



Resumos

Abstracts

Sessão: Análise Numérica e
Dinâmica de Fluidos Computacional

*Session: Numerical Analysis and
Computational Fluid Dynamics*

Organizadores

Organizers

Cassio Oishi - UNESP
cassiooishi@gmail.com

Fabricio Simeoni de Sousa - ICMC/USP
f.s.sousa@gmail.com

Formulações de elementos finitos e simulação multifísica

Agnaldo M. Farias¹, Philippe Devloo², Sônia M. Gomes¹

IMECC-Unicamp¹, FEC-Unicamp²

Resumo

Na base da tecnologia de elementos finitos encontram-se o que chamamos de espaços de aproximação, cuja construção envolve o particionamento do domínio em um número finito de elementos, sobre os quais são definidas as funções básicas, por partes. Em problemas acoplados, envolvendo diferentes fenômenos físicos, a escolha desses espaços pode variar conforme a necessidade de precisão e/ou necessidade de satisfação da conservação de quantias de interesse a nível local. Se um único espaço de aproximação for utilizado para todas as variáveis de estado na mesma simulação, podem ocorrer instabilidades nos algoritmos ou resultados com baixa precisão. Um dos principais focos desta pesquisa está na combinação de diferentes espaços de aproximação, chamados de espaços multifísicos, que contribuem no sentido de permitir a simulação de problemas com diferentes fenômenos físicos acoplados.

Modelos de simulações multifísicas têm sido amplamente estudados recentemente por terem uma ampla variedade de aplicações. Além disso, problemas multifísicos ocorrem em diversas áreas científicas, tais como bioengenharia, físico-química, Engenharia de Petróleo, etc. Na engenharia de petróleo tais problemas são caracterizados por interações de vários fenômenos. Tem-se, por exemplo, o problema de escoamento multifásico que é a interação do escoamento de fluido no meio poroso, dado pela equação de Darcy, com transporte de componentes. Outro fenômeno que pode ocorrer é a interação de deslocamento do sólido com a pressão de fluido no meio poroso, que é tratada no contexto de poroelasticidade consolidada por Biot.

As implementações computacionais deste trabalho são realizadas no NeoPZ, que é um ambiente de programação científica de código fonte livre e orientado a objeto. O NeoPZ inclui classes que contemplam diferentes tipos de espaços de aproximação, tais como espaço de funções em H^1 (contínuas), de funções descontínuas (L^2)

e espaços $Hdiv$ -conformes. No entanto, apenas um único espaço de aproximação era permitido em uma dada simulação. Sendo assim, foi necessário desenvolver uma estrutura de classes de modo a permitir uma interação, de maneira flexível, entre esses espaços e de contemplar simulações multifísicas.

On the Computation of the Matrix Logarithm

Awad H. Al-Mohy*

*Department of Mathematics,
King Khalid University, Abha, Saudi Arabia

Resumo

A matrix $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ is the logarithm of a matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ if and only if $e^X = A$. Equivalently, A has a logarithm if and only if A has no eigenvalues on \mathbb{R}^- , the closed negative real axis. If the imaginary parts of the eigenvalues of X lie in the interval $(-\pi, \pi)$, the logarithm, $\log(A)$, is unique and called *the principal logarithm*.

The inverse scaling and squaring method is a popular method for computing the matrix logarithm. It is an extension to matrices of the technique that Briggs used in the 17th century to compute his table of logarithms. The method first computes $A^{1/2^s}$, for an integer s large enough so that $A^{1/2^s}$ is close to the identity, then approximates $\log(A^{1/2^s})$ by $r_m(A^{1/2^s} - I)$, where r_m is an $[m/m]$ Padé approximant to the function $\log(1 + x)$, and finally forms the approximation $\log(A) \approx 2^s r_m(A^{1/2^s} - I)$. This approximation exploits the identity

$$\log(A) = 2^s \log(A^{1/2^s}).$$

In this work we make several improvements to the method. We introduce backward error analysis to replace the previous forward error analysis; obtain backward error bounds in terms of the quantities $\|A^p\|^{1/p}$, for several small integer p , instead of $\|A\|$, on which the existing algorithms are based; and use special techniques to compute the argument of the Padé approximant more accurately. We derive one algorithm that employs a Schur decomposition, and thereby works with triangular matrices, and another that requires only matrix multiplications and the solution of multiple right-hand side linear systems. Numerical experiments show the new algorithms to be generally faster and more accurate than their existing counterparts and suggest that the Schur-based method is the method of choice for computing the matrix logarithm.

Numerical Solution to Stokes Equations on the block structured adaptive mesh refinement approach including matrices representation

Hector D. Ceniceros[†], Alexandre M. Roma[‡], Catalina M. Rúa*

[†] UCSB Santa Barbara - California, USA

[‡] USP - São Paulo, SP

* UdeNar, San Juan de Pasto, Colombia

Resumo

The present work has been motivated by the study of incompressible flows at low Reynolds numbers. In the limit, as the Reynolds number approaches to zero, the dynamics of the system is modeled by the steady Stokes equations. An adaptive version of Uzawa Method using the Biconjugate gradient stabilized method and some matrices representation are proposed to solve those equations with Dirichlet boundary conditions on locally refined grids [1]- [2]. Adaptive mesh refinements increase locally the resolution of the method to improve accuracy at low computational cost and the matrices allow us to use preconditioners [4].

A finite difference approach is used for the discretization of the fluid velocity in a staggered fashion and Uzawa Method is employed to handle the pressure-velocity coupling in primitive variables [3]. To solve the resulting set of algebraic equations, the matrix representing the discretization on the adaptive grid is built and the related linear system solved by PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation, www.mcs.anl.gov/petsc) library.

We are interesting in give the numerical results to impose problems and test several methods with suitable preconditioners to solve some linear systems.

Referências

- [1] Berger, M. J.; Colella, P. *Local Adaptive Mesh Refinement for shock hydrodynamics*. Journal of Computational physics 82, 64-84 (1989).

- [2] Kim, S.D. *Uzawa algorithms for coupled Stokes equations from the optimal control problem.* CALCOLO 46, 37-47 (2009).
- [3] Klein, H. D.; Leal, L. G.; Garcia-Cervera, C. J. and Ceniceros H. D.; *Computational studies of the shear flow behaviour of a model for nematic liquid crystalline polymers.* ANZIAM J. 46, C210-C244, (2005).
- [4] Pletzer, A.; Jamroz B.; Crockett R.; Sides, S. *Compact cell-centered discretization stencils at fine-coarse block structured grid interfaces.* Journal of Computational physics 260, 25-36, (2014).

Um método Lagrangiano-Euleriano para aproximação de leis de balanço e de leis de conservação hiperbólica

Eduardo Abreu*

*Departamento de Matemática Aplicada, IMECC,
UNICAMP

Resumo

Neste trabalho é proposto o uso de uma formulação espaço-tempo Lagrangiana-Euleriana localmente conservativa por construção, introduzida originalmente na literatura no contexto de equações parabólicas de convecção-difusão [1, 2], para o desenvolvimento de um novo esquema conservativo local e sua aplicação em problemas na forma de leis de balanço [4, 5] e de leis de conservação hiperbólica [4, 5, 3]. O esquema Lagrangiano-Euleriano em questão foi desenhado para ser independente de uma estrutura particular do termo fonte relacionado com o termo de relaxação dos modelos de leis de balanço [7]. O método proposto também não dependente da resolução local de problemas de Riemann, porém se tais soluções de Riemann estão disponíveis para um determinado modelo em particular então é algo natural incorporar tais informações no algoritmo, proporcionando assim flexibilidade para o desenvolvimento de distintas estratégias computacionais com respeito ao modelo diferencial específico sob investigação. Experimentos numéricos representativos para problemas não-lineares de leis de conservação hiperbólica e de leis balanço, nos casos escalar e sistema, em uma e em duas dimensões espaciais, citados na literatura [7, 6] serão apresentados para ilustrar o desempenho do novo método. Os resultados numéricos obtidos são comparados com soluções aproximadas precisas ou com soluções exatas sempre que possível.

Referências

- [1] J. Douglas, F. Pereira and L-MYeh, *A locally conservative Eulerian-Lagrangian numerical method and its application to nonlinear transport in porous media*, Comput. Geosciences 4(1) (2000) 1-40.

- [2] J. Douglas Jr. and C-S Huang, *A Locally Conservative Eulerian-Lagrangian Finite Difference Method for a Parabolic Equation*, BIT Numerical Mathematics 41(3) (2001) 480-489.
- [3] J. Aquino, A. S. Francisco, F. Pereira and H. P. Amaral Souto, *An overview of Eulerian-Lagrangian schemes applied to radionuclide transport in unsaturated porous media*, Progress in Nuclear Energy 50 (2008) 774-787.
- [4] E. Abreu and J. Perez, *Design of a well balanced Lagrangian approximation scheme for balance laws, poster*, 29º Colóquio Brasileiro de Matemática do Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, Brazil (2013).
- [5] E. Abreu and J. Perez, *Lagrangian Approximation Schemes for Balance Laws, poster*, VII Encontro Nacional de Matemática e Aplicações (VII ENAMA) / UNIRIO - Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil (2013).
- [6] I. Christov and B. Popov, *New non-oscillatory central schemes on unstructured triangulations for hyperbolic systems of conservation laws*, Journal of Computational Physics 227 (2008) 5736-5757.
- [7] L. Gosse, *Computing Qualitatively Correct Approximations of Balance Laws Exponential-Fit, Well-Balanced and Asymptotic-Preserving*, SI-MAI Springer Series (2013) vol 2.

Performance of Projection Methods for Low-Reynolds-Number Flows

F. S. Sousa^{1*}, C. M. Oishi² and G. C. Buscaglia¹

¹Department of Applied Mathematics and Statistics,
Universidade de São Paulo (ICMC-USP), São Carlos, SP,
Brazil

² Department of Mathematics and Computer Science,
Universidade Estadual Paulista (UNESP), Presidente
Prudente, SP, Brazil.

Resumo

The Navier-Stokes equations, modelling incompressible viscous Newtonian flows, can be written in non-dimensional form as

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} \quad \text{in } [0, T] \times \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } [0, T] \times \Omega, \end{aligned} \quad (1)$$

where t is time, \mathbf{u} is the velocity vector field, p is the pressure scalar field. The non-dimensional quantity Re is known as Reynolds number, and represents the relation between kinematic and viscous forces, characterising the fluid flow. Additionally, \mathbf{f} is a body-force that may be acting on the fluid. All these quantities are defined in a closed domain $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ or 3) for $t \in [0, T]$.

It is a well known fact that the system (1) has a strong coupling between velocity and pressure variables, and to avoid the solution of large coupled systems, a class of “projection” or “fractional step” methods were early designed [1, 2]. The basic idea behind these methods is to compute a tentative velocity field by using the momentum equation (1), which does not generally satisfy the continuity equation. Then, by using the Helmholtz-Hodge decomposition theorem, the intermediate velocity is projected to a divergence free subspace, to finally produce a solenoidal velocity field. In the last decades, since the introduction of the concept of projection method at the end of 1960s, many researchers have made a tremendous effort to extend, analyse and implement variations of the projection method, with special interest in obtaining second-order accuracy in time [3, 4, 5, 6]. In the classical approach, the splitting is first performed on the continuous differential equations, before any spatial

discretization, leading to a set of differential equations to be solved sequentially. In order to avoid artificial boundary condition issues with this methodology, algebraic splitting methods were designed [7, 8]. Different than the classical approach, the splitting is performed after spacial and temporal discretizations, decoupling the resulting algebraic system by using suitable matrix decompositions techniques [9].

With the growing interest in modelling flows in millimetric and micrometric scales, numerical methods have to be adapted to new posed challenges. Usually, this type of flows are characterised by low Reynolds numbers ($Re \ll 1$), which requires implicit time discretization schemes. In this work, we investigate the performance of projection methods (of the algebraic-splitting kind) for the computation of steady-state simple benchmark problems. The most popular approximate factorization methods are assessed, together with two so-called exact factorization methods. The results show that:

- (a) The error introduced by non-incremental schemes on the steady state solution is unacceptably large even in the simplest of flows.
- (b) Incremental schemes have an optimal time step δt^* so as to reach the steady state with minimum computational effort. Taking $\delta t = \delta t^*$ the code reaches the steady state in not less than a few hundred time steps. Such a cost is significantly higher than that of solving the velocity-pressure coupled system, which can compute the steady state in one shot.
- (c) If δt is chosen too large (in general δt^* is not known), then thousands or tens of thousands of time steps are required to reach the numerical steady state with incremental projection methods. The numerical solutions of these methods follow a time-step-dependent spurious transient which makes the computation of steady states prohibitively expensive.

Referências

- [1] A. J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comput.*, 2:745–762, 1968.
- [2] T. Temam. Sur l’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes par la méthode de pas fractionnaires (ii). *Arch. Ration. Mech. An.*, 33:377–385, 1969.
- [3] J. B. Bell, P. Colella, and H. M. Glaz. A second order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 85:257–283, 1989.
- [4] J. Shen. On error estimates of the projection methods for the Navier-Stokes equations: second-order schemes. *Math. Comput.*, 65:1039–1065, 1996.

- [5] J.C. Strikwerda and Y.S. Lee. The accuracy of the fractional step method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37:37–47, 1999.
- [6] J.L. Guermond, P. Minev, and J. Shen. An overview of projection methods for incompressible flows. *Comput. Method. Appl. Mech. Eng.*, 195:6011–6045, 2006.
- [7] J.B. Perot. An analysis of the fractional step method. *J. Comput. Phys.*, 108:51–58, 1993.
- [8] A. Quarteroni, F. Saleri, and A. Veneziani. Factorization methods for the numerical approximation of Navier-Stokes equations. *Comput. Method. Appl. Mech. Eng.*, 188:505–526, 2000.
- [9] M. Lee, D. Oh, and Y.B Kim. Canonical fractional-step methods and consistent boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 168:73–100, 2001.

A Finite Extendable Non-linear Elastic Model applied to simulations of some complex flows

Gilcilene Sanchez de Paulo*

*Faculdade de Ciências e Tecnologia (FCT), UNESP - Univ
Estadual Paulista, Departamento de Matemática e
Computação, Presidente Prudente/SP, Brazil.

Resumo

The Finite Extendable Nonlinear Elastic-Chilcott and Rallison (FENE-CR) constitutive equation introduced by Chilcott and Rallison [1] was derived using a dumbbell theory and it is known to describe Boger type fluids. Herein, the two-dimensional numerical simulations of viscoelastic flows described by the FENE-CR constitutive equation with a Newtonian solvent contribution are presented, specifically for the problems: fully-developed flow in a channel [2], flow in a cross-slot geometry [3], the impacting drop and the jet buckling problems [4]. Firstly, to verify the numerical technique, the analytic solution for fully-developed channel flow is derived and used to confirm the correctness and accuracy of the numerical code employed. The cross-slot geometry has been employed for extensional rheology measurements and, more recently, to investigate purely-elastic flow instabilities of viscoelastic fluids. For this problem, it is discussed whether the observed flow features reported by Rocha et al. [5] can be predicted by the finite difference method adopted here. The time-dependent jet flow originated from a jet impinging on a flat surface is even presented. It is known that when the molecules stretch indefinitely (by letting the extensibility parameter $L \rightarrow \infty$) the FENE-CR constitutive equation reduces to the Oldroyd-B model. A sequence of numerical solutions of a free surface flow problem is studied by using the extensional viscosity property and then, the convergence of these solutions from the FENE-CR model to the solution obtained with the Oldroyd-B model is also displayed. Besides presenting a quantitative verification of the numerical methodology applied to the impacting drop problem, the influence of the finite extensibility parameter and of the Reynolds and Weissenberg numbers on the time evolution of the drop width are also presented. Details about these numerical results and the numerical methodology are found in [6, 7].

Referências

- [1] M.D. Chilcott, J.M. Rallison, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, 29 (1988) 381-432.
- [2] D.O.A. Cruz and F.T. Pinho, *J. Non-Newt. Fluid Mech*, 132 (2005) 28-35.
- [3] A.M. Afonso, M.A. Alves, and F.T. Pinho, *J. Non-Newt. Fluid Mech*, 165 (2010) 743-751.
- [4] C.M. Oishi, F.P. Martins, M.F. Tomé, and M.A. Alves, *J. Non-Newt. Fluid Mech*, 169-170 (2012) 91-103.
- [5] G.N. Rocha, R.J. Poole, M.A. Alves, P.J. Oliveira, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, 156 (2009) 58-69.
- [6] G.S. Paulo, C.M. Oishi, M.F. Tomé, M.A. Alves, and F.T. Pinho, *J. Non-Newt. Fluid Mech*, 2014 (2014) 50-61.
- [7] G.S. Paulo, C.M. Oishi, and M.F. Tomé, *AIP Conference Proceedings*, 1558 (2013) 66; doi:10.1063/1.4825422.

Investigando o Uso da Técnica de *Level-Set* com *Funções de Bases Radiais* no Método *Marker-and-Cell*

João Paulo Gois¹, Alexandre de Lacassa²
Fernando P. Martins²
Cassio M. Oishi²

Universidade Federal do ABC¹
Universidade Estadual Paulista²

Resumo

No presente trabalho investigamos e implementamos técnicas numéricas para a representação de interfaces (superfícies livres) entre fluidos simulados computacionalmente. Em particular, estudamos os recentes avanços de métodos *Level-Set* (LS) com representações via Funções de Bases Radiais (*Radial Basis Functions - RBF*). Através de resultados preliminares, podemos assegurar que o método LS com RBF pode ser eficiente na preservação de massa, geometria e topologia da superfície livre simulada. Por outro lado, o custo computacional (tempo/memória) associado a RBF torna o problema desafiador no que tange o custo total do processo de simulação de escoamento dos fluidos. Os métodos implementados estão sendo incorporados na metodologia *Marker-and-Cell* (MAC), desenvolvidos no sistema *Freeflow*. Pretendemos aplicar o arcabouço desenvolvido principalmente na simulação de fluidos multifásicos com alta viscosidade e com suporte à mudança de topologia.

Transporte e ressuspensão de sedimentos finos por ondas sobre um leito viscoelástico

Juliana S. Ziebell*, Leandro Farina**

*Instituto de Matemática, Estatística e Física, IMEF, FURG,
96201-900, Rio Grande, RS

**UFRGS - Instituto de Matemática Pura e Aplicada
91509-900, Porto Alegre, RS

Resumo

Soluções numéricas da equação do transporte unidimensional que descrevem a evolução da concentração de sedimentos suspensos sobre um leito viscoelástico foram obtidas para alguns casos particulares. Quando a onda aquática se propaga sobre uma camada de lama viscoelástica que tem uma faixa erodível de comprimento L , a equação do transporte é modificada. Usando o modelo viscoelástico generalizado de [1] para definir a camada de lama viscoelástica, obtemos uma nova equação do transporte unidimensional para esse mesmo problema.

Referências

- [1] C. C. Mei, M. Krotov, and Z. Huang, *Short and long waves over a muddy seabed*, J. Fluid. Mech., vol. 643, 33-58, 2010.
- [2] C. O. Ng and C. H. Wu, *Dispersion of suspended particles in a wave boundary layer over a viscoelastic bed*, International Journal of Engineering Science, vol. 46, 50-65, 2008.

Métodos Numéricos Rigorosos para EDPs

Marcio Gameiro*

*Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brazil.

Resumo

Apresentamos um método numérico para calcular rigorosamente (provar a existência de) soluções de EDPs. O método apresentado, chamado de *Continuação Rigorosa* (ver [1, 2, 3, 4]), é um método para calcular curvas de soluções de EDPs que dependem de um parâmetro. Combinando soluções numéricas obtidas a partir do método previsor-corretor com cálculos rigorosos usando aritmética intervalar e estimativas analíticas, este método numérico rigoroso verifica que a solução calculada numericamente pode ser usada para definir explicitamente um conjunto que contém uma única solução do problema original.

A filosofia do método pode ser descrita, em linhas gerais, como segue. Para provar, de uma maneira construtiva, assistida pelo computador, a existência de uma solução específica (por exemplo uma solução de equilíbrio, uma órbita periódica, uma órbita heterococlínica, etc.) para uma equação diferencial não linear, primeiramente escrevemos o problema como

$$f(x) = 0, \tag{1}$$

onde $f : X \rightarrow W$ é um operador não linear, X e W são espaços de Banach e as soluções x de (1) correspondem às soluções procuradas da equação diferencial.

A segunda etapa é encontrar uma solução aproximada $\bar{x} \in X$ de (1). Se o espaço de Banach X tem dimensão finita, isto pode ser feito por meio de um método iterativo como o método de Newton, enquanto que se X é um espaço de dimensão infinita, a mesma abordagem pode ser aplicada à uma projeção finita de f . A terceira etapa consiste na construção de um operador não linear $T : X \rightarrow X$ que satisfaça duas propriedades. Primeiro, deve ser definido de forma que os zeros de f estejam em correspondência um a um com os pontos fixos de T , isto é, $f(x) = 0$ se, e somente se, $T(x) = x$. Segundo, T deve ser construído de forma que possa ser uma contração perto da solução numérica \bar{x} . Em particular, T pode ser construído como um

operador do tipo Newton em torno da aproximação numérica \bar{x} . A etapa final e mais elaborada tem por objetivo procurar a existência de um conjunto $B \subset X$ centrado em \bar{x} que contenha um zero do operador não linear f . A idéia da realização de tal tarefa é encontrar $B \subset X$ tal que $T : B \rightarrow B$ seja uma contração, e então usar o Teorema do Ponto Fixo de Banach para concluir a existência de um único ponto fixo de T em B .

Apresentamos aplicações para provar a existência de soluções de equilíbrio e soluções periódicas de algumas EDPs definidas em domínios de dimensão dois e três.

Referências

- [1] Marcio Gameiro, and Jean-Philippe Lessard; *Analytic estimates and rigorous continuation for equilibria of higher-dimensional PDEs*, Journal of Differential Equations, 249, no. 9, pp. 2237-2268, (2010).
- [2] Marcio Gameiro, and Jean-Philippe Lessard; *Rigorous computation of smooth branches of equilibria for the three dimensional Cahn-Hilliard equation*, Numerische Mathematik, 117, no. 4, pp. 753-778, (2011).
- [3] Marcio Gameiro, and Jean-Philippe Lessard; *Efficient rigorous numerics for high-dimensional PDEs via onedimensional estimates*, SIAM J. Numer. Anal., (2013).
- [4] Marcio Gameiro, Jean-Philippe Lessard, and Alessandro Pugliese; *Computation of smooth manifolds of solutions of PDEs via rigorous multi-parameter continuation*, Foundations of Computational Mathematics, (2014).

A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows

Márcio Ricardo Pivello*, Millena Martins Villar Valle,
Alexandre M. Roma, Aristeu da Silveira Neto

*UFU

Resumo

This work presents a computational methodology for the simulation of three-dimensional, two-phase flows, based on adaptive strategies for space discretization, as well as a varying time-step approach. The method is based on the Front-Tracking Method [3] and the discretization of the *Eulerian* domain employs a Structured Adaptive Mesh Refinement strategy [1] along with an implicit-explicit pressure correction scheme. Modelling of the *Lagrangian* interface was carried out with the GNU Triangulated Surface (GTS) library [2]. The methodology was applied to a series of rising bubble simulations and validated employing experimental results and literature numerics. Finally, the algorithm was applied to the simulation of two cases of bubbles rising in the wobbling regime. The use of adaptive mesh refinement strategies led to physically insightful results, which otherwise would not be possible in a serial code with a uniform mesh.

Referências

- [1] M. J. Berger and A. Jameson. *Automatic adaptive grid refinement for the euler equations*. American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal, 23(4):561-568, 1985.
- [2] S. Popinet. *GTS Library Reference Manual*, 2000.
- [3] S. A. Unverdi and G. Tryggvason. *A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows*. Journal of Computational Physics, 100:25-37, 1992.

Detailed vortex shedding flow formation on complex geometries

Millena Martins Villar Vale*, Márcio Ricardo Pivello,
Alexandre M. Roma, Aristeu da Silveira Neto

*UFU

Resumo

In this paper, the Immersed Boundary method is applied for simulating three-dimensional flow inside of complex geometries with high Reynolds numbers using an adaptive parallel strategy for space and time discretization. The method is based on the immersed boundary method of Wang, Fan e Luo (2008) which uses the direct formulation of fluid-solid interaction force. The spatial discretization of the Eulerian domain is based on the SAMR strategy of Berger and Colella (1989) where a projection method is employed for solving the Navier-Stokes equations, and the time integration algorithm is based on the IMEX scheme. To validate this algorithm, the study of flow past a sphere is detailed for several different flow regimes: steady-state laminar flow at a Reynolds number of 100, time-dependent laminar flow at $Re=300$ and turbulent flow at $Re=10000$. The use of adaptive mesh refinement strategies led to physically detailed results with low computational cost compared with a uniform mesh. For numerical simulation of turbulence the Large Eddy Simulation is used. In LES modelling the contribution of the large, energy-carrying structures to momentum and energy transfer is computed exactly, and only the effect of the smallest scales of turbulence is modeled. As an application of these numerical capabilities, a flow inside a complex structures with a set of tubes and valves is shown for a Reynolds of $4 \cdot 10^6$, as well as, the vortex shedding detail of a flow past a sphere.

Referências

- [1] Pivello, M. R., Villar, M. M. , Serfaty, R. , Roma, A. M. , Silveira-Neto, A. *A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows*. International Journal of Multiphase Flow, v. 58, p. 72-82, 2013.

- [2] Ceniceros, H. D. , Roma, A. M. , Silveira Neto, A. , Millena M.Villar. *A Robust, Fully Adaptive Hybrid Level-Set/Front-Tracking Method for Two-Phase Flows with and Accurate Surface Tension Computation.* Communications in Computational Physics (Online), v. 8, p. 51-94, 2010.
- [3] Fabian Denner, Duncan R. Van der Heul, Guido T. Oud, Millena M. Villar, Aristeu da Silveira Neto, Berend G. M. Van Wachem. *Comparative study of mass-conserving interface capturing frameworks for two-phase flows with surface tension.* International Journal of Multiphase Flow, v. 61, p.37-47, 2014.

On fluid-structure simulations in hemodynamics

P.J. Blanco*, G.D. Ares, S.A. Urquiza, R.A. Feijóo

*LNCC

Resumo

In the last years an increasing interest in fluid-structure patient-specific hemodynamic simulations has been witnessed due to the large amount of information these models are able to provide non-invasively at a low cost, concerning both: flow patterns of blood circulation as well as stress conditions of the arterial wall. Several and important aspects must be adequately considered towards obtaining realistic physiological environments for such simulations (initial conditions, boundary conditions, etc.). In this talk we will discuss relevant issues in fluidstructure hemodynamics modeling, namely (i) histologically-inspired constitutive models, (ii) fluid-structure interaction, (iii) consistent fluid-solid boundary data, (iv) existence of surrounding tissues, and (v) realistic baseline stress conditions. Particularly, we will discuss the importance of considering preload (due to pressure state) and pre-stretch (due to tethering forces) in the stress state obtained from the fluid-structure interaction simulations.

Turbulência: escalas, semelhança e o papel do número de Reynolds

Paulo Jabardo*, Gabriel Borelli, Gilder Nader e
Marcos Tadeu Pereira

*IPT-USP

Resumo

As equações de Navier-Stokes são conhecidas há quase 200 anos mas apesar de muito trabalho, a mecânica dos fluidos continua en volta de mistérios onde as diversas técnicas e abordagens, aplicadas com sucesso em outras áreas, deixam a desejar. A turbulência é a maior responsável por esta situação pois envolve flutuações aleatórias no tempo e espaço com escalas típicas variando, frequentemente, algumas ordens de grandeza.

Mas dentro desta “desordem” persistem estruturas coerentes que frequentemente dominam a dinâmica do escoamento e interagem entre si. Se por um lado, um modelo grosso não é capaz de descrever o que ocorre, por outro, muito detalhamento na modelagem dificulta a compreensão do que está acontecendo; perde-se o *insight*.

A popularização do CFD, resultado de computadores mais capazes e baratos e programas de computador que parecem mágica tem tido um impacto significativo mas nem sempre positivo na dinâmica dos fluidos. É muito fácil testar diversas configurações com várias condições de contorno, mas frequentemente sem compreensão do fenômeno em mão. Isto também afeta a maneira como são realizados alguns ensaios experimentais onde o objetivo passa a ser “validar” modelos de CFD sem compreender quais os aspectos mais importantes e quais as vantagens e desvantagens de cada método. Enquanto isso, métodos tradicionais são desprezados.

Este trabalho tem por objetivo mostrar algumas das principais características de escoamentos turbulentos analisando um ensaio realizado em túnel de vento da dispersão de gases quentes saindo de um conjunto de chaminés. O ensaio de modelos em escala reduzida requer aproximações que se assemelham a técnicas de aproximação empregadas em métodos computacionais e analíticos. Neste contexto o túnel de vento é um computador analógico onde a turbulência pode ser bem simulada mesmo se alguns aspectos do escoamento não puderem ser modelados.

Neste trabalho estudou-se como se dispersam os gases de combustão que saem de 4 chaminés em uma plataforma de petróleo. O diâmetro de cada chaminé é de 2,5 m e a vazão em massa de cada uma é de 90 kg/s. A composição do gás é muito próxima do ar e assim, é admitido que ar quente a 450°C sai de cada chaminé. Estes gases quentes saindo da chaminé interagem com um vento de 10 m/s a 10 m de altura no mar. Não se trabalhou diretamente com ar quente mas sim com um traçador passivo (propano) misturado com Nitrogênio e Hélio para se obter a densidade correta. Esta modelagem assume que o número de Prandtl turbulento $Pr_t = 1$ assim como o número de Schmidt turbulento ($Sc_t = 1$).

Desenvolvimento de um modelo para a correlação das flutuações da velocidade e do tensor de conformação de fluidos FENE-P

P. R. Resende*

*UNESP - Univ Estadual Paulista, Campus de Sorocaba,
Gasi - Grupo de Automação e Sistemas Integráveis, Avenida
Três de Março, 511, Sorocaba - SP, 18087-180, Brazil

Resumo

O desenvolvimento de modelos turbulentos viscoelásticos baseados no modelo FENE-P consistem na análise de dados provenientes de simulação numérica direta (DNS) envolvendo todos os regimes da redução de arrasto (baixo, intermédio e elevado). Este tipo de análise permite verificar o impacto individual dos termos das equações governativas, desprezando os termos com menor impacto e obter informações detalhadas do comportamento dos restantes termos. Note-se que o diferente comportamento elástico, nos três regimes de redução de arrasto, aumenta a complexidade na modelação dos termos viscoelásticos, e consequentemente os seus modelos. Um dos termos viscoelásticos com um impacto significativa na equação de transporte do tensor de conformação é o termo que correlaciona as flutuações da velocidade e do tensor de conformação, designado por NLT_{ij} . Os modelos previamente desenvolvidos para o termo NLT_{ij} , no contexto de modelos de turbulência viscoelásticos isotrópicos, são muitos complexos e apresentam algumas deficiências, e nesse sentido é apresentado neste trabalho um novo modelo capaz de capturar o efeito viscoelástico nas diferentes reduções do arrasto. A vantagem do novo modelo é o seu desempenho nas previsões de todas as componentes individuais do tensor, e a sua implementação em códigos comerciais devido à sua simplicidade.

Esquemas de Volumes Finitos aplicados em Magnetohidrodinâmica Ideal via Octave

Raphael de O. Garcia*, Samuel R. de Oliveira

*Departamento de Matemática Aplicada, IMECC, Unicamp,
13083-859, Campinas, SP

Resumo

Nas últimas décadas, Métodos Numéricos de Volumes Finitos vêm sendo desenvolvidos, aprimorados e aplicados em sistemas de equações diferenciais parciais (EDP's) hiperbólicos não lineares dependentes do tempo [4]. As leis de conservações são escritas por sistemas de EDP's e a modelagem da maioria dos problemas em Ciências e/ou Engenharias parte de tais leis.

Em particular, um sistema que se destaca é o formado pelas equações de Magnetohidrodinâmica (MHD) que modelam o escoamento de um fluido magnetizado por possuir dificuldades e desafios referentes à obtenção de soluções numéricas [3, 6]. O caráter puramente não linear dessas equações possibilitam a formação dos três tipos de ondas elementares: ondas de choque, ondas de rarefação e ondas de contato, que aparecem como descontinuidades na solução das equações de MHD [7].

No que diz respeito a Métodos Numéricos, cada um possui suas próprias propriedades que influenciam diretamente na solução numérica tornando-os adequados ou não dependendo da aplicação em questão.

Neste trabalho são feitas comparações entre os métodos de volumes finitos aplicados às equações de Magnetohidrodinâmica, dada pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0 && \text{(equação da continuidade)} \\
\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T + \mathcal{P}) &= 0 && \text{(equação do movimento)} \\
\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{B}^T - \mathbf{B} \mathbf{v}^T) &= 0 && \text{(equação de indução)} \\
\frac{\partial}{\partial t} E + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{v} + \mathcal{P} \mathbf{v}) &= 0 && \text{(equação da energia)}
\end{aligned} \tag{1}$$

em que

$\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$	(densidade do fluido em escoamento)
$v = v(\mathbf{x}, t)$	(velocidade do fluido)
$\mathcal{P} = \mathcal{P}(\mathbf{x}, t)$	(Tensor de pressão no fluido)
$B = B(\mathbf{x}, t)$	(campo magnético do fluido)
$E = E(\mathbf{x}, t)$	(energia total do fluido)
$\epsilon = \epsilon(\mathbf{x}, t)$	(energia interna do fluido)
$p = p(\mathbf{x}, t)$	(pressão do fluido)
γ	(calor específico do fluido)

com

$$E = \epsilon + \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + \frac{1}{8\pi\rho} |\mathbf{B}|^2 \quad \text{e} \quad \epsilon = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}.$$

Os métodos numéricos Lax-Friedrichs, Nessyahu-Tadmor [5], Lax-Wendroff, Godunov, esquemas essencialmente não oscilatórios ponderados (WENO) com Runge-Kutta [2] e Runge-Kutta com Lax-Wendroff [1] foram implementados em *Octave* e comparados com relação ao tempo gasto de CPU, consumo de memória, quantidade de operações, oscilações e/ou dissipações numéricas, ordem de precisão e estabilidade. Assim, têm-se tabelas de comparações entre métodos que podem auxiliar na escolha de métodos numéricos para problemas similares. Além disso, gráficos e vídeos comparativos das soluções aproximadas do sistema (1) foram elaborados com o mesmo intuito.

Consequentemente, o trabalho explorou o uso do *Octave* - ambiente Linux/GNU - em questões de análise numérica relevantes ao uso de métodos numéricos de volumes finitos aplicados na obtenção de soluções aproximadas para as equações de Magnetohidrodinâmica Ideal.

Referências

- [1] W. Hundsdorfer, J. G. Verwer, “Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Rection Equations”, Springer, New York, 2003.
- [2] G. -S. Jiang, C. -W. Shu, Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes, *Journal of Computational Physics*, 126 (1996) 202-228.
- [3] R. J. Leveque, “Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems”, Cambridge University Press, United States of America, 2006.
- [4] J. D. Logan, “An Introduction to Nonlinear Partial Differential Equations”, John Wiley & Sons, New Jersey, 2008.
- [5] H. Nessyahu, E. Tadmor, Non-Oscillatory Central Differencing for Hyperbolic Conservation Laws, *Journal Computational Physics*, 87, n. 2 (1990) 408-463.
- [6] E. F. Toro, “Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics - A Practical Introduction”, Springer, Germany, 1999.
- [7] M. Wesenberg, “Efficient Finite - Volume Schemes for Magnetohydrodynamic Simulations in Solar Physics, *thesis*, 2003.

FINITE ELEMENT MODELING OF VISCOS EFFECTS ON INEXTENSIBLE MEMBRANES

Roberto F. Ausas*, Fernando Mut and Gustavo C. Buscaglia

*Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação,
Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brazil

Resumo

Phospholipidic membranes rheologically behave as two dimensional fluids in which surface viscous effects are relevant as compared to those on the bulk fluids where they are immersed. These effects are also important in capillary interfaces in the presence of surfactant agents and/or impurities. In the case of lipidic membranes, they are also subjected to local area or inextensibility constraints. In this work we use the Boussinesq-Scriven operator, which is the surface analog of the Newtonian constitutive behavior, as a way to model both, surface viscous effects and inextensibility on interfaces. The standard way to impose the area constraint is by means of a surface membranal pressure, i.e., a Lagrange multiplier associated to the inextensibility restriction. Instead, in this work we increase the value of the second viscosity coefficient in the Boussinesq-Scriven law. While this would lead to the numerical phenomenon of locking in similar problems, we show by means of several numerical experiments that this does not happen so easily in our case. This allows us to impose, at least to some extent, the surface incompressibility, with two advantages: first, one less unknown per node is required and second, a better conditioning of the algebraic linear systems can be expected. Additionally, this approach would greatly facilitate the implementation of the area restriction in level set formulations where no explicit representation of the interface is available to define a local Lagrange multiplier.

Numerical Methods of Rational Form for Reaction Diffusion Equations

Said Algarni*

*Department of Mathematics and Statistics
King Fahd University of Petroleum and Minerals

Resumo

The purpose of this study was to investigate select numerical methods that demonstrate good performance in solving PDEs that couple diffusion and reaction terms.

The simple form of a reaction diffusion equation is the following

$$u_t(x, t) = \alpha u_{xx} + f(u),$$

where u is an order-parameter field, e.g., population density, chemical concentration, magnetization, which depends on space x and time t . The order-parameter may be either scalar or vector, depending on the number of variables that describe the physical system. The order-parameter evolves in time due to a local reaction, described by the nonlinear term $f(u)$, in conjunction with spatial diffusion. The coefficient α can be a diagonal matrix or in some cases a full matrix to account for so-called cross-diffusion terms. In most cases, however, α can be a scalar where the amount of diffusion is the same in all coordinate directions, or it could be dependent on time and space $\alpha(x, t)$. These types of equations have numerous fields of application such as environmental studies, biology, chemistry, medicine, and ecology.

Our aim was to investigate and develop accurate and efficient approaches which compare favourably to other applicable methods. In particular, we investigated and adapted a relatively new class of methods based on rational polynomials. Namely, Padé time stepping (PTS), which is highly stable for the purposes of the present application and is associated with lower computational costs. Furthermore, PTS was optimized for our study to focus on reaction diffusion equations. Due to the rational form of PTS method, a local error control threshold (LECT) was proposed. Numerical runs were conducted to obtain the optimal LECT. In addition, new schemes based on both PTS and splitting methods were established.

Based on the results, we found PTS alone and combined via splitting with other approaches provided favourable performance in certain and wide ranging parameter regimes.

Referências

- [1] Amundsen, D., Bruno, O., *Time stepping via one-dimensional Padé approximation*, J. of Sci. Comp., 2007, 30, pp. 83-115.
- [2] Baker, G. A., Graves-Morris, P., *Padé Approximants Part 1: Basic Theory*, Encyclopedia of Mathematics and Its Applications, Vol. 13, Addison-Wesley, 1981.

A 3D front-tracking approach for simulation of a two-phase fluid with insoluble surfactant

Wellington C. de Jesus^{*a}, Alexandre M. Romaa^a,
Márcio R. Pivello^b, Millena M. Villar^b,
Aristeu da Silveira-Neto^b

^{*}Instituto de Matemática e Estatística^a - USP,
Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de
Uberlândia, Uberlândia-MG, Brazil^b

Resumo

Surface active agents play a significant role on interfacial dynamics in multiphase systems. While the understanding of their behavior is crucial to many important practical applications, realistic mathematical modeling and computer simulation represent an extraordinary task. By employing a front-tracking method with Eulerian adaptive mesh refinement capabilities in concert with a finite volume scheme for solving an advection-diffusion equation constrained to a moving and deforming interface, the numerical challenges posed by the full three-dimensional computer simulation of transient, incompressible two-phase flows with an insoluble surfactant are efficiently and accurately tackled in the present work. The individual numerical components forming the resulting methodology are here combined and applied for the first time. Verification tests to check the accuracy and the simulation of the deformation of a droplet in simple shear flow in the presence of an insoluble surfactant are performed, the results being compared to laboratory experiments as well as to other numerical data. In all the cases considered, the methodology presents excellent conservation properties for the total surfactant mass (even to machine precision under certain circumstances).