CRITERIOS DE DISCRETIZACION PARA EL TRATAMIENTO NUMERICO DE LA INTERACCION ONDA DE CHOQUE-INTERFASE

Javier A. Diez * Luis P. Thomas ** Vicente A. Pais *** Programa Física Experimental Tandil (CONICET). Departa mento de Física. Facultad de Ciencias Exactas. Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Ai res. Pinto 399. 7000. Tandil. Argentina.

* Dto. Física-Fac. Cs. Ex. y Nat. - Univ. Nac. de Mar del Plata
 ** Becario del CONICET
 *** Investigador del CONICET

RESUMEN

Como parte de una serie de estudios tendientes a establecer la confiabilidad de simulaciones numéricas de fenómenos fluidodinámicos violentos, se investiga la interacción, en simetría plana, de una onda de choque y la superficie de separación (interfase) entre dos flui dos, constitutiva o termodinamicamente diferentes. La simulación de dicha interacción muestra una etapa transitoria espuria, durante la cual los perfiles numéricos de las magnitudes físicas difieren fuerte mente de los teóricos. Se encuentran relaciones que permiten estimar la duración de dicha etapa, y se formula un criterio para obtener, a su término, perfiles con mínimas distorsiones respecto de los predichos por la teoría.

ABSTRACT

This work is a part of a research program devoted to establish the reliability of the numerical simulations of strong fluid-dynamics phenomena. We study the interaction (in plane symmetry) of a shock wave with the interface between two fluids, which differ in their constitutive and thermodynamic: properties. The simulation of this in teraction shows a spurious transitory stage, characterized by a strong separation of the numerical profiles of the physical variables from the theoretical ones. Relations to estimate the last of this stage are given, and a criterion is proposed to attain minimum distorted profiles with respect to those obtained from theory.

1. INTRODUCCION

El tratamiento numérico de las ondas de choque requiere usualmente el agregado de una viscosidad artificial [1] en las ecuaciones fluidodinámicas de conservación. Este término ensancha la discontinui dad otorgándole un espesor tal que la resolución de las ecuaciones no requiere de ningún tratamiento especial.

Por otra parte, las interfases representan aspectos críticos en el tratamiento numérico, puesto que constituyen discontinuidades en las magnitudes físicas, con la consiguiente dificultad para definir las de rivadas espaciales [2], [3]. Este punto es aún más crítico si se agre gan al problema fenómenos que involucran transiciones abruptas tales como ondas de choque.

En consecuencia, la interacción entre una onda de choque tratada con viscosidad artificial, y una interfase, debe ser analizada con sumo cuidado. Resulta conveniente realizar el análisis de dicha interac ción en simetría plana, puesto que, en este caso, cuando se consideran ondas de choque de espesor nulo el problema puede resolverse teórica mente en forma exacta.

Un estudio sobre este tema fue efectuado por Cameron [4] quien investigó los errores permanentes que quedan después de que las ondas re flejadas y transmitidas, resultantes de la interacción, se alejan de la interfase. Dichos errores aparecen en la densidad y temperatura del fluído, localizados en las inmediaciones de la interfase, y se deben al incorrecto incremento de entropía que produce la viscosidad artificial en esa zona. Estas perturbaciones son permanentes pues no se ha contemplado la conducción térmica, como así tampoco otros fenómenos de transporte que los amortigüe. Sin embargo, errores de este tipo no aparecen en los perfiles de presión y velocidad, pues las ecuaciones contemplan la transferencia reversible de energía mecánica. Además, es te autor obtuvo, mediante consideraciones teóricas, un criterio de empalme de los parámetros numéricos sobre la interfase, que minimiza los errores permanentes.

En este trabajo, en cambio, se estudia la etapa transitoria que da origen a los mencionados errores, no sólo cuando la onda reflejada es una onda de choque, sino también cuando es una onda de rarefacción. En efecto, los procesamientos realizados muestran que debe transcurrir cierto tiempo desde que la onda perturba la interfase hasta que se obtienen los perfiles esperados de presión y velocidad. El tiempo de du ración T de esta etapa transitoria es claramente un efecto espúrio de T tratamiento del problema, pues no existe dentro del marco de la teoría.

Una explicación plausible del por qué de esta etapa transitoria se encuentra en el análisis dimensional. La situación física planteada no posee ella misma los parámetros dimensionales necesarios para formar alguna magnitud con unidad de tiempo. Esto no es así cuando el fenómeno es simulado numéricamente, pues se introducen inevitablemente al problema longitudes características, tales como el ancho de la onda de choque y el de la malla espacial. Luego, estas nuevas longitudes, junto con algunas velocidades propias del problema, justifican, al menos dimensionalmente, la existencia de T.

La cuantificación de la duración T de la etapa transitoria tiene interés debido a que permite determinar si ésta puede despreciarse o nó en la simulación completa de un problema dado. Además, es de esperar que la evolución de dicha etapa, que se desarrolla en el tiempo T, esté intimamente vinculada con los errores permanentes en la densidad y temperatura.

Como resultado se obtuvo que los tiempos que tardan en formarse las ondas reflejadas y transmitidas, resultantes de la interacción, son en general diferentes y están determinados por ciertos tiempos ca racterísticos correspondientes al tiempo que emplea un elemento de fluído en atravesar la onda de choque que lo afecta. Estos tiempos de penden, por lo tanto, del espesor y de la velocidad de aquéllas. De esta manera, se dispone de una forma sencilla de cuantificar la duración de la etapa transitoria en la interacción de una onda de choque con una interfase.

Además, se observó que se obtienen los mejores perfiles de presión y velocidad al tiempo T, cuando las ondas reflejada y transmitida se forman simultáneamente. Este hecho conduce a un criterio de empalme si milar al propuesto por Cameron.

Por otra parte, ya sea que resulte posible o no utilizar este criterio de empalme, el conocimiento previo de la duración de la etapa transitoria se vuelve imprescindible para la simulación numérica de fe nómenos que involucran volúmenes finitos.

La presentación del trabajo se ha dividido en cinco secciones. La sección II describe el problema y el código numérico empleado. En las secciones III y IV se presentan, respectivamente, los resultados numé ricos y su interpretación. Finalmente, en la parte V se resumen las conclusiones.

2. DESCRIPCION DEL PROBLEMA Y CODIGO NUMERICO

La situación física tratada en este trabajo puede presentarse en los siguientes términos: una onda de choque plana, gobernada por las ecuaciones de Rankine-Hugoniot, avanza en un fluído ideal (medio 1) hacia la superficie (interfase) que lo separa de otro fluído (medio 2), también ideal. Inicialmente, los dos fluídos están en reposo y ambos a la misma presión p. La parte del fluído l afectada por la onda de choque incidente, posee una presión p. Cuando la onda de choque llega a la interfase, se genera una onda de choque transmitida en el fluí do 2, y una onda de choque o de rarefacción en el medio 1. La condi ción que debe cumplirse para que se refleje una onda de choque puede expresarse mediante la desigualdad [5] :

$$g_{2}/P_{1} > \frac{(\gamma_{1}-1) + (\gamma_{1}+1) P_{1}/P_{c}}{(\gamma_{2}-1) + (\gamma_{2}+1) P_{1}/P_{c}}$$
(1)

Cuando esta desigualdad es de diferente sentido, la onda reflejada es de rarefacción. En esta expresión ρ_1 y ρ_2 son las densidades de los fluídos 1 y 2 sur perturbar, respectivamente; γ_1 y γ_2 son las relaciones de calores específicos (constantes).

Luego de la interacción, la presión en las inmediaciones de la intertase toma cierto valor P que se determina a través de la condición de continuidad de la velocidad en la interfase. Para las dos situaciones mencionadas, esta condición lleva a una ecuación implícita en la incógnita P [6]. La resolución de esta ecuación por medio de algún método numérico, permite encontrar P, a partir de la cual es posible, a su vez, calcular los valores de las restantes magnitudes físicas a ambos lados de la interfase.

En el presente trabajo se ha empleado un código que resuelve las ecuaciones de conservación en coordenadas lagrangianas, expresadas en diferencia finita. Para la viscosidad artificial se adoptó la expre sión original de von Neumann y Richtmayer [7]:

$$q = \begin{cases} 1^2 \mathbf{P} \left(\frac{\partial u}{\partial R}\right)^2 & \text{si} \quad \frac{\partial u}{\partial R} < 0 \\ 0 & \text{si} \quad \frac{\partial u}{\partial R} \ge 0 \end{cases}$$
(2)

donde l es un parámetro con unidad de longitud, que en las simulaciones usualmente se escribe como: l = a. ΔR , siendo ΔR el paso de la ma lla y 'a' una constante adimensional, que aquí se adoptará de igual va lor en ambos fluídos.

La forma de las ecuaciones de conservación discretizadas es simi lar a las presentadas en el texto de Richtmayer [8]. Cabe destacar que si bien existen otras formas diferentesde expresar las ecuaciones y la viscosidad artificial, los resultados obtenidos indican que los efectos espurios del tratamiento numérico tienen su origen en la repre sentación suave de las ondas de choque y no en el método particular utilizado para tal fin, ni en la técnica empleada para resolver las ecuaciones. Por otra parte, para poder identificar con mayor claridad los efectos propios de la simulación, no se consideran los fenómenos de transporte y se emplea la ecuación de estado de gases ideales.

3. RESULTADOS NUMERICOS

Tal como se dijo con anterioridad, cuando se simula numericamente la interacción, los perfiles se apartan transitoriamente de los teóri cos, a los cuales se van aproximando al transcurrir el tiempo (exceptuando los errores permanentes ya mencionados). Después de un cierto tiempo T, las magnitudes físicas han tomado valores muy próximos a los predichos por la teoría.

Las simulaciones realizadas mostraron que la duración de la etapa transitoria no depende del valor del paso temporal Δt elegido para el cálculo. En efecto, la adopción de un valor de Δt que sea mucho menor que los tiempos característicos mencionados en la introducción, no altera los resultados de la interacción. Asimismo, se observa que dicha etapa no se ve modificada cuando se emplea un sistema de ecuaciones de resolución explícita o implícita.

Cabe destacar que debe tenerse especial cuidado al expresar las ecuaciones de conservación en la interfase [2],[3]. Las aproximaciones de mayor orden aquí ensayadas en el entorno de dicha región, no produjeron reducciones o alteraciones de la etapa transitoria.

Con el fin de conocer de qué modo dicha etapa se ve influenciada por los diferentes parámetros del problema (físicos y/o numéricos), la duración T de la misma debe definirse en forma precisa.

Aquí se ha adoptado como inicio de la etapa transitoria al instan-

te en que la presión en la interfase ha aumentado en un 27, mientras que su finalización se establece mediante ciertas condiciones sobre los perfiles de las ondas reflejada y transmitida, que se describen a continuación.

En el caso de una onda de choque proveniente de la interfase (reflejada o transmitida), se requiere: a) que la desviación standard de la presión del fluído afectado por la misma, respecto de su valor teó rico, no supere en cinco veces la análoga desviación standard de la onda de choque incidente, y b) que la transición brusca de la presión se desarrolle sobre el mismo número de pasos de la malla que los empleados por esta última onda.

Por otra parte, cuando la onda proveniente de la interfase es de rarefacción (sólo puede ser reflejada), es conveniente realizar la de terminación de T a través de condiciones sobre la velocidad u y no so bre la presión. En efecto, el perfil teórico de velocidad es lineal con R/t (R: coordenada espacial), mientras que las magnitudes termodi námicas guardan con esta variable una relación más compleja. De esta manera, aprovechando dicha relación lineal, el criterio adoptado para determinar T es que la recta u = u(R/t) obtenida de la simulación, tenga una inclinación θ_n tal que $|(\theta_n - \theta_1)/\theta_1| \leq 0.10$, siendo θ_1 el ángulo de inclinación de la recta teórica.

Estos criterios son arbitrarios, pero se muestran muy razonables para dar perfiles lo suficientemente próximos a los teóricos. Ellos permiten determinar dos valores de T: uno para la onda reflejada (T) y otro para la transmitida (T), que en general son diferentes. Por^r lo tanto, la duración de toda la etapa transitoria queda definida por el máximo de estos valores, al que denominaremos T.

Con el objeto de averiguar cómo dependen T y T de los parámetros del cálculo, se realizaron primeramente las simulaciones cuyos resulta dos se muestran en la Fig.1. En ella se han graficado los tiempos T y T para distintos valores de ΔR_2 y ρ_2 (ΔR_1 , ρ_1 , p_1 y a se han man tenido constantes, al igual que $\gamma_1 = \gamma_2 = 5/3$). Se observa que la dura ción T de toda la etapa transitoria viene dada por T para $\delta < \delta_0$, siendo $\delta = \Delta R_2 / \Delta R_1$, y por T para valores mayores de este parámetro. Pue de verse que T se mantiene estrictamente constante en el intervalo mencionado, y que luego varia lentamente, pero sin alcanzar a T. Por otro lado, T crece linealmente con δ cuando la relación de mailas es mayor que δ_0 . La representación de estos tiempos en función de ρ_2/ρ_1 , tomando a δ como parámetro, conduce a curvas suaves que no aportan información adicional.

En segundo lugar, fue variada la intensidad de la onda de choque incidente. Los gráficos, que se muestran en la Fig.2, se encuentran en escala log-log con el objeto de buscar una ley de potencias entre T_r (T_r) y $p_i(P)$. Las rectas obtenidas conducen a las expresiones:

$$T_{r} \sim \left(P_{i}\right)^{-1/2} \qquad T_{t} \sim \left(P\right)^{-1/2} \qquad (3)$$

Finalmente, fue variado el factor 'a' de la viscosidad artificial. Se observó que, si se mantienen constante el resto de los parámetros, los dos tiempor T y T varían en forma estrictamente lineal con 'a', en el rango $1 \leq a^{T} \leq 6$. Valores de 'a' fuera de este intervalo carecen de interés, pues conducen a ondas de choque con grandes oscilaciones o demasiado ensanchadas.







Fig. 2 : Tiempos de formación de las ondas de choque trans mitida (T,) y reflejada (T,) en función de la pre sión final sobre la interfáse (P) y la presión del fluido detrás de la onda de choque incidente (p₁), respectivamente. Se han considerado dos relaciones mallas diferentes.

Las simulaciones realizadas para el caso de onda de rarefacción re flejada muestran que los valores de T_y y T_t tienen un comportamiento similar al encontrado para el caso de la onda de choque reflejada. Esto se evidencia al comparar la Fig.3 con la Fig.1. Además, también se obtuvieron relaciones lineales entre T_r (T_t) y los parámetros 1 / $\sqrt{P_i}$ (1 / \sqrt{P}).

4. INTERPRETACION DE LOS RESULTADOS

Un examen de los resultados expuestos en la sección precedente mues tra que es oportuno adoptar como variable significativa a:

$$\xi = \frac{a_2 \quad \Delta R_2 / \sqrt{P / \rho_2}}{a_1 \quad \Delta R_1 / \sqrt{P_1 / \rho_1}}$$
(4)

En efecto, si se representan los valores de T de la Fig.1 en función de ξ (correspondientes a casos en que se ha variado ΔR_2 y ρ_2 , con condiciones constantes en el medio 1), todos los puntos caen en una franja angosta, que bien puede aproximarse por dos líneas rectas (ver Fig.4). Una de éstas es horizontal y corresponde al tiempo T = T_ > T_ que tarda en formarse la onda de choque reflejada, en el medio cuyas condiciones se han mantenido constantes. Esto indica que T_ es practicamente independiente de las condiciones del medio 2. La otra recta aproximante corresponde a T = T_t > T_r, de modo que se tiene: $T_t \sim a_2 \Delta R_2 / \sqrt{P / \rho_2}$.

Reciprocamente, si se grafican T₁ y T₁ en función de ξ^{-1} , variando ΔR_1 y ρ_1 con condiciones constantes en el medio 2, se obtiepen dos rectas inclinadas. Por lo tanto, T₁ no es independiente de $\xi^{-1} = a_1 \Delta R_1 / \sqrt{P_1/\rho_1}$.

Estrictamente hablando, el cociente entre a_2 y a_1 se ha mentenido siempre constante e igual a uno (si bien $a = a_1^2 = a_2$ se ha variado). Sin embargo, se han incluído los valores de a_1 y a_2 en la definición de ξ , con el objeto de poner esta variable en términos de tiempos efectivamente observados en el problema.

Obsérvese que en los denominadores de los tiempos cuyo cociente de fine la variable ξ , pueden reconocerse las expresiones de las velocidades de las ondas de choque incidente y transmitida (en la aproximación de onda de choque fuerte) dadas por:

$$U_{i} = \sqrt{\frac{(\gamma + i) p_{i}}{2 \rho_{1}}}$$

$$U_{t} = \sqrt{\frac{(\gamma + 1) P}{2 \rho_{2}}}$$
(5)

Dichos denominadores no pueden representar velocidades del sonido (que son las otras velocidades características del problema), pues las presiones y densidades que allí aparecen no corresponden a la misma porción de fluído de cada zona.

En cuanto a los numeradores , debe notarse que el producto a. ΔR está intimamente relacionado con el espesor L de la onda de choque [4]:



Pig. 3: Tiempos de formación de la onda de rarefacción reflejada (T₁) y la onda de choque transmitida (T₁) en función de la relación de mallas. Los parámetros del medio I (incluso p_i) se han mantenido constantes.



Fig. 4 : Duración de la etapa transitoria T (Τ ό Τ) de las pruebas de la Fig. l, en función del parametro adimensional ξ .

$$L = \pi \frac{(\lambda + 1)}{2} \left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (a. \Delta R) \quad (6)$$

donde $\lambda = \lambda(\gamma)$ es el cociente entre las densidades del medio detrás y delante del frente de onda.

Entonces, los tiempos característicos que dominan la duración de la etapa transitoria vienen dados por:

$$t_{i} = L_{i} / U_{i} \qquad t_{t} = L_{t} / U_{t} \qquad (7)$$

Cada uno de ellos puede interpretarse como el tiempo que emplea un elemento de fluído en atravesar la onda de choque que lo afecta.

La comparación de los valores numéricos de los tiempos T_r y T_t con los tiempos característicos hallados permite expresar:

$$T_r \approx t_i + t_r$$
 (8)

$$f_t \approx t_i + t_t$$
 (9)

con error menor que el 20%, siendo $t_{\rm e} = L_{\rm p} / U_{\rm p}$. La inclusión del tiem po t_i dentro de los valores de T_p y T_t resulta coherente con la definición dada del inicio de la etapa transitoria. Se desprende, por lo tanto, que el valor mínimo que puede adoptar cualquiera de ellos es t_i, puesto que todo el espesor de la onda de choque incidente debe interac tuar con la interfase.

La expresión utilizada para calcular los espesores de las ondas de choque, sugiere cómo la compresibilidad del medio influye sobre la duración de la etapa transitoria.

Cuando la onda reflejada es de rarefacción, también se encuentra que el tiempo de formación de la onda de choque transmitida T' (de menor intensidad que la incidente) viene dado por la relación (9). En cuanto al tiempo correspondiente de la onda de rarefacción T', es de esperar que éste se obtenga sumando a t. un cierto tiempo, que llamare mos t'. Sin embargo, una onda de este tipo no posee, teoricamente, nin gún tiempo característico. Por consiguiente, el valor de t' tendrá un origen netamente numérico, en el sentido de cómo se expresen las ecuaciones, de modo que T' dependerá del código utilizado, como así también de las condiciones empleadas para determinar la finalización de la eta pa transitoria. De todas maneras, en los casos estudiados se encontró que T' es siempre del orden de t. (t' \approx t.). Luego, todo parece indicar que mediante un adecuado tratamiento numérico de las ecuaciones, T' puede ser reducido a valores próximos a t_i.

En resumen, las relaciones anteriormente mencionadas cuantifican la duración de la etapa transitoria, permitiendo elegir los parámetros numéricos de manera que ésta pueda ser despreciada en la simulación de un fenómeno dado.

Otro aspecto, no menos importante, se refiere a los perfiles de presión y velocidad que se tienen al finalizar la etapa transitoria. La Fig.5 muestra los resultados para diferentes relaciones de malla. En ella se observa que, aunque las condiciones de finalización de di-





cha etapa se han satisfecho, los perfiles pueden presentar deformaciones no deseables.

Los resultados obtenidos indican que estas distorsiones son mínimas cuando las ondas reflejada y transmitida terminan de formarse simultaneamente. Por lo tanto, de las ecuaciones (8) y (9), las mínimas deformaciones de los perfiles, al tiempo T, se tienen cuando:

$$t_r \approx t_t$$
 (10)

Este criterio difiere ligeramente del propuesto por Cameron [4], para minimizar los errores permanentes de densidad y temperatura, en el que se pide t. = t. Sin embargo, cabe señalar que t difiere poco de t., por lo que ambós criterios son practicamente equivalentes.

Finalmente, puede decirse que, de acuerdo con lo visto hasta aquí, es de preveer que si la interacción se planteara en un fluído contínuo en el que se propagan ondas de choque de espesor real considerable, también aparecería una etapa transitoria con características similares a las presentadas aquí. Incluso, en el caso de onda de rarefacción reflejada, T' sería finito e igual a t_i.

5. CONCLUSIONES

Mediante cálculos numéricos que cubrieron un amplio rango de los distintos parámetros involucrados, se pudo establecer de qué manera és tos influyen en la duración de la etapa transitoria que se desarrolla en la interacción, en simetría plana, entre una onda de choque y una interfase. El análisis de los resultados condujo a la identificación de los tiempos característicos t_i, t_y y t_i, los cuales determinan los tiempos de formación de las ondas reflejada (T_i) y transmitida (T_i). Estos parámetros característicos corresponden al tiempo que emplea un elemento de fluído en atravesar el ancho de la onda de choque que lo afecta.

El conocimiento de cómo varían T y T con las variables físicas y numéricas, permite tener una buena estimación de la duración de la eta pa transitoria para una dada simulación. Además, se ha encontrado un criterio de empalme para conseguir las mínimas deformaciones de los perfiles de presión y velocidad al tiempo T, practicamente igual al propuesto en la ref. [4] para minimizar los errores permanentes de dem sidad y temperatura.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Dr. Roberto Gratton por sus útiles comentarios y correcciones para la elaboración de este trabajo.

REFERENCIAS

- P. Woodward and P. Colella, "The Numerical Simulation of Two-Dimen sional Fluid Flow with Strong Shocks", J. Comp. Phys., <u>54</u>, 115-173 (1984)
- [2] F. G. Blottner, "Influence of Boundary Approximations and Conditions on Finite-Difference Solutions", J. Comp. Phys., <u>48</u>, 246, (1982)
- [3] D. L. Book, "Finite-Difference Techniques for Vectorized Fluids Dy namics Calculations", (1981), p. 84 y sig., Springer-Verlag New York Inc.
- [4] I. G. Cameron, "An Analysis of the Errors Caused by Using Artificial Viscosity Terms to Represent Steady-State Shock Waves", J. Comp. Phys., <u>1</u>, 1-20 (1966)
- [5] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, "Fluid Mechanics", (1959), p.366 Pergamon Press.
- [6] R. Collins and H. Chen, "Propagation of a Shock Wave of Arbitrary Strength in Two Half Planes Containing a Free Surface", J. Comp. Phys., <u>5</u>, 415-442 (1970).
- [7] J. von Neumann and R. D. Richtmayer, J. Appl. Phys., <u>21</u>, 232-237 (1950).
- [8] R. D. Richtmayer and K. W. Morton, "Difference Methods for Initial Value Problems", New York, 1967, p. 311.