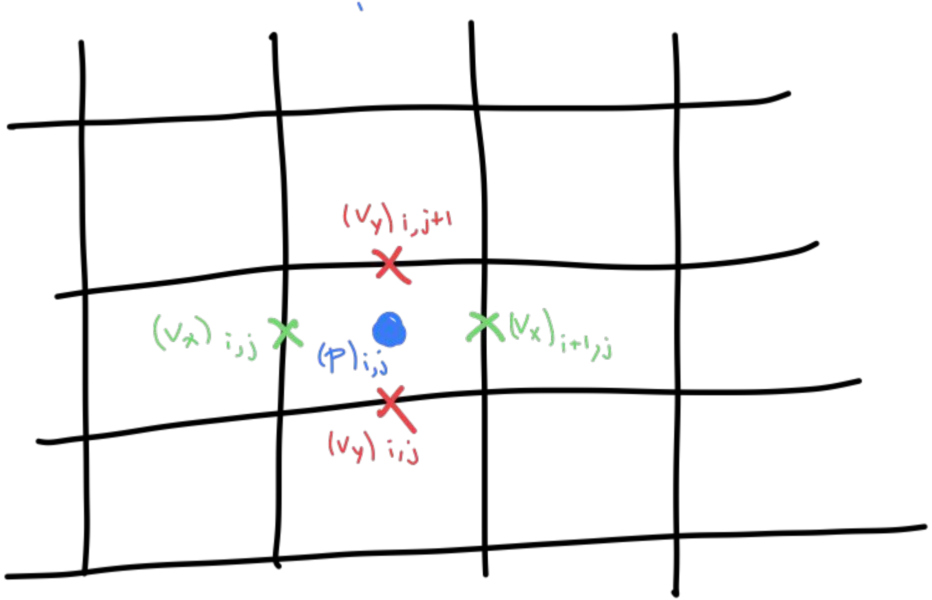
(paso 2)

donde p la obtenemos de la condición (al tomar divergencia)

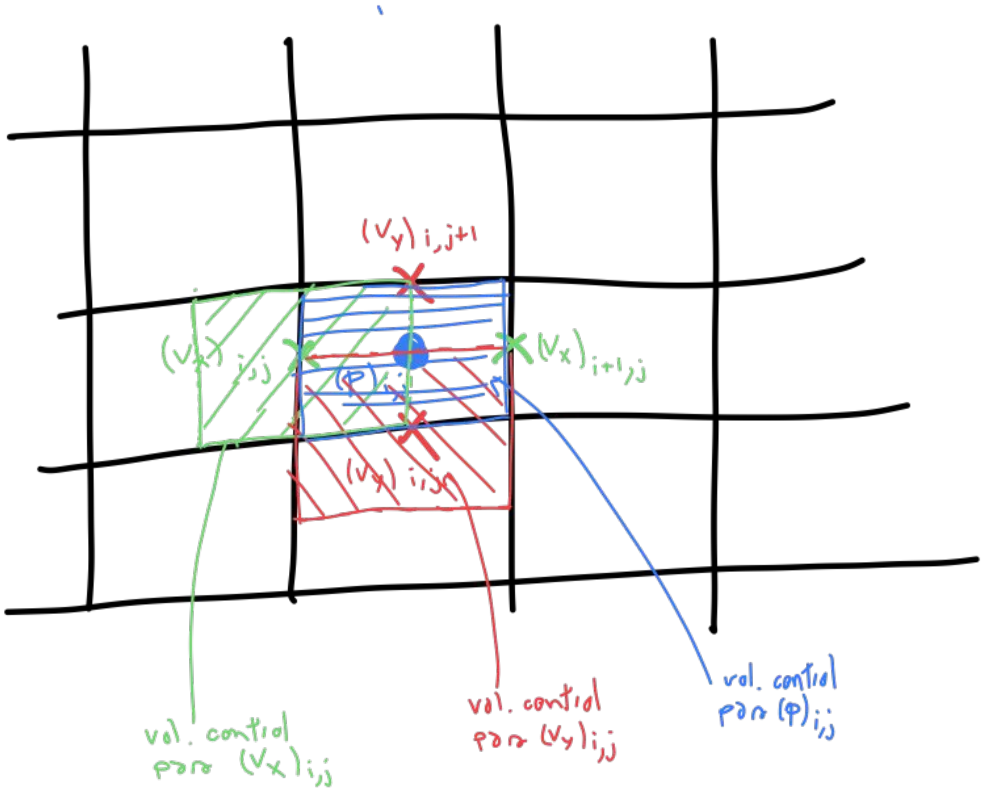
$$\frac{\nabla \cdot \mathbf{v}_{i,j}^{n+1} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{i,j}}{\Delta t} = \frac{-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{i,j}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\nabla^2 p$$

Se utiliza una grilla *escalonada = staggered*

→ el campo de velocidades y la presión se expresan en distintas grillas



y se usan correspondientes celdas de control



Para la parte “sin la presión” planteamos

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \tilde{v_x}\; dV = -\int_S v_x \mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{n}}\, dS + \int_S \nu\nabla v_x \cdot\hat{\mathbf{n}}\, dS$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \tilde{v_y}\; dV = -\int_S v_y \mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{n}}\, dS + \int_S \nu\nabla v_y \cdot\hat{\mathbf{n}}\, dS$$

y en la versión discreta,

$$\frac{\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{x}i,j} - \mathbf{v}_{\mathbf{x}i,j}}{\Delta t}\,\Delta x\Delta y = (v_x v_x)_o\Delta y - (v_x v_x)_e\Delta y + (v_x v_y)_s\Delta x - (v_x v_y)_n\Delta x + \nu\left[\left.\frac{\partial v_x}{\partial x}\right|_e\Delta y - \left.\frac{\partial v_x}{\partial x}\right|_o\Delta y + \left.\frac{\partial v_x}{\partial y}\right|_n\Delta x - \left.\frac{\partial v_x}{\partial y}\right|_s\Delta x\right]$$

$$\frac{\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{y}i,j} - \mathbf{v}_{\mathbf{y}i,j}}{\Delta t}\,\Delta x\Delta y = (v_y v_x)_o\Delta y - (v_y v_x)_e\Delta y + (v_y v_y)_s\Delta x - (v_y v_y)_n\Delta x + \nu\left[\left.\frac{\partial v_y}{\partial x}\right|_e\Delta y - \left.\frac{\partial v_y}{\partial x}\right|_o\Delta y + \left.\frac{\partial v_y}{\partial y}\right|_n\Delta x - \left.\frac{\partial v_y}{\partial y}\right|_s\Delta x\right]$$

Los valores de las velocidades los planteamos como

$$(v_x)_e = \frac{(v_x)_{i+1,j} + (v_x)_{i,j}}{2} \qquad (v_x)_o = \frac{(v_x)_{i,j} + (v_x)_{i-1,j}}{2} \qquad (v_x)_n = \frac{(v_x)_{i,j+1} + (v_x)_{i,j}}{2} \qquad (v_x)_s = \frac{(v_x)_{i,j} + (v_x)_{i,j-1}}{2}$$

$$(v_y)_e = \frac{(v_y)_{i+1,j} + (v_y)_{i,j}}{2} \qquad (v_y)_o = \frac{(v_y)_{i,j} + (v_y)_{i-1,j}}{2} \qquad (v_y)_n = \frac{(v_y)_{i,j+1} + (v_y)_{i,j}}{2} \qquad (v_y)_s = \frac{(v_y)_{i,j} + (v_y)_{i,j-1}}{2}$$

y los gradientes como

$$\left.\frac{\partial v_x}{\partial x}\right|_e = \frac{(v_x)_{i+1,j} - (v_x)_{i,j}}{\Delta x} \qquad \left.\frac{\partial v_x}{\partial x}\right|_o = \frac{(v_x)_{i,j} - (v_x)_{i-1,j}}{\Delta x} \qquad \left.\frac{\partial v_x}{\partial y}\right|_n = \frac{(v_x)_{i,j+1} - (v_x)_{i,j}}{\Delta y} \qquad \left.\frac{\partial v_x}{\partial y}\right|_s = \frac{(v_x)_{i,j} - (v_x)_{i,j-1}}{\Delta y}$$

$$\left.\frac{\partial v_y}{\partial x}\right|_e = \frac{(v_y)_{i+1,j} - (v_y)_{i,j}}{\Delta x} \qquad \left.\frac{\partial v_y}{\partial x}\right|_o = \frac{(v_y)_{i,j} - (v_y)_{i-1,j}}{\Delta x} \qquad \left.\frac{\partial v_y}{\partial y}\right|_n = \frac{(v_y)_{i,j+1} - (v_y)_{i,j}}{\Delta y} \qquad \left.\frac{\partial v_y}{\partial y}\right|_s = \frac{(v_y)_{i,j} - (v_y)_{i,j-1}}{\Delta y}$$

La presión la obtenemos de $\nabla^2 p = \frac{\rho\, \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{i,j}}{\Delta t}$

Lo podemos pensar cómo el resultado de aplicar FVM en la ec. de Poisson para la presión

$$\frac{p_{i-1,j} - 2p_{i,j} + p_{i+1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{p_{i,j-1} - 2p_{i,j} + p_{i,j+1}}{(\Delta y)^2} = \frac{\rho}{\Delta t}\left[\frac{(\tilde{v_x})_{i+1,j} - (\tilde{v_x})_{i,j}}{\Delta x} + \frac{(\tilde{v_y})_{i,j+1} - (\tilde{v_y})_{i,j}}{\Delta y}\right]$$

y finalmente actualizamos el campo de velocidades con el gradiente de la presión,

(lo podemos obtener de aplicar FVM en la ec. del gradiente de presión integrada en la celda de velocidad)

$$\frac{(v_x)_{i,j}^{n+1} - (\tilde{v_x})_{i,j}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\Delta x}$$

$$\frac{(v_y)_{i,j}^{n+1} - (\tilde{v_y})_{i,j}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho}\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\Delta y}$$

Lo resolvemos cómo un problema de matrices → Poisson

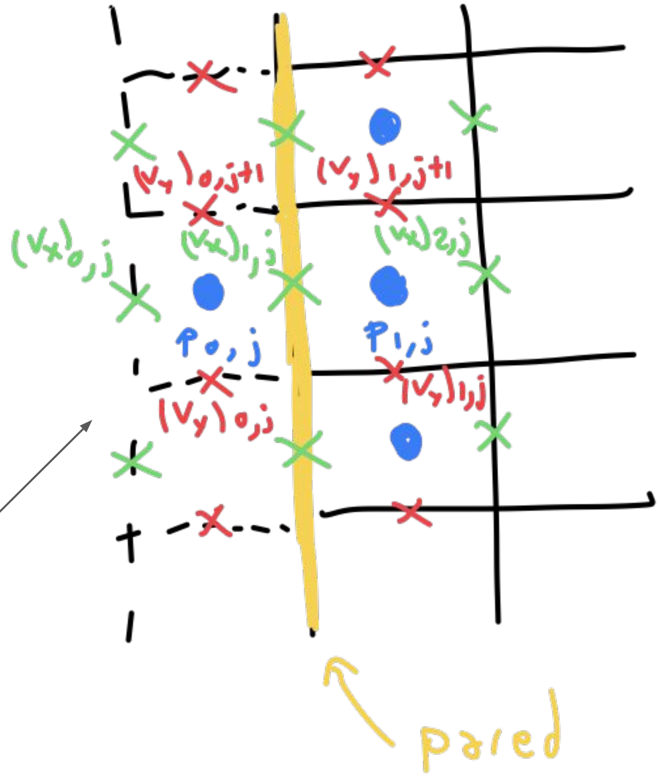
Cómo considerar los bordes (si las c.c. no son periódicas)

$$v_x\big|_{pared} = 0 \qquad\qquad v_y\big|_{pared} = v_p$$

$$(v_x)_{1,j} = 0 \ \ \forall j$$

$$\frac{(v_y)_{1,j} + (v_y)_{0,j}}{2} = v_p \quad , \forall j$$

Idem en las otras paredes



celdas “fantasma”

Para la c.c. de la presión se hace lo siguiente:

De la ec. de continuidad (div v = 0)

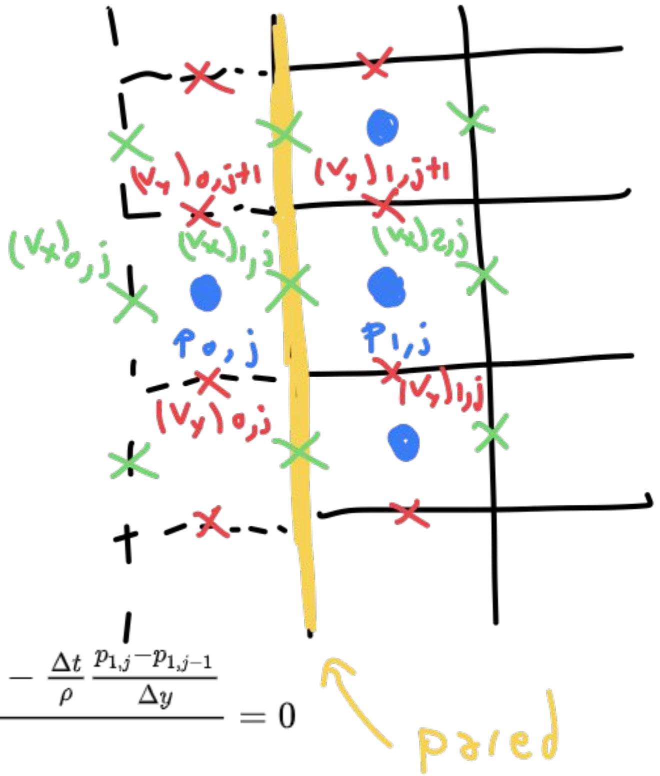
$$\frac{(v_x)_{2,j}^{n+1} - (v_x)_{1,j}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{(v_y)_{1,j+1}^{n+1} - (v_y)_{1,j}^{n+1}}{\Delta y} = 0$$

$$(v_x)_{1,j}^{n+1} = 0 \qquad \Rightarrow \frac{(v_x)_{2,j}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{(v_y)_{1,j+1}^{n+1} - (v_y)_{1,j}^{n+1}}{\Delta y} = 0$$

$$(v_x)_{i,j}^{n+1} = (\tilde{v_x})_{i,j} - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}\bigg|_{i,j}$$

$$\Rightarrow \frac{(\tilde{v_x})_{2,j} - \frac{\Delta t}{\rho}\frac{p_{2,j}-p_{1,j}}{\Delta x}}{\Delta x} + \frac{(\tilde{v_y})_{1,j+1} - \frac{\Delta t}{\rho}\frac{p_{1,j+1}-p_{1,j}}{\Delta y} + (\tilde{v_y})_{1,j} - \frac{\Delta t}{\rho}\frac{p_{1,j}-p_{1,j-1}}{\Delta y}}{\Delta y} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{p_{2,j} - p_{1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{p_{1,j+1} - 2p_{1,j} + p_{1,j-1}}{(\Delta y)^2} = \frac{\rho}{\Delta t}\left[\frac{(\tilde{v_x})_{2,j}}{\Delta x} + \frac{(\tilde{v_y})_{1,j+1} - (\tilde{v_y})_{1,j}}{\Delta y}\right]$$



Una alternativa para NS incompresible en 2D: formulación de la vorticidad-función corriente

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu \nabla^2 v_x$$

$$\mathbf{v} = v_x(x,y,t)\,\hat{\mathbf{x}} + v_y(x,y,t)\,\hat{\mathbf{y}}$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} + \nu \nabla^2 v_y$$

$$\nabla p$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v}$$

Definimos la vorticidad $\mathbf{w} = \nabla \times \mathbf{v} = \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y}\right)\hat{\mathbf{z}}$

Tomando rotor en NS resulta:

$$\frac{\partial w_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial w_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial w_z}{\partial y} = \nu \nabla^2 w_z$$

Por otro lado, de la incompresibilidad, $\nabla \cdot \mathbf{v} = \dfrac{\partial v_x}{\partial x} + \dfrac{\partial v_y}{\partial y} = 0$

que se satisface automáticamente definiendo la función corriente, $v_x = \dfrac{\partial \psi}{\partial y} \quad , \quad v_y = -\dfrac{\partial \psi}{\partial x}$

Reemplazando en la ec. de vorticidad queda,

$$\frac{\partial w_z}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial w_z}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial w_z}{\partial y} = \nu \nabla^2 w_z$$

$[w_z, \psi]$ $\longrightarrow$ corchete Poisson

y además $w_z = -\nabla^2 \psi$

sale de $w_z = \dfrac{\partial v_y}{\partial x} - \dfrac{\partial v_x}{\partial y}$

Se resuelve evolucionando la ec. de vorticidad,

$$\frac{\partial w_z}{\partial t} = -\frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial w_z}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial w_z}{\partial y} + \nu \nabla^2 w_z$$

discretizando las derivadas (en grilla centrada = “*colocada*”)

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \simeq \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta y} \qquad \frac{\partial \psi}{\partial x} \simeq \frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial w_z}{\partial y} \simeq \frac{(w_z)_{i,j+1} - (w_z)_{i,j-1}}{2\Delta y} \qquad \frac{\partial w_z}{\partial x} \simeq \frac{(w_z)_{i+1,j} - (w_z)_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

$$\nabla^2 w_z \simeq \frac{(w_z)_{i+1,j} + (w_z)_{i-1,j} - 2(w_z)_{i,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{(w_z)_{i,j+1} + (w_z)_{i,j-1} - 2(w_z)_{i,j}}{(\Delta y)^2}$$

y la función corriente debe satisfacer una ec. de Poisson $\nabla^2 \psi = -w_z$

$\rightarrow$ se resuelve con algún método iterativo

Comentario extra: slope/flux limiters → se usan en FVM cuando hay gradientes fuertes de las cantidades

Idea (en 1D)

flujos

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x}\left[F(u_{i+1/2}) - F(u_{i-1/2})\right]$$

Se propone:

$$F(u_{i+1/2}) = f^{baja}_{i+1/2} - \phi(r_i)\left(f^{baja}_{i+1/2} - f^{alta}_{i+1/2}\right)$$

$$F(u_{i-1/2}) = f^{baja}_{i-1/2} - \phi(r_{i-1})\left(f^{baja}_{i-1/2} - f^{alta}_{i-1/2}\right)$$

$f^{baja} =$ flujo de baja resolución

$f^{alta} =$ flujo de alta resolución

$\phi(r) =$ limitador de flujo

$$r_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{u_{i+1} - u_i}$$

$\phi(r) \geq 0$

$\phi(r) = 0$ → se usa aprox para el flujo de baja resolución

$\phi(r) = 1$ → se usa aprox para el flujo de alta resolución

limitador "Charm"

$$\phi(r) = \frac{r(3r+1)}{(r+1)^2}\ , \quad r \geq 0$$

$$\phi(r) = 0\ , \quad r < 0$$