

SOBRE EL EMPLEO DE TÉCNICAS DE MÍNIMOS CUADRADOS MÓVILES EN EL DESARROLLO DE MÉTODOS DE ALTA RESOLUCIÓN DE VOLÚMENES FINITOS EN MALLAS NO ESTRUCTURADAS. APLICACIÓN A PROBLEMAS DE FLUJO COMPRESIBLE

L. Cueto-Felgueroso*, I. Colominas, F. Navarrina y M. Casteleiro

Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería, GMNI
E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidade da Coruña

Campus de Elviña, 15071 A Coruña, España

e-mail: (lcueto,icolominas,fnavarrina,casteleiro)@udc.es, web: <http://caminos.udc.es/gmni/>

Palabras clave: Flujo compresible, volúmenes finitos, métodos de alto orden, mallas no estructuradas, mínimos cuadrados móviles.

Resumen. *En este artículo se propone la combinación de aproximaciones por mínimos cuadrados móviles y esquemas upwind de volúmenes finitos, aplicados a problemas de flujo compresible en mallas no estructuradas. La construcción de métodos de alto orden de este tipo ha estado limitada por la necesidad de disponer de técnicas que permitan estimar las derivadas sucesivas de las variables de flujo a partir de sus valores promedio en las celdas. La utilización de MLS permite disponer de un marco de aproximación general, así como desarrollar reconstrucciones de muy alto orden sin aumentar el número de grados de libertad del problema.*

1 INTRODUCCIÓN

La actividad investigadora dedicada al desarrollo de técnicas numéricas aplicadas a la simulación de flujos a alta velocidad ha sido muy intensa durante las últimas décadas, impulsada principalmente por la gran pujanza de la industria aeroespacial. Los avances en la tecnología de computadores y la disponibilidad de poderosas técnicas de generación de mallas no estructuradas y algoritmos de adaptatividad de mallas ha impulsado la dinámica de fluidos computacional como herramienta de gran importancia en la práctica diaria en ingeniería.

Los esquemas más exitosos para resolver ecuaciones hiperbólicas son aquellos que tienen en cuenta de algún modo la estructura de ondas subyacente. Típicamente, las discretizaciones que plantean no tienen carácter centrado, sino que incluyen alguna forma de “descentrado” en función de la dirección de propagación de la información en el flujo. Los

métodos resultantes reciben el nombre genérico de esquemas “*upwind*”. Dentro del contexto de los métodos de volúmenes finitos, las discretizaciones de este tipo presentan, desde el punto de vista espacial, dos elementos básicos: a) la solución es continua a trozos, siendo discontinua en la interfaz entre volúmenes de control, y b) es necesario definir un *flujo numérico* a través del contorno del volumen de control.

Los métodos *upwind* modernos de volúmenes finitos, que emplean, generalizándolas, las ideas del método de Godunov [1, 2, 3], destacan por ser esquemas altamente robustos y precisos en el tratamiento de flujos a alta velocidad. Probablemente el principal desafío en el desarrollo de métodos *upwind* capaces de trabajar con mallas no estructuradas es el deseo (y la necesidad) de conseguir métodos de alto orden con un marcado carácter multidimensional, absolutamente necesario para obtener soluciones suficientemente precisas en mallas altamente irregulares. Los primeros métodos de alto orden (segundo orden) estaban basados en extensiones directas a 2D y 3D del método MUSCL (*Monotone Upstream Schemes for Conservation Laws*) [4], y retenían su fundamento claramente unidimensional. La gran dependencia demostrada por estos esquemas respecto a la geometría de la malla alentó la búsqueda de procedimientos de reconstrucción genuinamente multidimensionales, siendo pioneros en esta búsqueda Barth y Jespersen [5]. Estos nuevos esquemas habitualmente siguen el método generalizado de Godunov, realizando reconstrucciones polinómicas en el interior de cada volumen de control, y utilizando posteriormente los valores de las variables obtenidos tras este proceso de reconstrucción como datos iniciales para un método que resuelva el problema de Riemann que aparece en la interfaz entre cada dos volúmenes de control.

En la práctica, la obtención de métodos de muy alto orden (mayor que dos) de este tipo ha estado severamente limitada por la necesidad de disponer de técnicas de aproximación que permitan estimar las derivadas de alto orden de las variables de flujo, a partir de sus valores promedio en las distintas celdas. La escasa potencia de las técnicas empleadas en la literatura ha provocado que la inmensa mayoría de las formulaciones existentes sean solamente de segundo orden (reconstrucciones lineales a trozos).

En este trabajo se propone la combinación de aproximaciones por mínimos cuadrados móviles (*Moving Least-Squares*, MLS) y esquemas *upwind* de volúmenes finitos aplicados a la resolución de las ecuaciones de flujo compresible (Euler/Navier-Stokes) en mallas no estructuradas. Diseñada originalmente para el tratamiento de datos y la generación de superficies [6], la técnica de mínimos cuadrados móviles se ha vuelto muy popular entre los grupos de investigación que trabajan en métodos sin malla, siendo ampliamente utilizada en aplicaciones tanto eulerianas como lagrangianas. Esta clase de métodos de aproximación es particularmente competitiva en la reconstrucción de una determinada función y sus derivadas sucesivas a partir de los valores de dicha función en una serie de puntos dispersos. Se ha pretendido que el empleo de mínimos cuadrados móviles proporcione algo parecido a unas “funciones de forma” para esquemas de volúmenes finitos en mallas no estructuradas, representando una interesante alternativa a los métodos existentes en la actualidad.

El esquema de alta resolución presentado para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes sigue las ideas del método generalizado de Godunov, con diversas posibilidades en cuanto a la elección del flujo numérico, orden de la reconstrucción y estrategia para limitar la reconstrucción. Las reconstrucciones son polinómicas a trozos, obtenidas mediante desarrollos en serie de Taylor, y las derivadas se calculan mediante mínimos cuadrados móviles. Se han planteado reconstrucciones lineal, cuadrática y cúbica. Los flujos difusivos se calculan empleando MLS como método (centrado) de reconstrucción global.

El artículo se ha estructurado del modo siguiente: la sección 2 presenta algunos aspectos prácticos de la utilización de MLS en esquemas de volúmenes finitos en mallas no estructuradas. El modelo matemático para el problema de flujo compresible y la formulación numérica se examinan en la sección 3 y, finalmente, la sección 4 está dedicada a los ejemplos de aplicación.

2 VOLÚMENES FINITOS, MLS Y MALLAS NO ESTRUCTURADAS

2.1 Aplicación de la aproximación por mínimos cuadrados móviles a esquemas *upwind* de volúmenes finitos basados en el método generalizado de Godunov.

El esquema propuesto requiere disponer de un método de interpolación en varias etapas a través del proceso de cálculo, a saber:

- Reconstrucción: para evaluar los flujos numéricos no viscosos, en un esquema de alto orden, se deben extrapolar los valores de las variables de flujo a los contornos de los volúmenes de control (figura 1). Para ello se emplean desarrollos polinómicos definidos de manera independiente en cada celda. La construcción de estos polinomios requiere la estimación de las derivadas sucesivas de las variables en los centroides de las celdas.
- Flujos difusivos: a diferencia de los flujos no viscosos, se calcularán directamente en cada interfaz. Para ello, debemos interpolar velocidades, temperaturas y sus respectivos gradientes en los puntos de cuadratura en los lados de las celdas.

En este trabajo las tareas de aproximación anteriores se han llevado a cabo empleando mínimos cuadrados móviles. Los nodos, en la terminología de la formulación MLS, serán en este caso los centroides de las celdas (donde se almacenan los valores promedio de cada celda). Los puntos donde se evaluarán las funciones de forma serán los puntos de integración en los lados de las celdas, los vértices de las celdas, los propios centroides, etc. dependiendo de las características particulares del esquema empleado.

2.2 Cálculo práctico de las funciones de forma de MLS en mallas no estructuradas.

En las aproximaciones MLS utilizadas en este trabajo se ha empleado una base cúbica de polinomios, es decir

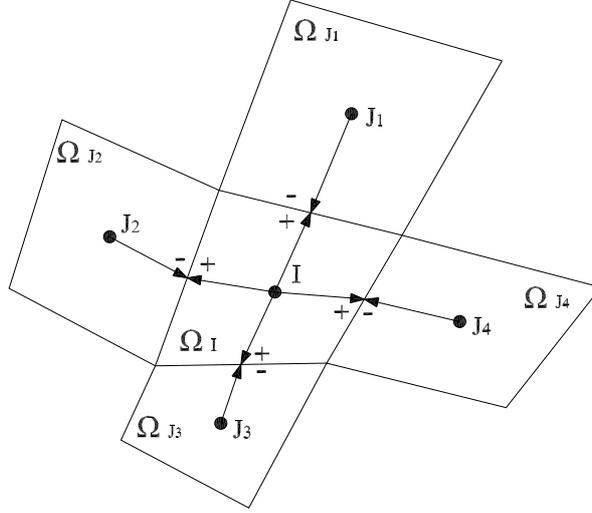


Figura 1: Esquema de la extrapolación de las variables para evaluar los flujos no viscosos en la interfaz entre los volúmenes de control Ω_I y $\{\Omega_{J_k}, k = 1, 4\}$.

$$\mathbf{p}(\mathbf{z}) = (1 \quad z_1 \quad z_2 \quad z_1 z_2 \quad z_1^2 \quad z_2^2 \quad z_1^2 z_2 \quad z_1 z_2^2 \quad z_1^3 \quad z_2^3)^T \quad (1)$$

siendo $\mathbf{z} = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_I}{h}$, donde \mathbf{x}_I son las coordenadas cartesianas del punto de evaluación y h es la *longitud de smoothing*. Las derivadas primeras se han aproximado mediante derivadas MLS completas, mientras que las derivadas de orden superior se aproximan mediante las correspondientes derivadas difusas.

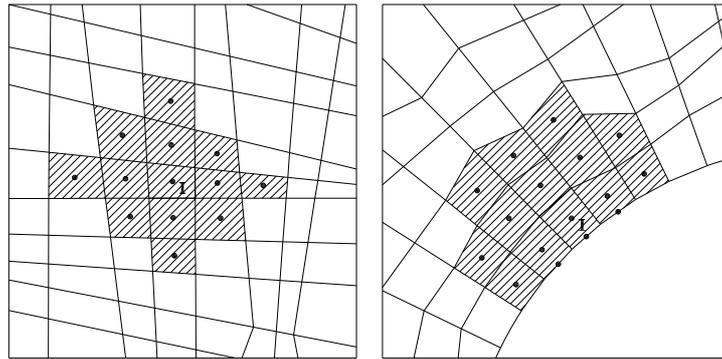


Figura 2: Plantilla para la aproximación MLS: centroides.

Un punto fundamental respecto a las aproximaciones por mínimos cuadrados móviles en el contexto de mallas no estructuradas de volúmenes finitos es la definición de las nubes de nodos para el cálculo de las funciones de forma (de algún modo el “*stencil*” o plantilla de reconstrucción de MLS). Las figuras 2–3 muestran esquemáticamente las

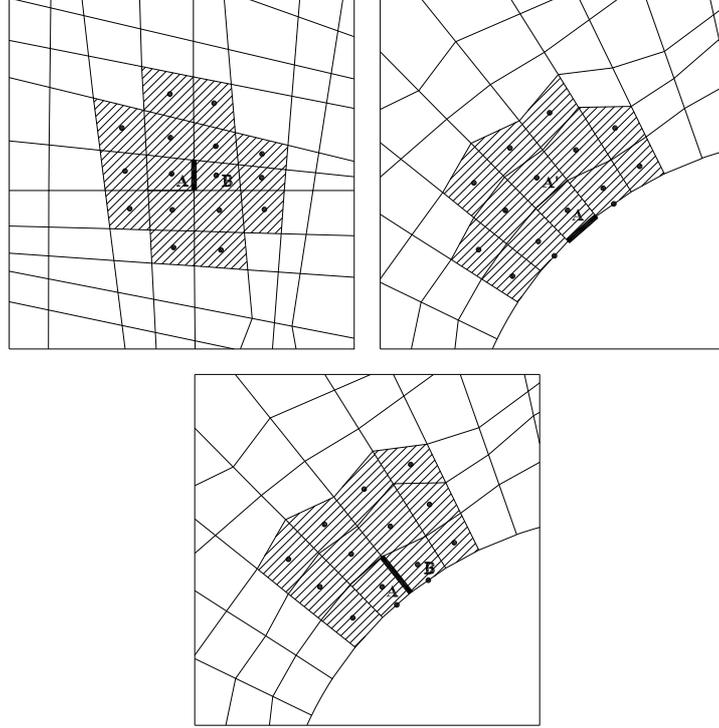


Figura 3: Plantilla para la aproximación MLS: puntos en los lados de las celdas.

plantillas empleadas en este trabajo para la evaluación de las funciones de forma de MLS en los centroides de las celdas y en los puntos de cuadratura en los lados de las celdas, respectivamente.

Una vez determinado el conjunto de celdas vecinas para el cálculo del ajuste por mínimos cuadrados móviles, la longitud de smoothing h es proporcional a la máxima distancia entre el punto de evaluación \mathbf{x}_I y sus nodos vecinos

$$h = k \max (\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_I\|) \quad (2)$$

La experiencia muestra que valores de k en torno a 0.6–0.7 son los más adecuados. Aunque a lo largo de este estudio se ha trabajado con mallas formadas por cuadriláteros y el esquema es de tipo *cell centered*, la metodología que se presenta puede aplicarse de forma general a cualquier tipo de volúmenes de control. En cada caso, deberá escogerse una plantilla adecuada al tipo de volumen empleado.

3 ECUACIONES DE NAVIER-STOKES. FORMULACIÓN NUMÉRICA

3.1 Flujo compresible bidimensional: modelo matemático.

Las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo compresible bidimensional, en coordenadas cartesianas y en ausencia de términos fuente, pueden escribirse en forma conservativa

como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial(\mathbf{F}_x - \mathbf{F}_x^V)}{\partial x} + \frac{\partial(\mathbf{F}_y - \mathbf{F}_y^V)}{\partial y} = \mathbf{0} \quad (3)$$

siendo

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_x = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho u H \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_y = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho v H \end{pmatrix} \quad (4)$$

las variables conservadas y los flujos no viscosos, respectivamente, y

$$\mathbf{F}_x^V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_y^V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y \end{pmatrix} \quad (5)$$

los flujos difusivos. En las expresiones anteriores, ρ hace referencia a la densidad del gas, p es la presión y $\mathbf{v} = (u, v)$ es el vector velocidad. La energía total y la entalpía vienen dadas por

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \quad H = E + \frac{p}{\rho} \quad (6)$$

donde e es la energía interna específica. Las tensiones viscosas se modelan de la forma

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{yy} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{xy} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (7)$$

donde μ es la viscosidad dinámica (“de remolino” si incluye de algún modo efectos de turbulencia). Los flujos térmicos se consideran representados mediante la ley de Fourier

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad (8)$$

donde T es la temperatura, $\lambda = c_p \mu / P_r$ es la conductividad térmica, c_p es el calor específico a temperatura constante ($c_p = 1003.5$ para el aire) y P_r es el número de Prandtl ($P_r = 0.72$ para el aire). La ecuación de estado y la temperatura de un gas ideal pueden escribirse

$$p = (\gamma - 1)(\rho E - \frac{1}{2}\rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}), \quad T = \frac{1}{c_v \rho (\gamma - 1)} p \quad (9)$$

donde c_v es el calor específico a volumen constante ($c_v = 716.5$ para el aire) y $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ es el ratio de calores específicos ($\gamma = 1.4$ para el aire). La celeridad de la onda de presión (“velocidad del sonido”) viene dada por

$$c = \sqrt{\gamma p / \rho} \quad (10)$$

y se supone que la viscosidad μ depende de la temperatura de acuerdo con la ley de Sutherland

$$\mu = \mu_\infty \frac{T + S_0}{T_\infty + S_0} \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^{1.5} \quad (11)$$

donde μ_∞ y T_∞ representan la viscosidad y la temperatura de la corriente libre, respectivamente, y $S_0 = 110.4 K$ es una constante experimental.

3.2 Formulación básica de volúmenes finitos.

La discretización básica del método de volúmenes finitos se construye a partir de la forma integral de las ecuaciones de conservación (3) en un volumen de control Ω_I

$$\int_{\Omega_I} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_I} \left(\frac{\partial(\mathbf{F}_x - \mathbf{F}_x^V)}{\partial x} + \frac{\partial(\mathbf{F}_y - \mathbf{F}_y^V)}{\partial y} \right) d\Omega = \mathbf{0} \quad (12)$$

Aplicando el teorema de la divergencia, la expresión anterior resulta

$$\int_{\Omega_I} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega = \int_{\Gamma_I} (\mathcal{F}^V - \mathcal{F}) \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (13)$$

donde $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ es la normal unitaria exterior al contorno del volumen de control Γ_I , y las siguientes definiciones

$$\mathcal{F} = (\mathbf{F}_x, \mathbf{F}_y), \quad \mathcal{F}^V = (\mathbf{F}_x^V, \mathbf{F}_y^V) \quad (14)$$

se han empleado para ofrecer una presentación más compacta. La versión discreta de (13) toma la forma

$$A_I \frac{\partial \mathbf{U}_I}{\partial t} = \sum_{iedge=1}^{nedge_I} \sum_{igau=1}^{ngau_I} [(\mathcal{F}^V - \mathcal{F}) \cdot \mathbf{n}]_{igau} \mathcal{W}_{igau} \quad (15)$$

donde A_I es el área de la celda I , $nedge_I$ el número de lados de la celda, $ngau_I$ el número de puntos de Gauss en cada lado, \mathcal{W}_{igau} es un peso de integración y \mathbf{U}_I hace referencia al valor promedio integral de \mathbf{U} en la celda I .

La representación es en principio constante a trozos y, por tanto, los flujos necesarios para evaluar la expresión (15) no están determinados unívocamente. Para eliminar esta duplicidad es necesario disponer de un *flujo numérico*. Esta función proporciona un valor único del flujo a partir de los estados de las variables a ambos lados de la interfaz. Tomando directamente como estados a uno y otro lado de la interfaz los valores promedio en las celdas a cada lado de la interfaz se obtiene un esquema de primer orden, mientras que los métodos de orden superior realizan algún tipo de reconstrucción en el interior de cada celda para extrapolar los valores de las variables desde el centroide a los lados de las celdas (figura 1). Estas ideas están en la base del método generalizado de Godunov [1, 2, 3], cuya implementación presenta tres fases bien diferenciadas:

- Obtención de una reconstrucción continua (usualmente polinómica) de las variables de flujo en cada celda, utilizando los valores promedio de dichas variables en las celdas vecinas. La representación espacial resultante sigue siendo discontinua entre celdas. Dado que los esquemas de orden superior a uno no están libres de oscilaciones en presencia de discontinuidades o gradientes pronunciados, puede ser necesario *limitar* las reconstrucciones.
- Evaluación de los flujos en los lados de las celdas. En el caso de los flujos no viscosos, los estados a la izquierda y derecha en cada punto de integración (estados $+$ y $-$, ver figura 1) se utilizan como dato para la función de flujo numérico. Los flujos difusivos que calculan directamente en los puntos de integración.
- Avance de la solución en el tiempo, utilizando el esquema de integración temporal correspondiente.

Las próximas secciones desarrollan el tratamiento particular que se ha dado a los puntos anteriores en la formulación propuesta.

3.3 Reconstrucción. Limitadores.

En esta sección se presentan reconstrucciones lineales, cuadráticas y cúbicas a trozos, en la que las derivadas sucesivas de las variables se calculan mediante aproximaciones por mínimos cuadrados móviles. En conocimiento de los autores, esta es la primera vez que se utiliza una reconstrucción cúbica de este tipo en un esquema *upwind* para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes en mallas no estructuradas, lo que sirve para demostrar la potencia del método de aproximación empleado.

La reconstrucción lineal componente a componente de las variables de flujo en el interior de cada celda I se puede escribir de la forma

$$U(\mathbf{x}) = U_I + \nabla U_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (16)$$

donde U_I es el valor promedio integral de la variable U en la celda I (asociado a su centroide), \mathbf{x}_I son las coordenadas cartesianas del centroide de la celda y ∇U_I es el gradiente

evaluado en el centroide. Se supone que este gradiente es constante para cada celda y, por tanto, la variable reconstruida sigue siendo discontinua entre celdas.

Análogamente, la reconstrucción cuadrática (para cálculo del estado estacionario), se escribirá de la forma

$$U(\mathbf{x}) = U_I + \nabla U_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)^T \mathbf{H}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (17)$$

Finalmente, la reconstrucción cúbica (para obtener el estado estacionario), se escribirá

$$U(\mathbf{x}) = U_I + \nabla U_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)^T \mathbf{H}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \frac{1}{6} \Delta^2 \mathbf{x}_I^T \mathbf{T}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (18)$$

donde

$$\Delta^2 \mathbf{x}_I^T = ((x - x_I)^2 \quad (y - y_I)^2) \quad (19)$$

$$\mathbf{T}_I = \begin{pmatrix} \frac{\partial^3 U_I}{\partial x^3} & 3 \frac{\partial^3 U_I}{\partial x^2 \partial y} \\ 3 \frac{\partial^3 U_I}{\partial x \partial y^2} & \frac{\partial^3 U_I}{\partial y^3} \end{pmatrix} \quad (20)$$

En el caso de reconstrucciones sin limitar, las derivadas de las variables a introducir en las expresiones anteriores se calculan directamente en los centroides empleando mínimos cuadrados móviles. En presencia de choques el empleo de reconstrucciones sin limitar dará lugar a soluciones oscilatorias. A continuación se muestra un limitador para las reconstrucciones anteriores.

3.3.1 Limitadores: derivadas promediadas.

La estrategia que se presenta en esta sección permite limitar gradientes, hessianos y otras derivadas de orden superior. Este tipo de limitadores tienen un carácter multidimensional en cuanto a su construcción, aspecto fundamental en el diseño de métodos de reconstrucción para mallas no estructuradas.

El gradiente limitado correspondiente a una determinada celda I , ∇U_I se obtendrá como media ponderada a partir de una serie de gradientes *representativos*, de la forma

$$\nabla U_I = \sum_{k=1}^N \omega_k \nabla U_k \quad (21)$$

donde $\{\nabla U_k, \quad k = 1, \dots, N\}$ es un conjunto de gradientes sin limitar, a partir de los cuales se construye el gradiente limitado. Los pesos $\{\omega_k, \quad k = 1, \dots, N\}$ se han construido en este trabajo como extensión del limitador de Van Albada, de la forma

$$\omega_k(g_1, g_2, \dots, g_N) = \frac{\prod_{i \neq k}^N g_i + \epsilon^{N-1}}{\sum_{j=1}^N \left(\prod_{i \neq j}^N g_i \right) + N\epsilon^{N-1}} \quad k = 1, \dots, N \quad (22)$$

donde $\{g_i, i = 1, \dots, N\}$ son funciones de los gradientes sin limitar (aquí $g_i = \|\nabla U_i\|^2$) y ϵ se incluye para evitar la división por cero. Las matrices hessianas también se limitan siguiendo el esquema anterior, pero en este caso las funciones g_i vienen dadas por

$$g_i = \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial x^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial x \partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial y^2} \right)^2 \quad i = 1, \dots, N \quad (23)$$

Otras derivadas de orden superior podrían limitarse empleando el mismo procedimiento, y tomando funciones g_i adecuadas.

En este estudio se han empleado mallas formadas por cuadriláteros. El empleo de mínimos cuadrados móviles para evaluar las derivadas sucesivas de las variables de flujo permite ensayar múltiples posibilidades en cuanto a la elección de los gradientes sin limitar a partir de los cuales se construyen los gradientes limitados, de acuerdo con (21)–(22). Para las mallas de cuadriláteros empleadas se propone un limitador de tipo (21)–(22) con $N = 5$; es decir, las derivadas limitadas se obtienen como media ponderada de cinco gradientes sin limitar. La figura 4 muestra cuatro posibles configuraciones para determinar estos *gradientes representativos*.

En los ejemplos presentados en este artículo se ha empleado la disposición de gradientes que se muestra en la figura 4-A, en la cual los cinco gradientes utilizados para calcular el gradiente limitado en la celda I son los gradientes sin limitar calculados en el centroide de la propia celda I y en los centroides de las celdas adyacentes (comparten un lado con I). En lo sucesivo se hará referencia a este limitador mediante las siglas PC5 (Promedio, Centroides, $N = 5$).

3.4 Flujos numéricos no viscosos.

En términos generales, podemos hablar de dos grandes familias de métodos *upwind*, en función del tipo de función de flujo numérico no viscoso: los métodos de tipo “*descomposición del vector de flujo*” (Flux Vector Splitting), y los de tipo “*descomposición de la diferencia de flujo*” (Flux Difference Splitting).

Los esquemas del tipo *Flux Vector Splitting* han tenido bastante éxito en problemas de flujo no viscoso (Euler), demostrando gran capacidad para capturar de forma precisa discontinuidades asociadas a ondas no lineales, incluyendo choques. El comportamiento de este tipo de métodos es menos satisfactorio en presencia de discontinuidades asociadas a ondas lineales, lo que conduce a una difusión excesiva de discontinuidades con o sin deslizamiento. Es poco frecuente su empleo, por tanto, en problemas de flujo viscoso

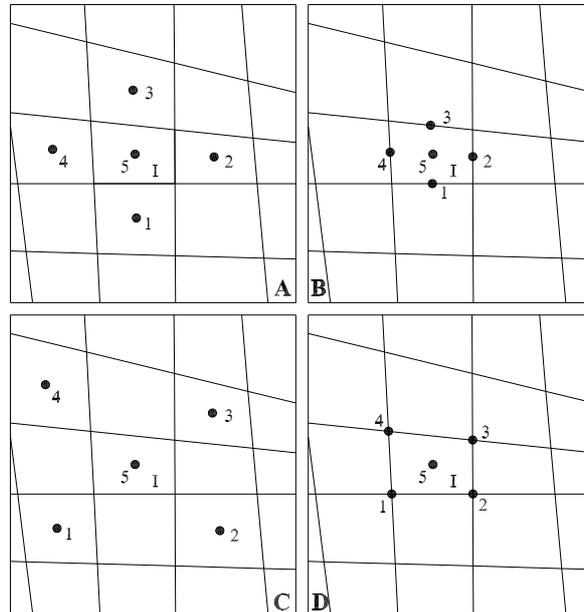


Figura 4: Esquema de los “vecinos” para limitar la reconstrucción en la celda I .

(Navier-Stokes). Se trata en general de esquemas sencillos de implementar, lo que los convierte en opciones muy atractivas para problemas de flujo no viscoso. Algunos ejemplos de flujos de este tipo son los desarrollados por Steger y Warming, Van Leer y Hänel [7].

Los esquemas *Flux Difference Splitting* están basados en la resolución aproximada de la versión linealizada del problema de Riemann, y son capaces de capturar adecuadamente discontinuidades asociadas tanto a ondas lineales como no lineales, a cambio de una mayor complejidad en cuanto a su implementación y un mayor coste computacional. Los dos métodos principales de esta familia son los desarrollados por Roe y Osher [7]. El desarrollo de esquemas *upwind* híbridos, que posean la *sencillez* de los métodos tipo Flux Vector Splitting y la *precisión* de los Flux Difference Splitting es un área de gran actividad en la actualidad.

En los ejemplos que se presentan en este artículo se ha empleado el flujo de Roe [8]. A continuación se presentan brevemente los aspectos más relevantes en cuanto a la implementación de este esquema.

3.4.1 Flujo de Roe (*Flux Difference Splitting*).

Una vez definidos los valores (estados) de las variables a la izquierda (U^+) y a la derecha (U^-) de cada interfaz, el flujo numérico vendrá dado por

$$(\mathbf{F}_x, \mathbf{F}_y) \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}_x(\mathbf{U}^+), \mathbf{F}_y(\mathbf{U}^+)) + (\mathbf{F}_x(\mathbf{U}^-), \mathbf{F}_y(\mathbf{U}^-))] \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \tilde{\alpha}_k |\tilde{\lambda}_k| \tilde{\mathbf{r}}_k \quad (24)$$

donde $\{\tilde{\lambda}_k, k = 1, 4\}$ y $\{\tilde{\mathbf{r}}_k, k = 1, 4\}$ son, respectivamente, los autovalores y autovectores del jacobiano aproximado $\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{U}^+, \mathbf{U}^-)$

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} - \tilde{c}, \quad \tilde{\lambda}_2 = \tilde{\lambda}_3 = \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n}, \quad \tilde{\lambda}_4 = \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} + \tilde{c} \quad (25)$$

$$(\tilde{\mathbf{r}}_1 \tilde{\mathbf{r}}_2 \tilde{\mathbf{r}}_3 \tilde{\mathbf{r}}_4) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ \tilde{u} - \tilde{c}n_x & -\tilde{c}n_y & \tilde{u} & \tilde{u} + \tilde{c}n_x \\ \tilde{v} - \tilde{c}n_y & \tilde{c}n_x & \tilde{v} & \tilde{v} + \tilde{c}n_y \\ \tilde{H} - \tilde{c} \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} & \tilde{c}(\tilde{v}n_x - \tilde{u}n_y) & \frac{1}{2}(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2) & \tilde{H} + \tilde{c} \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} \end{pmatrix} \quad (26)$$

y las correspondientes intensidades de onda $\{\tilde{\alpha}_k, k = 1, 4\}$ [9]

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_1 &= \frac{1}{2\tilde{c}^2} [\Delta(p) - \tilde{\rho}\tilde{c}(\Delta(u)n_x + \Delta(v)n_y)] \\ \tilde{\alpha}_2 &= \frac{\tilde{\rho}}{\tilde{c}} [\Delta(v)n_x - \Delta(u)n_y] \\ \tilde{\alpha}_3 &= -\frac{1}{\tilde{c}^2} [\Delta(p) - \tilde{c}^2\Delta(\rho)] \\ \tilde{\alpha}_4 &= \frac{1}{2\tilde{c}^2} [\Delta(p) + \tilde{\rho}\tilde{c}(\Delta(u)n_x + \Delta(v)n_y)] \end{aligned} \quad (27)$$

donde $\Delta(\cdot) = (\cdot)^- - (\cdot)^+$, $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ es la normal unitaria exterior a la interfaz, y los valores promedio de Roe, $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{u}, \tilde{v})$ y \tilde{H} (calculados en función de \mathbf{U}^+ y \mathbf{U}^-) se definen como

$$\tilde{u} = \frac{u^+ \sqrt{\rho^+} + u^- \sqrt{\rho^-}}{\sqrt{\rho^+} + \sqrt{\rho^-}} \quad \tilde{v} = \frac{v^+ \sqrt{\rho^+} + v^- \sqrt{\rho^-}}{\sqrt{\rho^+} + \sqrt{\rho^-}} \quad \tilde{H} = \frac{H^+ \sqrt{\rho^+} + H^- \sqrt{\rho^-}}{\sqrt{\rho^+} + \sqrt{\rho^-}} \quad (28)$$

Los valores promedio de $\tilde{\rho}$ y \tilde{c} se calculan de la forma

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho^+ \rho^-} \quad \tilde{c}^2 = (\gamma - 1) \left[\tilde{H} - \frac{1}{2} (\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2) \right] \quad (29)$$

Si tomamos \mathbf{U}^+ y \mathbf{U}^- como los valores promedio de la variable en las celdas a uno y otro lado de la discontinuidad, el esquema resultante será de primer orden. Los llamados métodos de orden superior corresponde a emplear como estados a la izquierda y derecha los que se obtienen a través del esquema de reconstrucción en las celdas que comparten la interfaz (figura 1).

3.5 Flujos difusivos.

Dado que en este caso lo más conveniente es utilizar métodos de discretización centrados, emplearemos directamente la aproximación por mínimos cuadrados móviles como método de reconstrucción para calcular los flujos difusivos en los puntos de integración de los lados de las celdas. Recordemos que la evaluación de las tensiones viscosas y los flujos térmicos requiere interpolar en cada punto de Gauss \mathbf{x}_{iq} tanto el vector velocidad $\mathbf{v} = (u, v)$ y la temperatura T como sus respectivos gradientes, $\nabla\mathbf{v}$ y ∇T . Utilizando aproximación MLS, las magnitudes anteriores se calculan directamente como

$$\mathbf{v}_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} \mathbf{v}_j N_j(\mathbf{x}_{iq}), \quad T_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} T_j N_j(\mathbf{x}_{iq}) \quad (30)$$

y

$$\nabla\mathbf{v}_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} \mathbf{v}_j \otimes \nabla N_j(\mathbf{x}_{iq}), \quad \nabla T_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} T_j \nabla N_j(\mathbf{x}_{iq}) \quad (31)$$

donde n_{iq} es el número de nodos (centroides) vecinos. Una vez que la información anterior ha sido interpolada en los puntos de Gauss, los flujos difusivos pueden calcularse, de acuerdo con (5), para posteriormente introducirlos en (15).

3.6 Integración numérica de los flujos.

El empleo de un punto de Gauss en cada lado es suficiente en cálculos que empleen la reconstrucción lineal. Sin embargo, resulta conveniente utilizar cuadraturas de orden superior en combinación con las reconstrucciones de orden mayor que dos: dos puntos de Gauss para la reconstrucción cuadrática y tres para la cúbica.

3.7 Integración en el tiempo.

Se ha utilizado el método TVD-Runge-Kutta de tercer orden propuesto por Shu y Osher [10]. Conocidas las variables de flujos en el paso previo n , U^n , el algoritmo procede en tres etapas para obtener las variables actualizadas U^{n+1}

$$\begin{aligned} U^1 &= U^n + \Delta t L(U^n) \\ U^2 &= \frac{3}{4}U^n + \frac{1}{4}U^1 + \frac{1}{4}\Delta t L(U^1) \\ U^{n+1} &= \frac{1}{3}U^n + \frac{2}{3}U^2 + \frac{2}{3}\Delta t L(U^2) \end{aligned} \quad (32)$$

En las ecuaciones anteriores el operador $L(\cdot)$ representa la derivada temporal dada por (15)

$$L(\mathbf{U}) = \frac{1}{A} \sum_{iedge=1}^{nedge} \sum_{igau=1}^{ngau} [(\mathcal{F}^V - \mathcal{F}) \cdot \mathbf{n}]_{igau} \mathcal{W}_{igau} \quad (33)$$

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

En esta sección se presentan diversos ejemplos de flujo compresible tanto viscoso como no viscoso. Un análisis más detallado de estos ejemplos, así como otros casos adicionales, puede encontrarse en [11].

4.1 Flujo no viscoso alrededor de un perfil NACA 0012.

4.1.1 Un ejemplo subsónico.

Una de las aportaciones más interesantes de la utilización de aproximaciones por mínimos cuadrados móviles al desarrollo de esquemas *upwind* de volúmenes finitos en mallas no estructuradas es la posibilidad de disponer de un esquema general que permite el cálculo de derivadas de muy alto orden de las variables a partir de sus valores promedio en cada celda. Este hecho ha permitido obtener esquemas robustos de orden superior (mayor que dos) sin introducir grados de libertad adicionales. En esta sección se compara el comportamiento de las reconstrucciones lineal, cuadrática y cúbica. La presencia de limitadores podría falsear los resultados, de forma que trabajaremos inicialmente con un problema totalmente subsónico y, por tanto, con reconstrucciones sin limitar.

El ejemplo resuelto corresponde a una situación de flujo subsónico alrededor de un perfil NACA 0012. El flujo en la corriente libre viene dado por $M = 0.63$, $\alpha = 2^\circ$. Empezaremos empleando una malla bastante gruesa. La resolución de los extremos del perfil es francamente pobre, de modo que la disipación inherente de las distintas reconstrucciones se hará patente mediante el análisis de las isolíneas de número de Mach.

La solución correcta a este problema se caracteriza por curvas de nivel de número de Mach aproximándose de forma suave a la superficie del perfil. Un método disipativo no será capaz de resolver de forma adecuada la zona de máxima succión, dando lugar a una excesiva generación de entropía cerca de la superficie del perfil. Esta “capa de entropía” se apreciará claramente al inspeccionar las isolíneas de número de Mach, que “se torcerán” a medida que se aproximen a la superficie del perfil. Esta capa pseudoviscosa originada por la disipación artificial introducida por el esquema numérico se traduce en un arrastre espúreo y, por tanto, en una sobreestimación del coeficiente de arrastre del perfil.

La figura 5 muestra las isolíneas de número de Mach obtenidas empleando el método de Roe y las reconstrucciones lineal (A), cuadrática (B) y cúbica con 2 y 3 puntos de Gauss en cada lado (C y D, respectivamente). En el caso de la reconstrucción lineal se aprecia claramente el comportamiento anómalo de las curvas de nivel cerca de la superficie del perfil, tanto en la parte superior como en la inferior, así como en la zona del extremo de salida. Esta anomalía, aunque presente, se reduce significativamente al pasar de

la reconstrucción lineal a la cuadrática. Finalmente, la reconstrucción cúbica elimina casi totalmente las anomalías en cuanto a curvas de nivel de número de Mach. La figura 6 muestra en detalle el comportamiento de estas isolíneas cerca de la superficie del perfil. Las diferencias en el comportamiento de las reconstrucciones de segundo y cuarto orden son espectaculares. Debemos destacar que la construcción de estos esquemas de alto orden *no requiere la introducción de grados de libertad adicionales*.

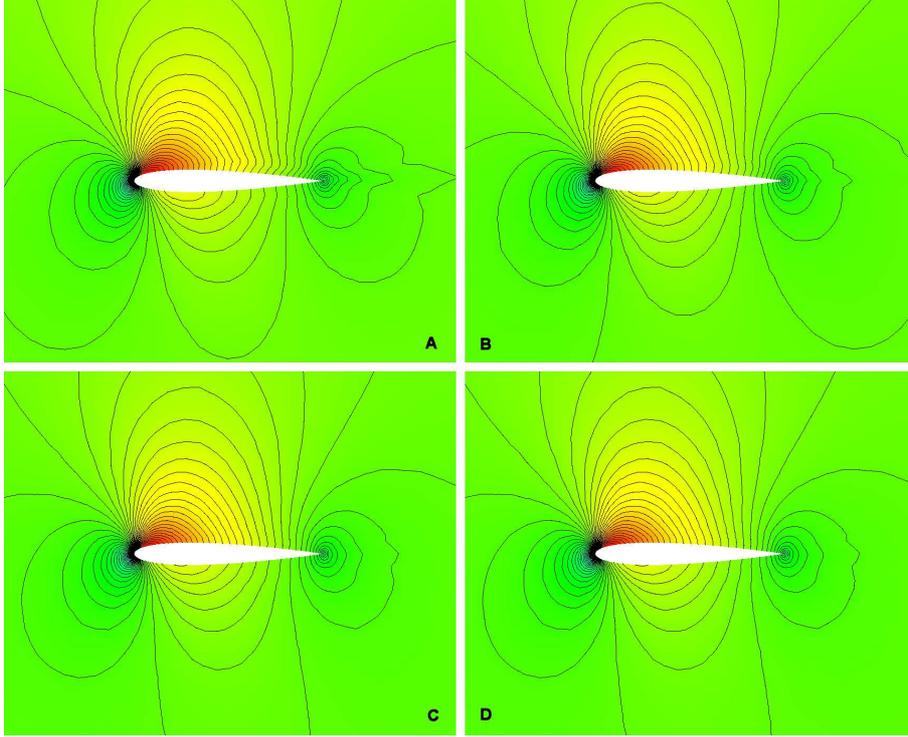


Figura 5: Flujo no viscoso alrededor de un perfil NACA 0012 ($M = 0.63$, $\alpha = 2^\circ$): curvas de nivel de número de Mach obtenidas empleando el flujo de Roe y reconstrucciones lineal (A), cuadrática (B) y cúbica (con 2 y 3 puntos de Gauss en cada lado, C y D), respectivamente.

Es interesante analizar la generación de entropía cerca de la superficie. Este flujo debería ser totalmente isentrópico, estando por tanto la producción de entropía íntimamente ligada a la cantidad de disipación artificial introducida por el esquema numérico. La máxima producción de entropía pasa de $\Delta S_{\max} = 0.03336$ en el caso de la reconstrucción lineal a $\Delta S_{\max} = 0.00772$ para la reconstrucción cúbica.

4.1.2 Dos ejemplos transónicos.

Se han resuelto dos casos de flujo transónico, $M = 0.8$ $\alpha = 1.25^\circ$ y $M = 0.85$ $\alpha = 1^\circ$, empleando una malla formada por 12243 cuadriláteros. El contorno exterior es una circunferencia de 30 cuerdas de radio. La figura 7 muestra los resultados correspondientes

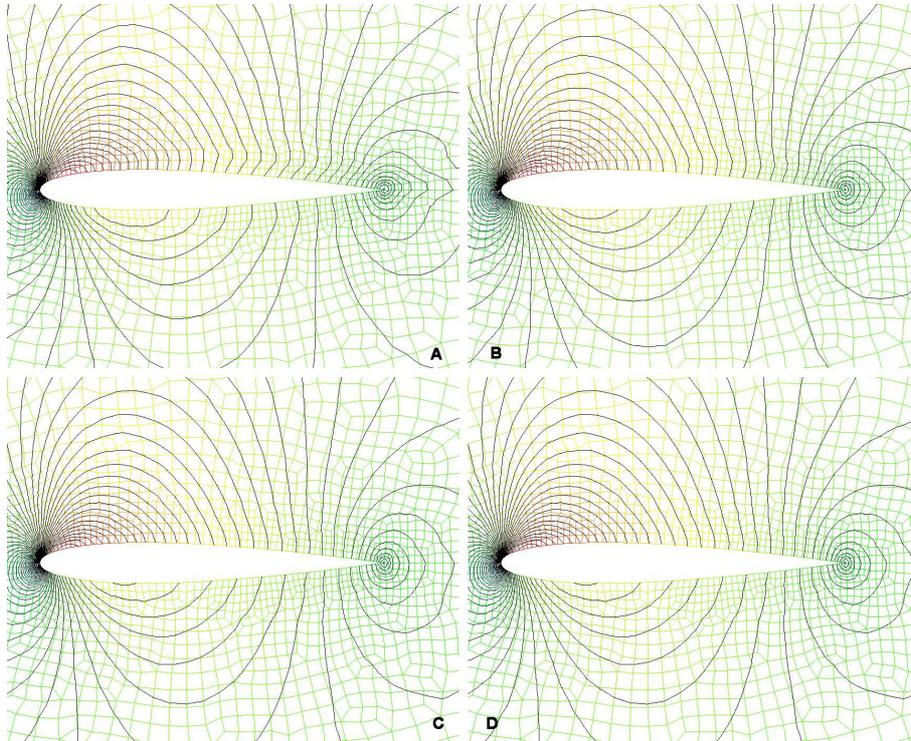


Figura 6: Flujo no viscoso alrededor de un perfil NACA 0012 ($M = 0.63$, $\alpha = 2^\circ$, malla gruesa): detalle de las curvas de nivel de número de Mach obtenidas empleando el flujo de Roe y reconstrucciones lineal (A), cuadrática (B) y cúbica (con 2 y 3 puntos de Gauss en cada lado, C y D), respectivamente.

al método de Roe con reconstrucción cuadrática y el limitador PC5. La posición de los choques es correcta y su resolución bastante precisa (una celda interior). El choque débil en la superficie inferior en el caso $M = 0.8$, $\alpha = 1.25^\circ$ se ha resuelto de forma muy precisa, sin afectar a la singularidad post-choque de Zierp. En ambos casos la línea de deslizamiento es clara.

4.2 Flujo viscoso alrededor de un perfil NACA 0012.

4.3 Flujo viscoso supersónico.

La figura 8 muestran los resultados correspondientes a un caso de flujo viscoso supersónico, $M = 2$, $\alpha = 0^\circ$, $Re = 2000$. Los cálculos se han realizado empleando el método de Roe y reconstrucción cuadrática con el limitador PC5.

4.4 Flujo viscoso no estacionario

El último ejemplo que se presenta es un caso de flujo viscoso no estacionario, $M = 0.3$, $\alpha = 30^\circ$, $Re = 3000$. Con este ángulo de ataque, el flujo laminar considerado se vuelve inestable, de forma que no es posible alcanzar un régimen estacionario. En su lugar, el flujo resultante se caracteriza por un proceso periódico de emisión de vórtices.

La figura 9 muestra las líneas de corriente y números de Mach, para cuatro instantes de tiempo, definidos por diferentes valores del tiempo adimensional $t^* = V_\infty t/c$, donde V_∞ es el módulo de la velocidad en la corriente libre y c la cuerda del perfil.

5 CONCLUSIONES

En este artículo se ha analizado el empleo de mínimos cuadrados móviles (MLS) para el desarrollo de métodos *upwind* de muy alto orden en mallas no estructuradas para problemas de flujo compresible (Euler y Navier-Stokes).

- El desarrollo de esquemas *upwind* a través de las ideas del *método generalizado de Godunov*, con reconstrucciones polinómicas de las variables en cada celda constituye una opción sistemática y muy eficiente para construir esquemas de gran precisión para las ecuaciones de Navier-Stokes en mallas no estructuradas. Así, permite obtener esquemas de muy alto orden *sin aumentar el número de grados de libertad* del problema. En la práctica, sin embargo, la utilización de métodos de este tipo ha estado severamente limitada por la necesidad de disponer de técnicas de aproximación que permitan estimar las *derivadas de alto orden* de las variables de flujo, a partir de los valores promedio en las distintas celdas. La escasa potencia de las técnicas empleadas en la literatura ha provocado que la inmensa mayoría de las formulaciones existentes sean solamente de segundo orden (reconstrucciones lineales a trozos).
- La utilización de mínimos cuadrados móviles que se propone ha permitido disponer de un marco de aproximación espacial general (algo parecido a unas “funciones de forma”), además de suponer un acercamiento sistemático y eficiente tanto al desarrollo de reconstrucciones de muy alto orden como a la evaluación de los flujos viscosos en esquemas *upwind* de volúmenes finitos en mallas no estructuradas.

6 AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la Dirección General de Investigación del Ministerio de Educación y Ciencia (Proyecto DPI2004-05156), por la Dirección Xeral de I+D de la Consellería de Innovación, Industria e Comercio de la Xunta de Galicia (Proyecto PGIDIT03PXIC118001PN y PGIDIT03PXIC118002PN) y por la Universidade da Coruña.

El primer autor agradece la financiación recibida de la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia, del Colegio de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos, y de Caixanova.

REFERENCIAS

- [1] S.K. Godunov. A difference method for the numerical calculation of discontinuous solutions of hydrodynamic equations. *Mat. Sbornik*. **47**(3):271-306 (1959).

- [2] A. Harten, P. Lax, B. Van Leer. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Rev.* **25**:35-61 (1983).
- [3] T.J. Barth. Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for the Euler and Navier-Stokes equations. *VKI Lecture Series 1994-05*.(1995).
- [4] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method. *Journal of Computational Physics.* **32**:101 (1979).
- [5] T.J. Barth, D.C. Jespersen. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. *AIAA-89-0366*(1989).
- [6] P. Lancaster, K. Salkauskas. Surfaces generated by moving least squares methods. *Math. of Comp.* **155**:141–158 (1981).
- [7] F. Grasso, C. Meola. Euler and Navier-Stokes equations for compressible flows: finite volume methods. *Handbook of Computational Fluid Mechanics*. R. Peyret (ed.). Academic Press (2000).
- [8] P.L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *Journal of Computational Physics.* **43**:357–372 (1981).
- [9] J.R. Amaladas, H. Kamath. Accuracy assessment of upwind algorithms for steady-state computations. *Computers and Fluids.* **27**:941–962 (1998).
- [10] C.-W. Shu, S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics.* **77**:439-471 (1988).
- [11] L. Cueto-Felgueroso. Partículas, volúmenes finitos y mallas no estructuradas: simulación numérica de problemas de dinámica de fluidos. Tesis Doctoral. Universidad de La Coruña (2005).

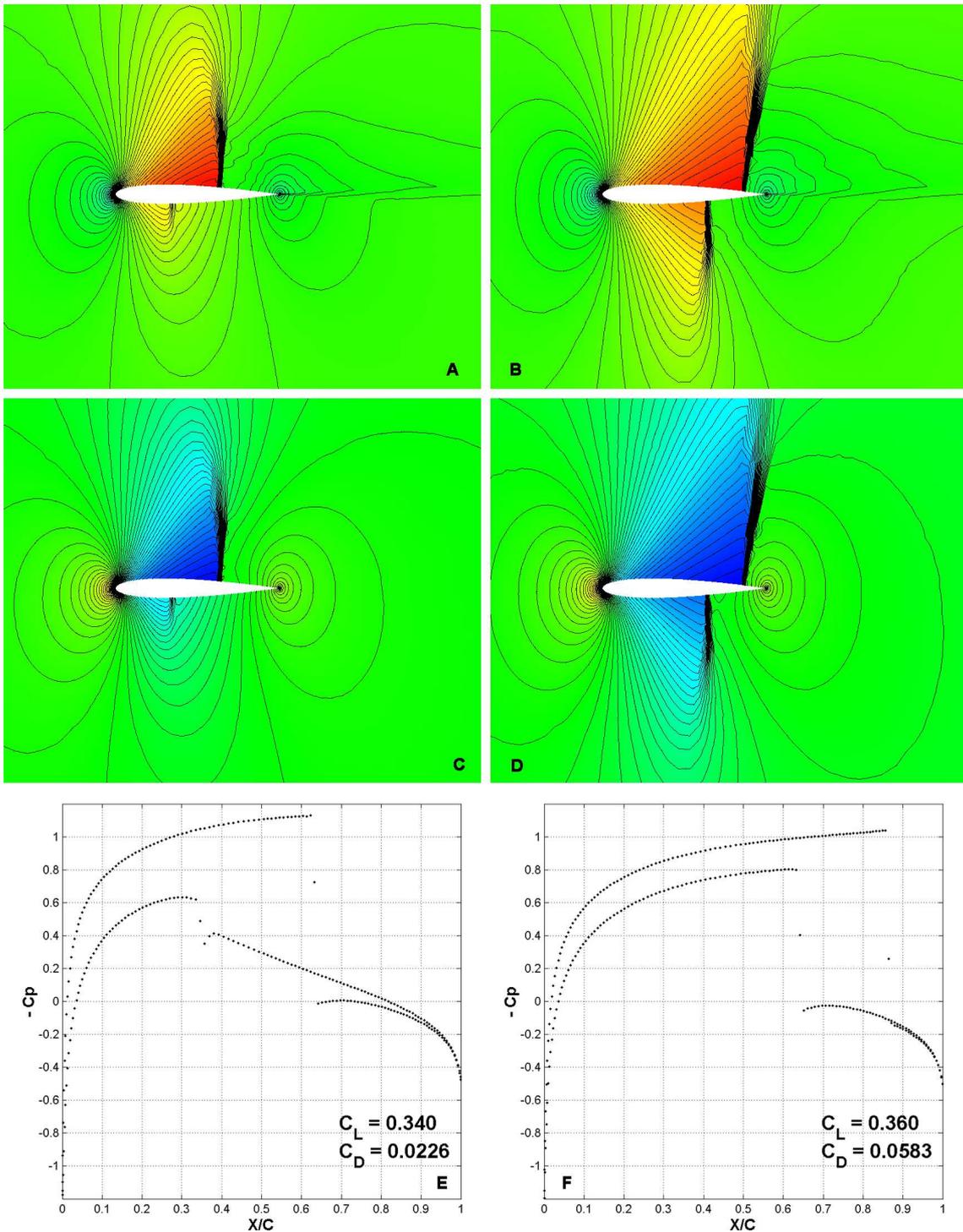


Figura 7: Flujo no viscoso alrededor de un perfil NACA 0012 ($M = 0.8$, $\alpha = 1.25^\circ$ a la izquierda y $M = 0.85$, $\alpha = 1^\circ$ a la derecha): resultados empleando el método de Roe, *reconstrucción cuadrática* y el limitador PC5. Isolíneas de número de Mach (arriba), isolíneas de presión (centro) y coeficientes de presión C_p en la superficie del perfil (abajo).

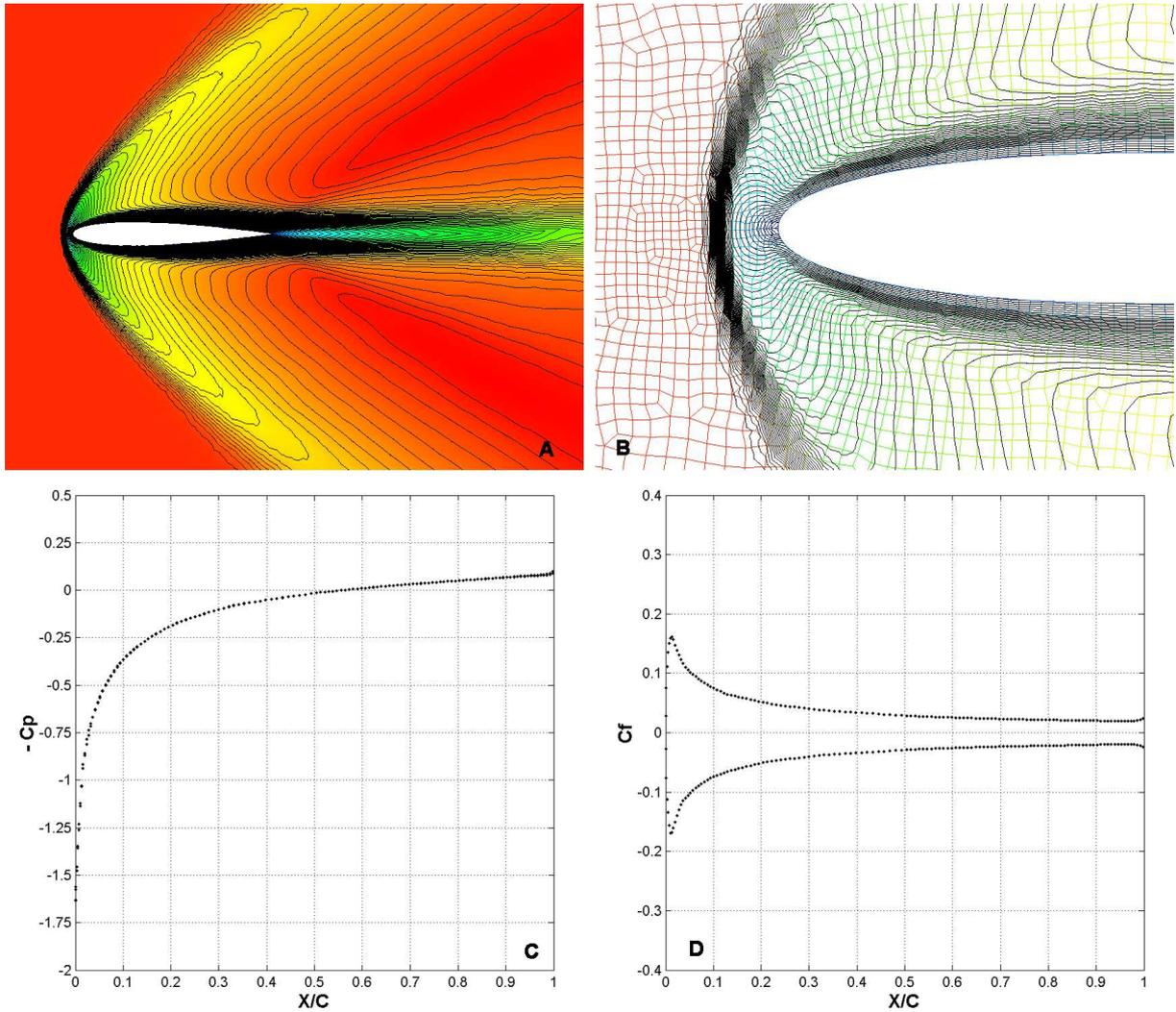


Figura 8: Flujo viscoso alrededor de un perfil NACA 0012 ($M = 2$, $\alpha = 0^\circ$, $Re = 2000$): isóneas de número de Mach (A), detalle de las isóneas de número de Mach (B), coeficientes de presión C_p (C) y fricción superficial C_f (D). Resultados obtenidos empleando el método de Roe, *reconstrucción cuadrática y limitador PC5*.

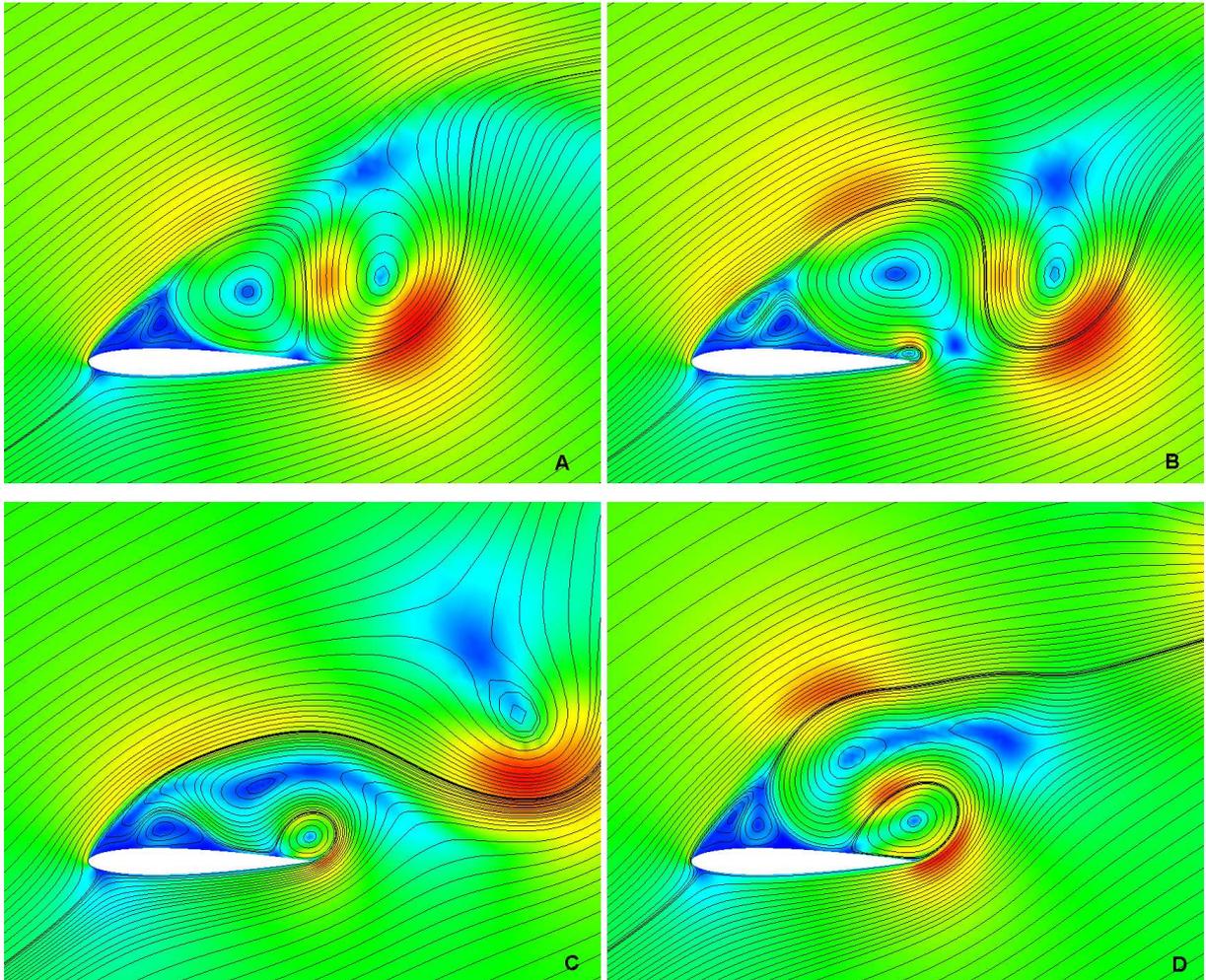


Figura 9: Flujo viscoso no estacionario alrededor de un perfil NACA 0012 ($M = 0.3$, $\alpha = 30^\circ$, $Re = 3000$): líneas de corriente y distribución de números de Mach para tiempos adimensionales $t^* = 79.8$ (A), $t^* = 86.7$ (C), $t^* = 89.7$ (B) y $t^* = 94.1$ (D).