



**Universidad
Zaragoza**

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Simulación numérica de flujo compresible con ondas de choque.

Grado en física

Miguel Calvo Arnal

Supervisado por:

Pilar García Navarro y Adrián Navas Montilla

Departamento de Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos

FACULTAD DE CIENCIAS



**Facultad de Ciencias
Universidad Zaragoza**

Simulación numérica de flujo compresible con ondas de choque

Resumen

En el presente trabajo se desarrollarán las ideas básicas de la Mecánica de Fluidos Computacional y se expondrán los pasos inherentes en el desarrollo de un programa de simulación de flujos compresibles no viscosos con ondas de choque. Se desarrolla brevemente la teoría y las expresiones de los problemas, se presentan varios métodos numéricos y las soluciones obtenidas con ellos. También se validan los algoritmos mostrando su concordancia con la teoría de la Mecánica de Fluidos.

Agradecimientos

Quiero agradecer el inmenso apoyo que he tenido por parte de tanto la profesora Pilar García Navarro como Adrián Navas Montilla a lo largo de la realización del trabajo.
Sobre todo por su excepcional paciencia y comprensión.

Índice general

1. Introducción y objetivos	2
2. Ecuaciones del flujo	3
2.1. Flujo en una tobera	6
2.2. Problema de Riemann. Tubos de Sod	7
3. Esquemas numéricos implementados	9
3.1. Método de los volúmenes finitos y esquema de Godunov	9
3.2. Esquema de MacCormack	11
3.3. Esquema de Roe	12
3.4. Esquema HLL(S)	13
3.4.1. Esquema HLL	13
3.4.2. Esquema HLLS	14
3.5. Esquema HLLC(S)	14
3.5.1. Esquema HLLC	14
3.5.2. Esquema HLLCS	15
4. Resultados numéricos	15
4.1. Discretización del problema y condiciones de contorno	16
4.2. Flujo en una tobera	17
4.2.1. Entrada subsónica y salida supersónica	17
4.2.2. Flujo subsónico en toda la tobera	19
4.2.3. Flujo subsónico con $M = 1$ en el cuello	20
4.3. Tubo de Sod	21
4.4. Orden de convergencia	23
5. Conclusiones	25
Apéndices	25

5.1. Código	25
5.2. Condiciones iniciales	26
5.2.1. Entrada subsónica y salida supersónica	26
5.2.2. Flujo subsónico en toda la tobera	26
5.2.3. Flujo subsónico con $M = 1$ en la garganta	26
5.3. Figuras	27
5.4. Coeficientes método de Roe	27
5.5. Ecuaciones cuasi-unidimensionales de un flujo compresible no viscoso por un conducto de área variable	28
5.5.1. Ecuación de continuidad	28
5.5.2. Ecuación de conservación del momento lineal	29
5.5.3. Ecuación de conservación de la energía	30
5.5.4. Obtención de las relaciones entre las variables y el número de Mach	31
5.6. Corrección de la entropía	33
5.7. Modificación HLLS	33
5.8. Modificación HLLCS	35
5.9. Obtención parámetros HLLC	37
5.10. Obtención parámetros HLLCS	39

1. Introducción y objetivos

Históricamente, la Mecánica de Fluidos ha sido una rama de la ciencia en la que se diferenciaban dos vías de investigación: la vía teórica, tanto con métodos analíticos como con teorías de perturbaciones o aproximadas; y la vía experimental. Sin embargo, desde inicios del siglo XX ya se empezaba a contemplar la posibilidad de utilizar la computación para obtener soluciones a flujos que no podían resolverse analíticamente. Tan pronto como 1922, Lewis Fry Richardson propuso un esquema numérico motivado por la resolución de las ecuaciones de la Mecánica de Fluidos para la predicción meteorológica [1]. En 1933 ya se obtuvo la primera simulación numérica de un flujo en torno a un cilindro por A.Thom [2]. Y en 1950 [3] se consiguió la primera predicción meteorológica exitosa en el ENIAC. Estos avances abrían las puertas de una nueva vía de investigación que iba ligada a la invención de los ordenadores y la creciente velocidad de computación: nacía la simulación numérica.

Sobre la década de 1970 se empezó a extender el uso y el desarrollo de una nueva rama de la Mecánica de Fluidos: la **dinámica de fluidos computacional**, abreviada normalmente como **CFD** por sus siglas en inglés. Esta nueva vía hacía posible el estudio de los problemas físicos a una profundidad difícil de alcanzar con experimentos reales. Por ejemplo, permite obtener los campos de velocidades de un flujo en cualquier instante temporal; o la simulación de algunos flujos que no se pueden replicar en un laboratorio, como pueden ser los flujos del plasma en torno a las estrellas. En la actualidad, en el enorme sector automovilístico ya se ha extendido su uso, consiguiendo diseños que optimizan el consumo de combustible y reducen la resistencia al aire/agua. Es más rápido, más barato y más práctico en muchos casos que la experimentación normal.

Por otra parte. El desarrollo de los algoritmos que permiten simular flujos es una tarea complicada y las soluciones dependen de muchos parámetros que afectan a la solución del problema. Normalmente, deben validarse y comprobarse exhaustivamente sus resultados con casos de solución conocida, antes de ser utilizados en simulaciones para problemas reales de los que no conocemos su comportamiento físico.

Existen varios acercamientos posibles para la simulación de flujos. Entre los más conocidos podemos encontrar los métodos de los volúmenes finitos, de diferencias finitas (sección 4.2 de [9]) o de elementos finitos [20]. Aquí se utilizará el método de los volúmenes finitos [18]. El trabajo se centra en la simulación de **flujos compresibles no viscosos con ondas de choque**. Estos flujos se dan, por ejemplo, en las toberas a la salida de cohetes, en explosiones o en aviones supersónicos. Los objetivos específicos son:

1. La elaboración desde cero de un programa en C++ que reúna los diferentes algoritmos para la simulación de flujo compresible no viscoso en una dimensión.
2. Selección de los problemas a estudiar y búsqueda de soluciones analíticas.
3. Consideración de las distintas modificaciones y correcciones para los algoritmos implementados.
4. Simulación numérica de los problemas y validación de los algoritmos comparando con las soluciones analíticas o exactas.

5. Comparación de los métodos utilizados e identificación de ventajas y desventajas de cada uno.

2. Ecuaciones del flujo

Para obtener las ecuaciones del flujo que utilizaremos, partiremos del caso general, las ecuaciones de Navier-Stokes. Las ecuaciones de Navier-Stokes son un sistema de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento más general de un fluido homogéneo en composición, viscoso y newtoniano. Estas ecuaciones expresan la conservación de la masa, del momento y de la energía para el fluido. [4]

La ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1)$$

La ecuación de conservación del momento lineal:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \tau' + \rho \vec{f}_m \quad (2.2)$$

Y la ecuación de la conservación de la energía:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right) = \\ = \nabla \cdot (\tau \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q} + \dot{Q}_{\text{rad}} + \dot{Q}_{\text{reac}} + \rho \vec{f}_m \cdot \vec{v} \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde ρ es la densidad, \vec{v} la velocidad, p la presión por unidad de volumen, e la energía interna, τ' el tensor de esfuerzos viscosos, \dot{Q}_{rad} la transferencia de calor por radiación, \dot{Q}_{reac} el intercambio de calor por reacciones químicas, $\nabla \cdot \vec{q}$ el flujo de calor por conducción, y $\nabla \cdot (\tau \cdot \vec{v})$ el trabajo de las fuerzas de superficie sobre el fluido, y \vec{f}_m las fuerzas externas por unidad de masa. En este caso general, es un sistema de cinco ecuaciones con siete incógnitas, por lo que se suelen añadir las dos ecuaciones de estado termodinámicas del fluido.

Para particularizarlas al caso de flujo compresible no viscoso, vamos a suponer que los términos viscosos serán despreciables $\tau' = 0$. Además, también se despreciarán los efectos de la gravedad $\vec{f}_m = 0$ y los términos de transferencia de calor por conducción, radiación o reacciones químicas $\nabla \cdot \vec{q} = \dot{Q}_{\text{rad}} = \dot{Q}_{\text{reac}} = 0$.

Entonces, las ecuaciones de Navier-Stokes (2.1), (2.2) y (2.3), se reducen a las **ecuaciones de Euler**:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\nabla p \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \left(\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right) = -P \nabla \cdot \vec{v} \quad (2.6)$$

Como en este caso también está también se considera área variable, las ecuaciones se verán modificadas; tal y como se desarrolla en el apéndice 5.5. Entonces, después de promediar en la sección transversal de área A , resulta

$$\frac{\partial (\rho A)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho A v)}{\partial x} = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial (\rho A v)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho A v^2 + A p)}{\partial x} = p \frac{\partial A}{\partial x} \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial (AE)}{\partial t} + \frac{\partial (A v (E + p))}{\partial x} = 0 \quad (2.9)$$

con $E = \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right)$ la energía total. Por otro lado, suponiendo que se trabaja con gases perfectos, se añaden para completar el sistema las ecuaciones termodinámicas

$$p = \rho R T \quad (2.10)$$

y

$$de = c_v dT \quad (2.11)$$

con $R = 286,9 \frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}}$ la constante específica de los gases para el aire seco, $c_v = \frac{R}{\gamma - 1}$ el calor específico a volumen constante, y γ la constante adiabática para un gas diatómico (se usa típicamente para el aire seco) $\gamma = \frac{c_p}{c_v} = 1,4$.

Otra versión de (2.11) es útil para la entalpía

$$h = c_p T$$

donde c_p es el calor específico a presión constante.

Utilizando dos de las relaciones anteriores, (2.10) y (2.11), se puede reescribir la energía en función de la presión, que será útil más adelante (para las condiciones de contorno).

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} v^2 \right) = \rho \underbrace{C_v}_{\frac{R}{\gamma - 1}} T + \frac{1}{2} \rho v^2 = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho v^2 \quad (2.12)$$

Ahora que ya se han introducido las ecuaciones a utilizar: (2.7), (2.8) y (2.9), se reescribirán en una forma más conveniente que facilitará la presentación de los esquemas numéricos para su resolución, así como su posterior implementación. En concreto, se escribirán en la siguiente forma vectorial

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{S} \quad (2.13)$$

siendo: \mathbf{U} el vector de variables conservadas, \mathbf{F} el vector de flujos, y \mathbf{S} el vector de términos fuente, definidos como sigue:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho A \\ \rho Av \\ EA \end{pmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho Av \\ \rho Av^2 + Ap \\ Av(E + p) \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ p \frac{\partial A}{\partial x} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Para entender mejor el comportamiento del sistema de ecuaciones (2.13) que se va a resolver, se puede recurrir a la matriz jacobiana del flujo físico \mathbf{F} :

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}v^2 & (3-\gamma)v & \gamma-1 \\ \frac{\gamma-2}{2}v^3 - \frac{va^2}{\gamma-1} & \frac{3-2\gamma}{2}v^2 + \frac{a^2}{\gamma-1} & \gamma v \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Si ahora se desarrolla el polinomio característico, se obtienen los siguientes autovalores:

$$\lambda_1 = v - a \quad \lambda_2 = v \quad \lambda_3 = v + a \quad (2.16)$$

Y a partir de estos autovalores, se puede resolver la ecuación de autovalores

$$(\mathbf{J} - \lambda_i \mathbf{I}) \mathbf{e}_i = \mathbf{0} \quad i = 1, 2, 3$$

obteniendo los autovectores

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ v - a \\ H - va \end{pmatrix} \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2}v^2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ v + a \\ H + va \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Esto aporta una información muy importante del problema. Los autovalores (2.16) indican las tres velocidades características del problema: todas las soluciones que se obtengan serán una combinación de tres ondas con velocidades dadas por λ_1 , λ_2 y λ_3 . Y precisamente estas tres velocidades definirán el comportamiento del flujo, separándolo en dos tipos de flujo:

- **Flujo subsónico.** Este flujo se dará siempre que la velocidad del fluido sea menor que la velocidad del sonido.
- **Flujo supersónico.** Este flujo se dará cuando la velocidad del fluido supere la velocidad del sonido.

La importancia en esta distinción es que, si la información en el flujo compresible se propaga según las tres velocidades (2.16), cuando el flujo sea supersónico $v > a \implies \lambda_i > 0 \ i = 1, 2, 3$ y ninguna información podrá viajar «aguas arriba». Esto tendrá una serie de consecuencias que se verán a lo largo del trabajo. En la figura 2.1 se muestra un esquema de las tres ondas características.

Se aprovecha para introducir un número adimensional muy utilizado en flujo compresible y que diferencia entre flujo supersónico y flujo subsónico. Este número es el número de Mach

$$M = \frac{v}{a} \quad (2.18)$$

siendo v la velocidad del fluido y a la velocidad del sonido

$$a = \sqrt{\gamma RT} \quad (2.19)$$

De la definición de M (2.18) se ve que si $M > 1$, el flujo será supersónico y, si $M < 1$, el flujo será subsónico.

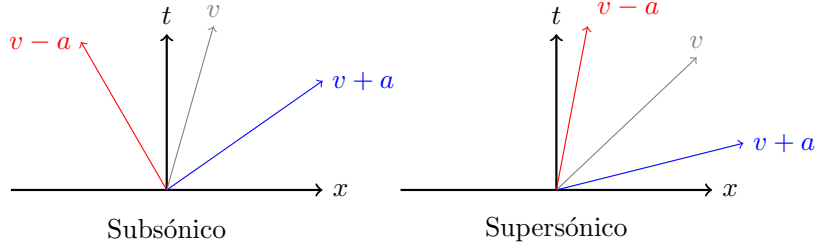


Figura 2.1: Esquema de las tres ondas características del flujo. Como se puede ver, en el caso supersónico no hay ninguna onda que viaje a la izquierda, por lo que lo que ocurra en el flujo no influenciará la zona «aguas arriba».

2.1. Flujo en una tobera

El estudio del flujo en toberas (capítulos 7 y 8 de [10]) es un problema de referencia para la validación de métodos numéricos de resolución de flujo compresible no viscoso en estado estacionario. Además, este es el caso más sencillo donde se puede observar una onda de choque estacionaria; a diferencia de otros problemas como la onda de choque producida por una explosión o aquellas generadas por aeronaves en movimiento (ambas en movimiento).

Supongamos que tenemos un tramo de una tobera convergente-divergente como se muestra en la figura 2.2.

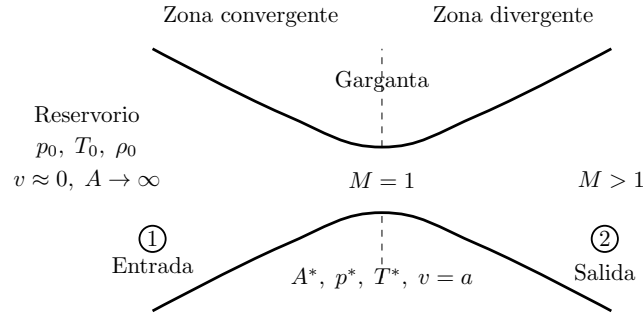


Figura 2.2: Esquema de flujo isentrópico subsónico-supersónico en una tobera.

A partir de las ecuaciones (2.7), (2.8) y (2.9), y gracias a la condición de flujo isentrópico, se puede llegar analíticamente a una relación (desarrollada en el apéndice 5.5) entre el área y el número de Mach (2.18)

$$\left(\frac{A}{A^*}\right)^2 = \frac{1}{M^2} \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \right]^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} \quad (2.20)$$

Conociendo el número de Mach se puede obtener el resto de incógnitas a partir de las propiedades de flujo isentrópico (apéndice 5.5):

$$\frac{p}{p_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{-\gamma}{\gamma - 1}} \quad (2.21)$$

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{-1}{\gamma - 1}} \quad (2.22)$$

$$\frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{-1} \quad (2.23)$$

Se puede advertir que no se puede despejar explícitamente el número de Mach de la ecuación (2.20), así que no se puede obtener la forma funcional $p(M)$, $\rho(M)$, $T(M)$ como tal. Lo que se hará es obtener numéricamente $M(A)$ en cada nodo de la discretización espacial. Después, con las relaciones (2.21), (2.22) y (2.23), se obtendrán las variables teóricas.

Por otro lado, la ecuación (2.20) dará dos valores de M , asociados a la solución estacionaria con salida supersónica y con salida subsónica. Llegar a una u otra dependerá de las condiciones de contorno e iniciales que se escojan. En la figura 2.3 se muestran las formas funcionales teóricas para las variables p , ρ y T para el caso supersónico en azul y en rojo para el caso subsónico.

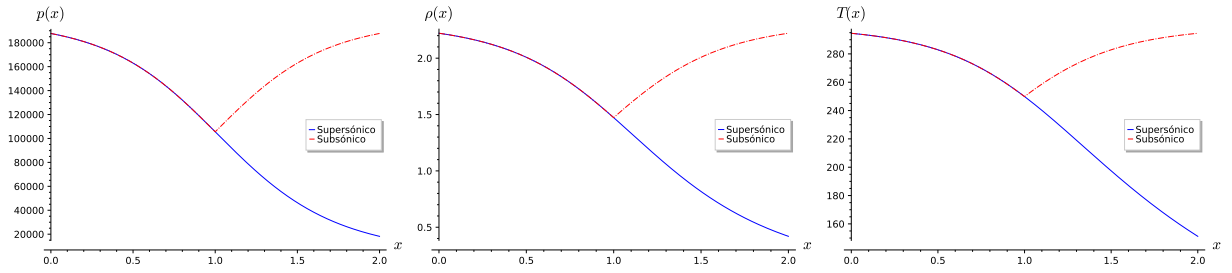


Figura 2.3: Forma funcional de las expresiones (2.21), (2.22), (2.23).

En este trabajo se considerará un caso particular de flujo compresible no viscoso supersónico para la validación de los modelos de simulación. Este caso consiste en una tobera convergente divergente como la de la figura 2.2. El área vendrá dada por una dependencia parabólica

$$A(x) = A_{\min} + 4 \frac{A_{\max} - A_{\min}}{L^2} \left(x - \frac{L}{2}\right)^2 \quad (2.24)$$

El área decrece hasta un mínimo, llamado garganta o cuello, y después irá aumentando de nuevo. Además, si se deriva la ecuación (2.20) respecto a x , se encuentra que el flujo seguirá la siguiente lógica:

- Flujo subsónico ($M < 1$): si $\frac{dA}{dx} > 0$, $\frac{dM}{dx} < 0$; y si $\frac{dA}{dx} < 0$, $\frac{dM}{dx} > 0$
- Flujo supersónico ($M > 1$): si $\frac{dA}{dx} > 0$, $\frac{dM}{dx} > 0$; y si $\frac{dA}{dx} < 0$, $\frac{dM}{dx} < 0$

Es decir, en la entrada se tendrá flujo subsónico. El flujo se acelerará al decrecer el área. Si en la garganta se consigue la condición sónica, $M = 1$, el flujo pasará a ser supersónico. Como el flujo supersónico sigue el criterio contrario, se acelerará con el aumento del área.

2.2. Problema de Riemann. Tubos de Sod

El problema de Riemann (página 49 de [6]) es otro de los problemas estándar para validar algoritmos de resolución de flujo compresible; esta vez se estudiará el régimen transitorio. El problema de Riemann es un problema de valor inicial en el que las condiciones iniciales vienen dadas por una discontinuidad de la forma

$$\mathbf{U}(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & x \leq x_0 \\ \mathbf{U}_R & x > x_0 \end{cases} \quad (2.25)$$

donde tanto \mathbf{U}_L como \mathbf{U}_R son constantes y x_0 es la posición en la que se encuentra la discontinuidad. Los subíndices L y R se refieren a la izquierda o derecha de la discontinuidad. Además, impondremos que

$$A = 2 \text{ m}^2 = \text{cte}$$

El tubo de Sod [19] es un caso unidimensional del problema de Riemann que se da con flujo compresible no viscoso en un tubo de sección constante. En la mitad del tubo hay una membrana que separa los dos estados, y al inicio del problema esta membrana se rompe. Se utilizará el método (capítulo 4 de [6]) exacto para calcular la solución transitoria desde la rotura, y esta solución exacta es la que se comparará con la obtenida con los algoritmos numéricos implementados.

En concreto, en el problema del tubo de Sod se establecen los siguientes parámetros como condiciones iniciales:

$$\begin{pmatrix} \rho_L \\ p_L \\ v_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \rho_R \\ p_R \\ v_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,125 \\ 0,1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

donde el valor de los parámetros va entre 0 y 1, pudiendo reescalarsse a los valores de presión y densidad que se desee. En la figura 2.4 se muestra la forma funcional de la solución a tiempo $t = 0,0015 \text{ s}$.

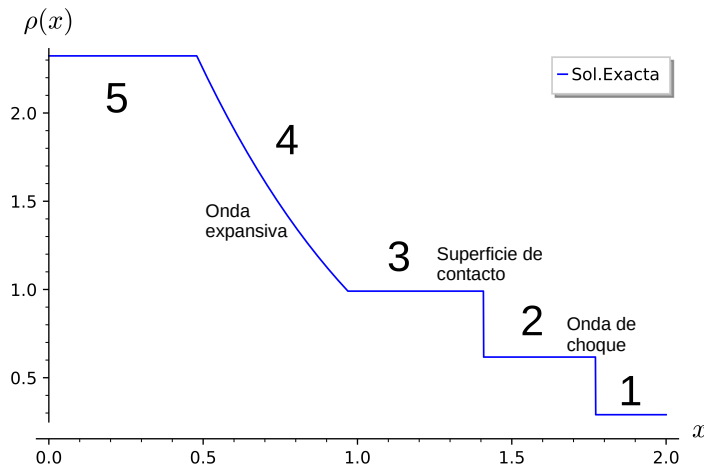


Figura 2.4: Solución para la densidad con el método exacto para el problema de Sod a tiempo $t = 0,0015 \text{ s}$. En las gráfica están denotadas las diferentes zonas de la solución con los números del 1 al 5. También se indican las tres ondas características del problema.

Como se manifiesta en la figura 2.4, se pueden distinguir cinco zonas en la solución del problema:

1. Zona de baja presión sin perturbar.
2. Zona que va desde la superficie de contacto hasta la onda de choque.
3. Zona entre el inicio de la onda expansiva y la superficie de contacto.

4. Onda de expansión o rarefacción.
5. Zona de alta presión sin perturbar.

Para entender por qué existe esta división en zonas, se debe recurrir a los autovalores de nuestro problema (2.16). Estas tres ondas de velocidades λ_1 , λ_2 y λ_3 son las responsables de la división en zonas del problema de Sod (o el de Riemann). En concreto:

Onda de choque: Esta discontinuidad separa dos zonas con diferentes valores para todas las variables del flujo: p , ρ , v , T y sus derivados. Esta onda representa directamente una onda que esta puramente compuesta por la onda característica $\lambda_3 = v + a$; y que se mueve a esta velocidad.

Onda de contacto: Esta discontinuidad separa dos zonas del flujo con diferentes valores de densidad y temperatura, siendo continuas y uniformes tanto p como v . Esta onda esta formada por la onda característica $\lambda_2 = v$, y por tanto se desplaza a la velocidad del fluido.

Onda de rarefacción: Esta onda presenta características diferentes a las otras dos, puesto que no es discontinua y se va ensanchando con el tiempo. De todas formas, es puramente la onda característica $\lambda_1 = v - a$ y viaja a esta velocidad. Por esto es la única que viaja en dirección opuesta al flujo.

Hay un punto muy importante que no se ha nombrado: estas ondas son no lineales y las velocidades a las que se mueven van variando, puesto que v y a (por lo general) varían a lo largo del flujo. El hecho de que presenten no linealidades requerirá esquemas numéricos apropiados que manejen adecuadamente las no linealidades y capturen con precisión las discontinuidades.

3. Esquemas numéricos implementados

En esta sección se presentarán los esquemas numéricos que se utilizarán. Estos estarán basados en el método de los volúmenes finitos. Se expondrá primero el método de los volúmenes finitos y el esquema de Godunov. Algoritmos que se van a utilizar para el cálculo de los flujos numéricos: MacCormack, de Roe, HLL y HLLC, y todos ellos se modificarán para incluir el efecto de los términos fuente.

3.1. Método de los volúmenes finitos y esquema de Godunov

El método de volúmenes finitos, al igual que el de diferencias finitas y el de elementos finitos, sirve para aproximar numéricamente la solución de ecuaciones en derivadas parciales. Se llama «método de volúmenes finitos» puesto que trabaja sobre la idea de que en el dominio del problema se divide en un número finito de volúmenes. Cada cada uno de esos volúmenes es lo que se llamará **celda**. La superficie exterior de la celda estará dividida en **paredes** o **interfases**, que compartirá con celdas adyacentes. Cada pared estará entre dos celdas con estados distintos.

A partir de estos estados se calculan los **flujos** numéricos. En la figura 3.1 se muestra el esquema de la discretización espacial en una dimensión.

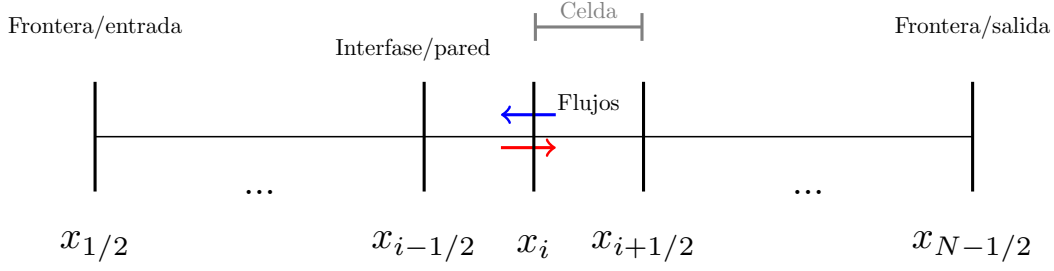


Figura 3.1: Esquema de un «volumen finito» o celda y de su estructura. En cada interfase o pared tiene otra celda adyacente.

Un punto interesante del método es que, como los flujos que entran a una celda son iguales a los que salen de la siguiente, es un método conservativo. Esto es especialmente conveniente para sistemas con leyes de conservación; como es el caso de la mecánica de fluidos.

Aún queda por determinar cómo se definen los valores en cada celda, y también cómo se actualiza el estado de las celdas en cada paso temporal. Empezando por la definición del valor promedio en una celda; se define el estado de cada celda como

$$\mathbf{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t) dx \quad i = 1, \dots, N \quad (3.1)$$

donde

$$\Delta x_i = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} dx = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} \quad i = 1, \dots, N \quad (3.2)$$

será en todo el dominio, así $\Delta x_i = \underbrace{\Delta x}_{\text{cte}} \quad i = 1, \dots, N$ Ahora que están definidos los estados de las celdas a un tiempo t , se definen los estados en el tiempo $t + 1$ como

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{1}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F} \left[\mathbf{U} \left(x_{i+\frac{1}{2}}, t \right) \right] dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F} \left[\mathbf{U} \left(x_{i-\frac{1}{2}}, t \right) \right] dt \right) + \\ + \frac{1}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{S} [\mathbf{U}(x, t), x] \quad (3.3) \end{aligned}$$

En realidad, en este esquema se sustituirán las integrales de los flujos físicos por un promedio temporal. De manera que se aproximan y se denotarán como

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^- \approx \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F} \left[\mathbf{U} \left(x_{i+\frac{1}{2}}, t \right) \right] dt \quad (3.4)$$

$$\mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^+ \approx \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F} \left[\mathbf{U} \left(x_{i-\frac{1}{2}}, t \right) \right] dt \quad (3.5)$$

El término fuente, siguiendo la misma idea, será

$$\bar{\mathbf{S}}_i \approx \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{S} [\mathbf{U}(x, t), x] dx dt \quad (3.6)$$

Entonces, el esquema numérico quedaría como

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^- - \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \bar{\mathbf{S}} \quad (3.7)$$

Aunque habitualmente se modifican los flujos numéricos para incluir los términos fuente. Este es el llamado esquema de Godunov, que simplificaremos con los términos incluidos en los flujos como

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}^- - \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) \quad (3.8)$$

donde ya solo queda definir cómo se calcula el incremento temporal Δt^n . Esto se comentará más adelante.

3.2. Esquema de MacCormack

Este algoritmo de diferencias finitas fue desarrollado por Robert W. MacCormack en 1969 [16], y es quizá el algoritmo más simple e intuitivo que se puede aplicar. Aunque al principio fue ampliamente utilizado, en la actualidad ha quedado sustituido por métodos más sofisticados. Aún así, se sigue utilizando con fines didácticos e introductorios.

El esquema numérico que se seguirá será (3.8). MacCormack trabaja en dos pasos: un paso predictor y un segundo paso corrector.

▪ Predictor:

$$\left(\mathbf{U}_i^{t+1} \right)^{\text{pred}} = \mathbf{U}_i^t - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\delta \mathbf{F}^t)^{\text{pred}} \quad (\delta \mathbf{F}^t)^{\text{pred}} = \left(\mathbf{F}_{i+1/2}^t \right)^{\text{pred}} - \left(\mathbf{F}_{i-1/2}^t \right)^{\text{pred}} \quad (3.9)$$

con los flujos numéricos dados por

$$\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^+ \right)^{\text{pred}} = \mathbf{F}_{i+1}^t \left(\mathbf{U}_{i+1}^t \right) + \mathbf{S}_{i+1}^t \left(\mathbf{U}_{i+1}^t, x \right) \quad \left(\mathbf{F}_{i+1/2}^- \right)^{\text{pred}} = \mathbf{F}_i^t \left(\mathbf{U}_i^t \right) \quad (3.10)$$

▪ Corrector: en paso se calcula el estado final.

$$\mathbf{U}_i^{t+1} = \mathbf{U}_i^t - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{(\delta \mathbf{F}^t)^{\text{corr}} + (\delta \mathbf{F}^t)^{\text{pred}}}{2} \right] \quad (3.11)$$

$$(\delta \mathbf{F}^t)^{\text{corr}} = \left(\mathbf{F}_{i+1/2}^t \right)^{\text{corr}} - \left(\mathbf{F}_{i-1/2}^t \right)^{\text{corr}}$$

con los flujos numéricos dados por

$$\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^+ \right)^{\text{corr}} = \mathbf{F}_i^t \left(\left(\mathbf{U}_i^{t+1} \right)^{\text{pred}} \right) \quad (3.12)$$

$$\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^- \right)^{\text{corr}} = \mathbf{F}_{i-1}^t \left(\left(\mathbf{U}_i^{t+1} \right)^{\text{pred}} \right) + \mathbf{S}_{i-1}^t \left(\left(\mathbf{U}_i^{t+1} \right)^{\text{pred}}, x \right) \quad (3.13)$$

Como se utiliza ese flujo promedio en el paso final del método, MacCormack consigue ser un método de segundo orden de una manera muy simple.

3.3. Esquema de Roe

El esquema de Roe es un solucionador aproximado de Riemann desarrollado por Phil Roe en 1981 [5]. El desarrollo del método se explica en detalle en [6]. Se seguirá el esquema numérico de Godunov (3.8).

Para obtener el flujo, el método aproxima localmente el problema por el problema de Riemann lineal. Para ello, se reexpresan las ecuaciones en función de la matriz jacobiana

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \bar{\mathbf{0}} \quad \underbrace{\iff}_{\text{regla cadena}} \quad \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{J} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \bar{\mathbf{0}} \quad (3.14)$$

pero en lugar de usar el jacobiano real \mathbf{J} , se utiliza una matriz aproximada que se supone localmente constante $\tilde{\mathbf{J}} = \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$.

El método de Roe utiliza los vectores propios y los valores propios de la matriz jacobiana para reescribir la ecuación en dicha base. Y sobre esta base se resolverá el problema de Riemann local entre cada par de celdas (en la pared entre celdas). Los autovalores y autovectores los se han hallado antes en 2.16 y 2.17.

Para que estas expresiones resulten constantes (tanto la matriz como los autovalores y autovectores), se aproximan los valores entre nodos por el valor de las variables en la interfase. Y para obtener los valores de v , a y H en la interfase, Roe introduce una media pesada conocida como los promedios de Roe. La obtención de las expresiones de estos promedios es análoga a lo desarrollado en la sección 11.2 de [6].

Entonces, teniendo en cuenta que los subíndices R y L hacen referencia a la celda derecha e izquierda, tenemos:

$$\tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_L A_L} v_L + \sqrt{\rho_R A_R} v_R}{\sqrt{\rho_L A_L} + \sqrt{\rho_R A_R}} \quad (3.15)$$

$$\tilde{H} = \frac{\sqrt{\rho_L} H_L + \sqrt{\rho_R} H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (3.16)$$

$$\tilde{a} = \sqrt{(\gamma - 1) \left(\tilde{H} - \frac{1}{2} \tilde{v}^2 \right)} \quad (3.17)$$

Y con esto se construyen los autovalores $\tilde{\lambda}_i$ y los autovectores $\tilde{\mathbf{e}}_i$ promedio. Con el símbolo $\tilde{}$ se indica que el escalar, vector o matriz está evaluado en los valores de la interfase, calculados con los promedios de Roe.

Ahora, para tener el problema escrito en la base de los vectores propios, es necesario el valor de los coeficientes llamados «wave-strengths» α_i con $i = 1, 2, 3$, de modo que $\delta \mathbf{U} = \sum_{i=1}^3 \tilde{\alpha}_i \tilde{\mathbf{e}}_i$. Por otro lado, también hay que añadir el término fuente al algoritmo, para lo cual se introducen otros coeficientes β_i , que expresan el término fuente también en la misma base de autovectores $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^3 \tilde{\beta}_i \tilde{\mathbf{e}}_i$. Las expresiones de los coeficientes $\tilde{\alpha}_i$ y $\tilde{\beta}_i$ se muestran en el apéndice 5.4. Con todo esto, se definen los flujos como

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^+ = \mathbf{F}_{i+1} - \sum_{m^-} \left[(\tilde{\lambda} \tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) \tilde{\mathbf{e}} \right]_{i+1/2}^m \quad \mathbf{F}_{i+1/2}^- = \mathbf{F}_i + \sum_{m^+} \left[(\tilde{\lambda} \tilde{\alpha} - \tilde{\beta}) \tilde{\mathbf{e}} \right]_{i+1/2}^m \quad (3.18)$$

Uno de los sumatorios recorre los valores de λ , α y β para los valores de λ positivos (denotado por m^+) y el otro sumatorio los negativos (denotado por m^-).

Finalmente, se puede calcular de manera explícita

$$\mathbf{U}_i^{t+1} = \mathbf{U}_i^t - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{i+1/2}^- - \mathbf{F}_{i-1/2}^+ \right) \quad (3.19)$$

donde

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^- - \mathbf{F}_{i-1/2}^+ = \sum_{m^+} \left[\left(\tilde{\lambda} \tilde{\alpha} - \tilde{\beta} \right) \tilde{\mathbf{e}} \right]_{i+1/2}^m + \sum_{m^-} \left[\left(\tilde{\lambda} \tilde{\alpha} - \tilde{\beta} \right) \tilde{\mathbf{e}} \right]_{i-1/2}^m \quad (3.20)$$

Este algoritmo presenta un defecto. Cuando hay una rarefacción transónica el algoritmo confunde este fenómeno con una onda de choque y se crean las llamadas «ondas de rarefacción», que son ondas de choque no físicas. Se muestra el desarrollo de la corrección en el apéndice 5.6

3.4. Esquema HLL(S)

3.4.1. Esquema HLL

El esquema HLL es un método propuesto por Harten, Lax y van Leer [7] con el siguiente solucionador de Riemann

$$\mathbf{U}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{si } \frac{x}{t} \leq S_L \\ \mathbf{U}^{hll} & \text{si } S_L < \frac{x}{t} < S_R \\ \mathbf{U}_R & \text{si } \frac{x}{t} \geq S_R \end{cases} \quad (3.21)$$

La idea está en dividir el problema en tres zonas separadas por las dos ondas más rápidas: S_R y S_L , cuyas expresiones están por concretar.

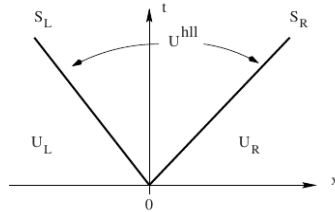


Figura 3.2: Esquema de regiones de estado constante, \mathbf{U}_L , \mathbf{U}^{hll} , \mathbf{U}_R separadas por las velocidades de señal más rápidas S_L y S_R

En estas zonas, como vemos en el esquema de la figura 3.2, el vector \mathbf{U} es uniforme. En la derecha y la izquierda \mathbf{U} está evaluado en las celdas. En el centro, \mathbf{U}^{hll} se extrae de la resolución exacta del problema de Riemann como el promedio de los estados entre la señal más rápida y la más lenta a un tiempo dado [6]. Desarrollando esta idea, se llega a la siguiente expresión para el flujo numérico:

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{hll} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & \text{si } 0 \leq S_L \\ \frac{S_R \mathbf{F}_L - S_L \mathbf{F}_R + S_L S_R (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)}{S_R - S_L} & \text{si } S_L < 0 < S_R \\ \mathbf{F}_R & \text{si } 0 \geq S_R \end{cases}$$

Ahora solamente se necesita conocer el valor de S_R y S_L . Este es uno de los puntos flojos del método, no hay unos valores de estas velocidades establecidos, pudiendo estimarse de varias

formas. Otro defecto del método es considerar que solamente hay dos ondas importantes, suposición que afectará negativamente a la resolución de ondas de contacto, que son ondas que se mueven a la velocidad del fluido y no quedan bien representadas sin la onda característica que se mueve a la velocidad del fluido.

En cuanto a las estimaciones de S_R y S_L , hay muchas opciones. Aquí se utilizarán las siguientes expresiones

$$S_L = \min(v_L - a_L, \tilde{v} - \tilde{a}, v_R - a_R) \quad S_R = \max(v_L + a_L, \tilde{v} + \tilde{a}, v_R + a_R) \quad (3.22)$$

donde \min y \max indican que se escoge el mínimo y el máximo de los tres valores; y \tilde{v} , \tilde{a} son los valores obtenidos con los promedios de Roe (3.15), (3.16), (3.17). Esta elección de los estimadores tiene la ventaja de que evitará violaciones de la entropía, porque será capaz de identificar las rarefacciones transónicas. Es el mismo problema por el cual se introduce la corrección de entropía al método de Roe.

El esquema HLL tal y como se ha expuesto no tiene en cuenta el efecto de los términos fuente. Así que será necesario modificarlo en consecuencia, resultando en lo que se llamará el modelo HLLS (S de «source» en inglés)

3.4.2. Esquema HLLS

HLLS es una modificación del modelo HLL para que se incluya dentro del método el efecto de los términos fuente [13]. La principal diferencia radicará en que ahora el estado intermedio \mathbf{U}^{hll} se verá dividido en dos, estando la división provocada por el término fuente. El desarrollo con los problemas encontrados y las soluciones escogidas se encuentran en el apéndice 5.7

3.5. Esquema HLLC(S)

3.5.1. Esquema HLLC

El esquema HLLC [17] es una modificación del método HLL, donde la C viene de «contacto», dado que este método añade otra onda más al método, que se mueve a la velocidad del fluido y permitirá resolver ondas de contacto. Es decir, además de las dos velocidades más rápidas S_L y S_R , se incluye una velocidad intermedia S_* , como se muestra en la figura 3.3

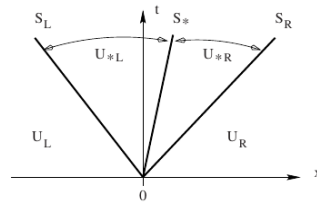


Figura 3.3: Esquema de las tres velocidades de señal y las cuatro zonas de estados constantes.

El HLL estimaba un estado intermedio, \mathbf{U}^{hll} , que estaba delimitado por S_L y S_R . Siguiendo con esta idea, HLLC divide este estado intermedio en dos, separados por S_* . Estos estados se

denotarán por \mathbf{U}_{*L} y \mathbf{U}_{*R} definidos de forma análoga a como se definía \mathbf{U}^{hll} (como el promedio de los estados entre S_L y S_* o S_* y S_R). De esta manera, el esquema de estados queda

$$\mathbf{U} = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{si } \frac{x}{t} \leq S_L \\ \mathbf{U}_{*L} & \text{si } S_L < \frac{x}{t} \leq S_* \\ \mathbf{U}_{*R} & \text{si } S_* < \frac{x}{t} < S_R \\ \mathbf{U}_R & \text{si } \frac{x}{t} \geq S_R \end{cases} \quad (3.23)$$

Por lo tanto, se busca un esquema de flujos de la forma

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{hllc} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & S_L \geq 0 \\ \mathbf{F}_{*L} & S_L \leq 0 \leq S_* \\ \mathbf{F}_{*R} & S_* \leq 0 \leq S_R \\ \mathbf{F}_R & S_R \leq 0 \end{cases} \quad (3.24)$$

Para construir los flujos \mathbf{F}_{*L} y \mathbf{F}_{*R} se imponen algunas suposiciones que se deben cumplir para la solución exacta del problema de Riemann (el desarrollo se encuentra en [6]) y finalmente se llega a las siguientes expresiones:

$$S_* = \frac{p_R - p_L + \rho_L v_L (S_L - v_L) - \rho_R v_R (S_R - v_R)}{\rho_L (S_L - v_L) - \rho_R (S_R - v_R)} \quad (3.25)$$

$$\mathbf{U}_{*K} = A_K \rho_K \frac{S_K - v_K}{S_K - S_*} \begin{pmatrix} 1 \\ S_* \\ \frac{E_K}{\rho_K} + (S_* - v_K) \left(S_* + \frac{p_K}{\rho_K (S_K - v_K)} \right) \end{pmatrix} \quad K = L, R \quad (3.26)$$

$$\mathbf{F}_{*K} = \mathbf{F}_K + S_K (\mathbf{U}_{*K} - \mathbf{U}_K) \quad (3.27)$$

Las expresiones anteriores han sido obtenidas para este problema en concreto. Resultan prácticamente idénticas a las del caso sin términos fuente desarrollado en el libro de Toro [6], a excepción de \mathbf{U}_{*K} que tiene el factor del área multiplicando. Las expresiones (3.25), (3.26) y (3.27) dependen también de los valores de S_L y S_R . Estos valores seguirán las mismas expresiones que en HLL (3.22).

3.5.2. Esquema HLLCS

Análogamente a HLLS, queremos introducir los términos fuente en los flujos numéricos del algoritmo. Para esto se realiza algo parecido a HLLS, con la complicación que trae la mayor complejidad de HLLC. La idea vuelve a estar en dividir los dos estados intermedios de HLLC separados por S_* . Cada uno de ellos se dividirá en dos estados más, que estarán influenciados por el término fuente. El desarrollo completo está en el apéndice 5.8

4. Resultados numéricos

En este apartado se contrastarán los resultados obtenidos numéricamente con las soluciones exactas y se compararan los resultados y se comparará la precisión de cada método. Para el

problema de la tobera no se utilizará HLLC porque no se apreciaban diferencias respecto a Roe y no es tan relevante la onda de contacto como en el problema de Riemann.

4.1. Discretización del problema y condiciones de contorno

Aquí resta ver cómo se define el tamaño del paso temporal. Hay dos tipos de esquemas para el paso temporal: los explícitos o los implícitos. Los explícitos son los que permiten calcular \mathbf{U}_i^{t+1} en función de solamente $\dots \mathbf{U}_{i-1}^t, \mathbf{U}_i^t, \mathbf{U}_{i+1}^t, \dots$. Estos métodos tienen la ventaja de ser más sencillos de obtener e implementar. En cuanto a los métodos implícitos, serán los que permiten obtener los valores de \mathbf{U}_i^{t+1} como solución a un sistema de ecuaciones formado por $\dots \mathbf{U}_{i-1}^{t+1}, \mathbf{U}_i^{t+1}, \mathbf{U}_{i+1}^{t+1}, \dots$ y $\dots \mathbf{U}_{i-1}^t, \mathbf{U}_i^t, \mathbf{U}_{i+1}^t, \dots$. Estos métodos serán bastante más complejos de obtener e implementar, pero permiten pasos de tiempo más grandes porque son más estables numéricamente. Aquí se optará por los explícitos porque utilizar métodos implícitos no aporta suficientes ventajas para compensar la complejidad que añaden, sobre todo para ecuaciones no lineales. Por tanto, será importante tener un criterio para controlar la estabilidad numérica; este será el criterio del CFL [8] que se expondrá ahora.

Para los distintos problemas que se van a resolver numéricamente, se han establecido como parámetros comunes a todas las simulaciones

$$CFL = 0,95 \quad L = 2 \text{ (m)}$$

donde CFL es el número de Courant-Friedrichs-Lewy, o número de Courant, y L es la longitud del conducto. El CFL número marca el límite superior del tamaño de paso de tiempo que se puede utilizar en cada avance temporal del algoritmo. Este criterio se extrae de un análisis de convergencia numérica aplicable a problemas con sistemas de ecuaciones hiperbólicas para garantizar soluciones estables (desarrollado en p.153 de [9]); de manera que, en cada punto de nuestra discretización, el máximo paso de tiempo posible es cuando el número CFL es igual a la unidad. La condición explícita depende también del tamaño espacial de la discretización y de la velocidad local del flujo en el punto que se comprueba la condición (por lo tanto es una condición local)

$$CFL = \frac{\Delta t}{\Delta x} \lambda_{\text{máx}} \implies \Delta t_{\text{máx}} = \underbrace{(CFL)}_{0,95} \frac{\Delta x}{\lambda_{\text{máx}}}$$

Hay varias elecciones posibles al avanzar cada paso de tiempo: por un lado, es posible avanzar en cada punto con un tiempo local, esto será más rápido pero es dudoso su significado físico (se tendría a cada punto de la discretización avanzando en el tiempo a velocidades diferentes). Así que, siendo más conservadores, se elegirá aplicar la restricción marcada por el criterio CFL más restrictiva de todo el mallado. Para ello, en cada paso se calcularán todos los CFL locales y se escogerá el mínimo; esto será más lento, pero se mantiene la congruencia física y todos los puntos están siempre en el mismo nivel temporal. Nótese que se escoge 0,95 en lugar de 1 para dejar algo de margen respecto al límite $CFL = 1$; que la teoría solo establece para problemas lineales sin términos fuente.

Aunque no se ha comentado, la discretización temporal será equiespaciada, por lo que Δx será el mismo para cada celda. El número de puntos en que se discretiza cada simulación dependerá del Δx de ese caso en particular y se «adapta» para que $L = 2$ m sea constante; es decir

$$N_{\text{nodos}} = \frac{L}{\Delta x} + 1$$

El +1 se añade porque siempre habrá una más que el número de celdas.

Condiciones de contorno. Este es uno de los puntos más relevantes de las simulaciones y que afectará de manera importante a las soluciones. Se distinguen dos tipos de condiciones de entrada y de salida: entrada/salida forzada o entrada/salida libre. Al imponer las condiciones de contorno, será importante el signo de las velocidades de onda características $\lambda_1 = v - a$, $\lambda_2 = v$, $\lambda_3 = v + a$, ya que, dependiendo de cuantas viajen a derecha o izquierda, la información deberá venir de un lado u otro del flujo. Se supondrá por lo general que $v > 0$ y el flujo avanza hacia la derecha (sentido positivo del eje \hat{x}).

En cuanto a la **entrada**, si es forzada, se deben imponer *dos o tres* condiciones, dependiendo de la velocidad del fluido a la entrada. Si $M > 1$, el flujo será supersónico, y toda la información de las tres componentes del vector de estados \mathbf{U} entrará desde fuera del dominio, puesto que las tres ondas características que transportan la información serán positivas¹, como se veía en la figura 2.1. Si $M < 1$, solamente *se impondrán dos* de los tres valores U_1, U_2, U_3 , ya que dos ondas características entrarán en el dominio y la tercera saldrá «aguas arriba». El caso de entrada libre simplemente funcionará como una salida; toda la información saldrá desde dentro del flujo. Esto último servirá solo en casos en que no se quiera que nada externo afecte al desarrollo del problema.

Sobre la **salida**, si es forzada, se dejarán fluctuar libremente *dos componentes* y la tercera estará atada a una condición fija; con esto se fuerza que $M < 1$ en la salida (una de las características es forzada a entrar). Si es libre, *las tres componentes fluctuarán* libremente y toda la información provendrá del flujo; tendremos salida supersónica $M > 1$.

En cada problema se indicará la elección entre las diferentes opciones de condiciones de entrada y salida.

4.2. Flujo en una tobera

Ahora se estudiarán los resultados numéricos del problema ya discutido de flujo en una tobera convergente-divergente. En todos los casos la forma del área de nuestra tobera vendrá dada por la forma funcional (2.24) y los valores

$$A_{\text{mín}} = 2 \text{ m}^2 \quad A_{\text{máx}} = 4,0702 \text{ m}^2$$

Esta función refleja una tobera con la forma que se muestra en la figura 4.1.

En cuanto a la discretización espacial, se fija $\Delta x = 0,01 \text{ m}$ y por tanto habrá 201 nodos para preservar $L = 2 \text{ m}$

4.2.1. Entrada subsónica y salida supersónica

En este primer caso, las condiciones en la entrada son de entrada forzada subsónica. Concretamente se fija el valor de U_2 y se fuerza a U_3 a satisfacer la relación (que viene de sustituir

¹Que son los tres autovalores que se extraían de la matriz jacobiana: $\lambda_1 = v - a$, $\lambda_2 = v$ y $\lambda_3 = v + a$

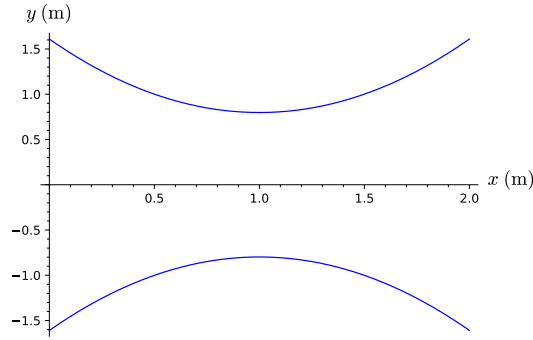


Figura 4.1: Forma de la sección longitudinal de la tobera. Los dos ejes están expresados en metros.

(2.12) en $U_3 = AE$)

$$U_3 = A \left(\frac{p}{\gamma - 1} + \frac{\rho v^2}{2} \right) \quad (4.1)$$

en la que todas las variables están evaluadas en la entrada. El valor de U_1 se estima linealmente desde el interior del dominio. Las condiciones a la salida son de salida libre, para permitir flujo supersónico a la salida. Por tanto, se estiman linealmente todas las condiciones a la salida. Las condiciones iniales se muestran en el apéndice 5.2.1.

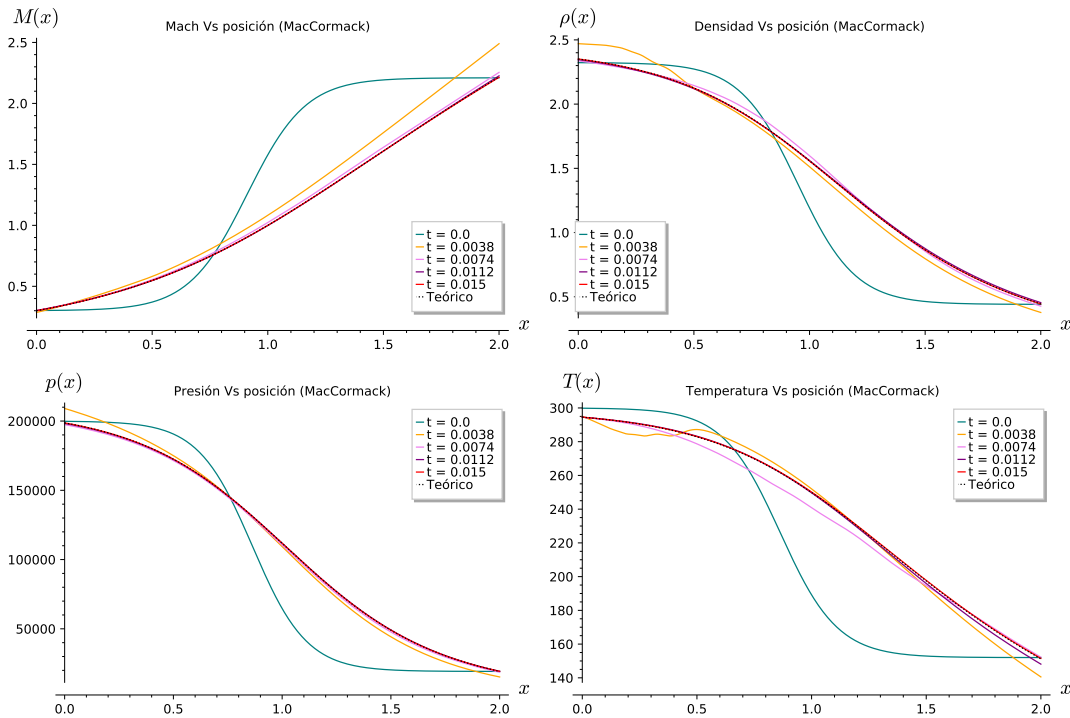


Figura 4.2: Solución para el número de Mach, la densidad, presión y temperatura a lo largo de la tobera en varios instantes de tiempo.

El resultado de una simulación de este problema con el método de MacCormack se muestra en la figura 4.2, obteniéndose un resultado similar con el resto de algoritmos. De manera gráfica es difícil comparar la precisión de los algoritmos (MacCormack, Roe y HLLS), así que se extraerán

datos numéricos de la solución estacionaria obtenida con cada método y se contrastarán. Como criterio de comparación se utilizará el error cometido frente a la solución exacta. Se utilizará la norma 1 y la norma ∞ :

$$\|\epsilon^n\|_1 = \sum_{i=1}^N |\epsilon_i^n| \Delta x \quad (4.2)$$

$$\|\epsilon^n\|_\infty = \max_{i=1,\dots,N} |\epsilon_i^n| \quad (4.3)$$

donde $\epsilon_i^n = |(U_2)_i - (U_2^{\text{exacto}})_i|$ es el error en cada nodo i , y N es el número de nodos.

En este caso, se muestran los resultados obtenidos en la tabla 4.1. Estos errores totales se han extraído comparando los valores de U_2 del programa con los exactos, y en la figura 4.3 se muestra la comparación gráfica entre los algoritmos. Podemos ver que, los mayores errores de HLLS se deben al «pico» que aparece en el cuello de la tobera.

	MacCormack	Roe	HLLS
$\ \epsilon^n\ _1$	0.05242	0.02654	0.10749
$\ \epsilon^n\ _\infty$	0.11252	0.01320	0.05360

Tabla 4.1: Errores obtenidos con cada algoritmo para un tamaño de mallado $\Delta x = 0,01$ y un tiempo de simulación $t = 1$ s

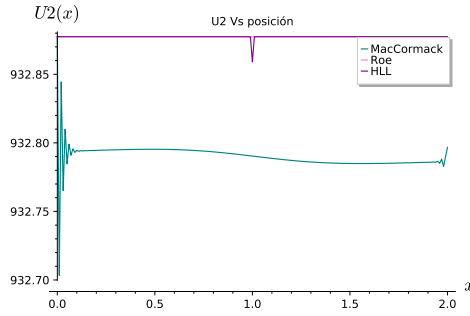


Figura 4.3: Comparación de U_2 obtenido en el estacionario para $t = 1$ s por cada algoritmo.

4.2.2. Flujo subsónico en toda la tobera

Para el caso en el que el flujo permanece subsónico en toda la tobera se tienen que cambiar las condiciones de contorno. La condición de entrada puede permanecer tal y como se había comentado antes para entrada subsónica y salida supersónica. Sin embargo, para la condición de salida se requiere $M < 1$, así que se fijará la presión a la salida y se fuerza a U_3 a satisfacer

$$U_3 = A \left(\frac{p_{out}}{\gamma - 1} + \frac{\rho v^2}{2} \right) \quad p_{out} = 199000 \text{ Pa} \quad (4.4)$$

mientras que U_1 y U_2 fluctúan libremente. Las condiciones iniciales se muestran en 5.2.2

En la figura 4.4 se muestran las soluciones calculadas con el método HLLS. Además, en la figura 4.5 se muestra una de las variables solucionadas con MacCormack para mostrar el «ruido» en la fase transitoria.

Observando las soluciones se pueden señalar un par de detalles. Lo primero es que MacCormack añade una serie de oscilaciones durante todo el transitorio. Esto no se podía ver en el caso subsónico-supersónico porque estas oscilaciones podían abandonar el dominio del flujo por la salida libre; aquí se ven forzadas a rebotar de un lado a otro con las condiciones de contorno forzadas e ir disipándose poco a poco. Precisamente uno de los problemas de MacCormack es que tiene poca disipación numérica², y esto resulta en esas oscilaciones numéricas que no siempre se consiguen eliminar.

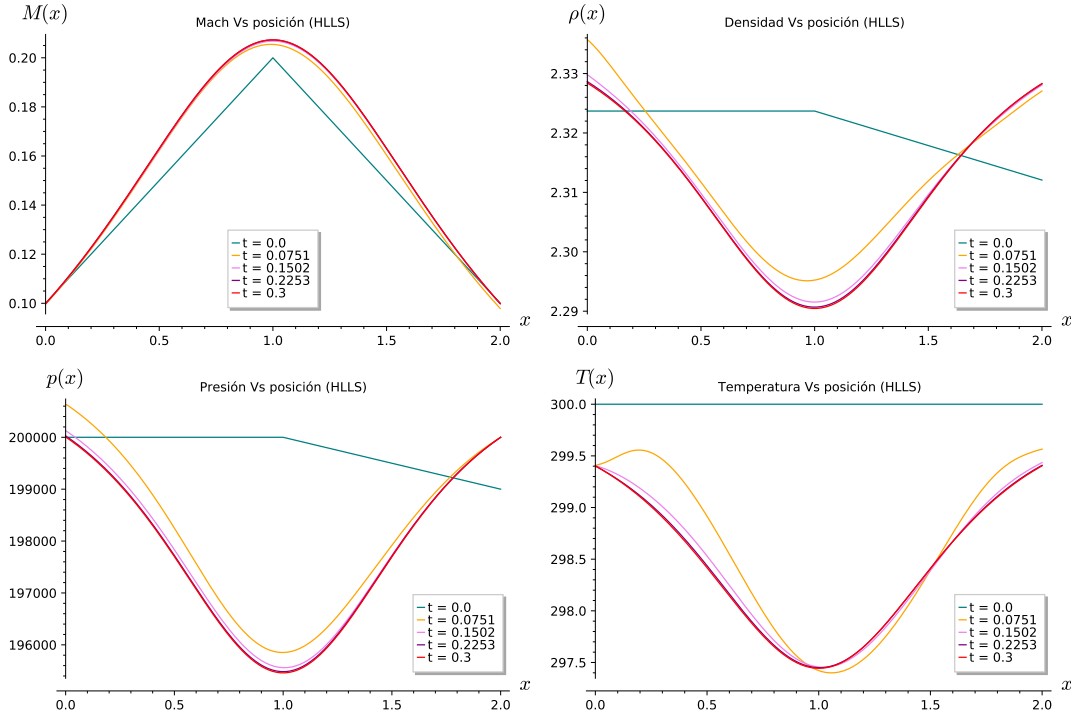


Figura 4.4: Soluciones en régimen estacionario (en rojo) calculadas con HLLS. Se muestran varios instantes de tiempo con la evolución de la solución.

4.2.3. Flujo subsónico con $M = 1$ en el cuello

Este caso es quizá el estado estacionario más inestable que se puede encontrar con flujos en toberas. La idea es que empiece de forma similar al caso subsónico-supersónico, alcance $M = 1$ en la garganta, y después desacelere a causa de las condiciones a la salida. Como es justo el caso límite entre flujo subsónico y supersónico y algunos algoritmos pueden sufrir pequeños defectos en el punto sónico es un estado especialmente vulnerable a pequeñas desviaciones numéricas.

Las condiciones de contorno serán del mismo tipo que en el caso de tener todo el flujo subsónico, solamente se cambia el valor de la presión a la salida, que ahora será $p_{out} = 130000$ Pa. En cuanto a las condiciones iniciales se muestran en el apéndice 5.2.3.

En la figura 4.6 se muestran algunas variables en el estacionario calculadas con el método de Roe. En este caso, el método de MacCormack resulta inestable y HLLS funciona si se introduce la corrección para la entropía.

²Todos los algoritmos presentan disipación numérica, algo que suaviza ligeramente las soluciones pero mejora la estabilidad de las soluciones.

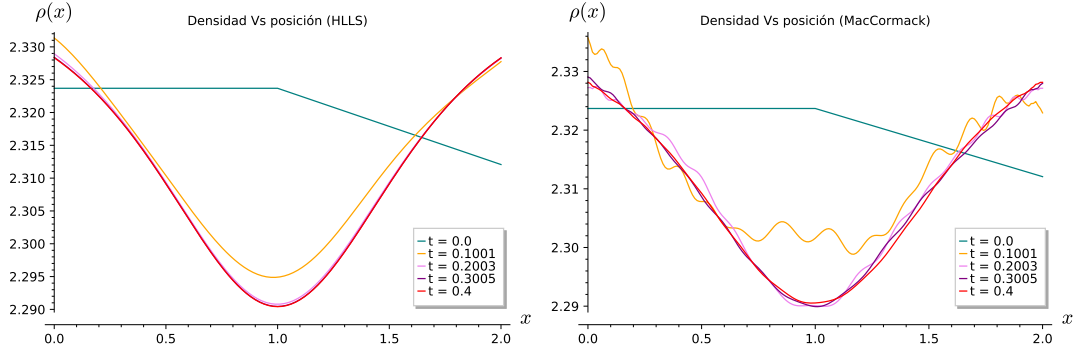


Figura 4.5: Comparación de la evolución de la densidad hasta el estacionario entre el método HLLS y el de MacCormack. Como vemos en MacCormack aparecen esas oscilaciones numéricas que desaparecen lentamente, pero enmascaran las soluciones transitorias correctas. El estado estacionario se alcanza correctamente.

Ahora se comparan los errores de cada algoritmo. Para ello se utiliza de nuevo la norma 1 y norma ∞ . En la tabla 4.2 se ven varias cosas. Tanto Roe como HLLS sufren un pequeño defecto en el punto sónico, pero presentan un error casi idéntico. MacCormack presenta un error muy alto, que además va creciendo con el tiempo de simulación hasta arrojar resultados sin sentido. Esto se debe a que MacCormack no tiene ningún tipo de corrección para el problema de la entropía, y además no tiene suficiente disipación numérica para eliminar esas oscilaciones que forma y se van acumulando.

	MacCormack	Roe	HLLS
$\ \epsilon^n\ _1$	28.71862	0.03016	0.03017
$\ \epsilon^n\ _\infty$	188.01889	0.01501	0.01503

Tabla 4.2: Comparación de los errores con la norma L_1 y L_∞ para los cuatro métodos. El tiempo simulado es $t = 1$ s

4.3. Tubo de Sod

En este apartado se resolverá el problema del tubo de Sod para ver el desempeño de los algoritmos en un problema transitorio de solución conocida. Como en este problema el área ya no varía, se tiene que $A = 2 \text{ m}^2$ y $\frac{dA}{dx} = 0$; por lo tanto, desaparece el término fuente y los algoritmos serán equivalentes a sus versiones típicas. En cuanto al resto de parámetros: se fija $\Delta x = 0,001 \text{ m}$, $L = 2 \text{ m}$ se mantiene y entonces el número de nodos es $N = 2001$. Las condiciones de frontera son de entrada y salida libres, toda la información sale del problema por ambos extremos. Y las condiciones iniciales son

$$\begin{pmatrix} \rho_L \\ p_L \\ v_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,32369 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\ 200000 \text{ Pa} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \rho_R \\ p_R \\ v_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,29046 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\ 20000 \text{ Pa} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

La densidad se ha calculado a partir de la condición de $T = 300 \text{ K}$ en la entrada ($\rho = \frac{P}{RT}$).

Como se puede ver en la figura 4.7, todos los algoritmos proporcionan soluciones casi idénticas, a excepción de MacCormack en las zonas donde crea las oscilaciones. Aun así, MacCormack

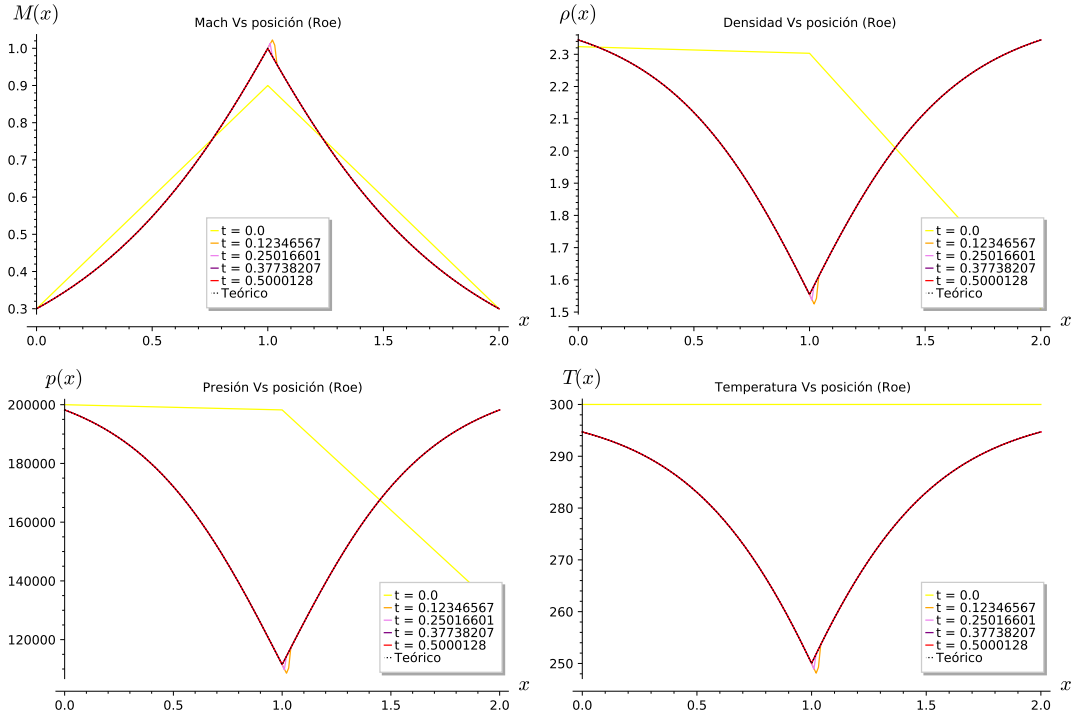


Figura 4.6: Soluciones en régimen estacionario (en rojo) calculadas con Roe. Se muestran varios instantes de tiempo con la evolución de la solución.

parece ser el que mejor se ajusta en la onda expansiva (primera bajada) y el que más acentuada hace la pendiente de la discontinuidad de la onda de contacto (es un método de segundo orden); pero no sirve de mucho porque después añade las oscilaciones que inutilizan la solución. Por otro lado, tanto HLL como HLLC funcionan correctamente.

	MacCormack	Roe	HLLS	HLLCS
$\ \epsilon^n\ _1$	1.59505	1.27322	5.32575	1.37511
$\ \epsilon^n\ _\infty$	173.71227	149.57956	115.18002	138.29375

Tabla 4.3: Comparación de los errores con la norma L_1 y L_∞ para los cuatro métodos. El tiempo simulado es $t = 1,5$ ms, y el tamaño de mallado es de $\Delta x = 0,0001$ m

En la tabla 4.3 se han mostrado los resultados. A partir de esos números podemos comentar algunas cosas que no se perciben en las gráficas. Lo primero es que MacCormack, a pesar de las oscilaciones ficticias que introduce, obtiene un error pequeño con la norma 1. Esto parece que se debe a que al ser un algoritmo de segundo orden se ajusta bastante bien a los perfiles con pendientes fuertes; pero esto mismo hace que el error máximo también sea el mayor. Cuanto más «afilada» mantiene la discontinuidad mayor será el error máximo con la solución exacta, esto se ilustra en la figura 4.8. Es importante que es el error máximo, el error total sí que disminuye.

En cuanto al resto de algoritmos, se ve un comportamiento similar: cuanto más se ajusta a las discontinuidades mantiene $\|\epsilon^n\|_1$ pequeño pero $\|\epsilon^n\|_\infty$ es más grande. Tanto Roe como HLLC funcionan muy bien y ajustan bastante el perfil, Roe un poco mejor que HLLC. Fijándose en HLL, vemos que el error es bastante más grande (unas cuatro veces más grande que los de HLLC y Roe). Aquí es donde se pone de manifiesto que HLL es un método que solo considera dos de las tres ondas características del problema, por lo que suaviza bastante la onda de contacto,

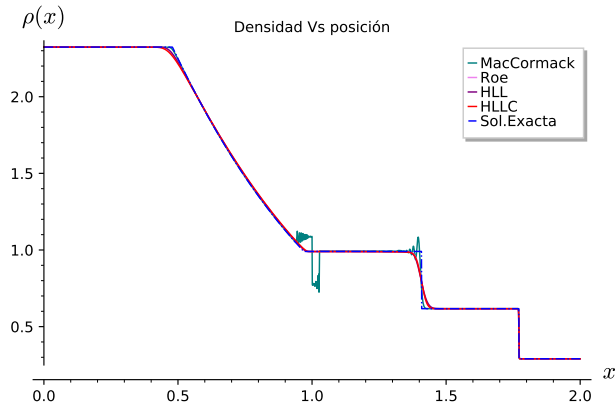


Figura 4.7: Solución transitoria del problema de Sod a $t = 0,0015$ s. Se muestran los cuatro algoritmos implementados y la solución del método exacto.

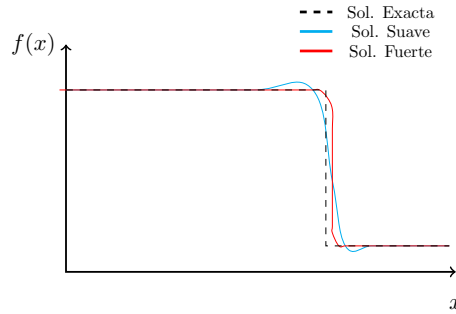


Figura 4.8: Esquema de una función discontinua $f(x)$. Se muestran lo que sería la solución exacta, una solución aproximada que mantiene la forma de la discontinuidad y otra solución aproximada que suaviza el salto.

aumentando el error.

4.4. Orden de convergencia

En este apartado se estudiará el orden de convergencia de los algoritmos. Como no es necesario obtener el orden de convergencia para todos los problemas, se estimará solamente en el problema del tubo de Sod.

El orden de convergencia es un parámetro que depende del comportamiento del error de la solución, definida como la diferencia entre el valor numérico y el exacto

$$\epsilon = f(h) - f_{\text{exacto}} = Ch^p + HOT \quad (4.6)$$

donde ϵ es el error, C una constante, $h \equiv \Delta x$ es el espaciado de la malla, p es el orden de convergencia y HOT es «high order terms», términos de mayor orden que no se considerarán. Aplicando logaritmos a ambos lados:

$$\ln \epsilon \simeq \ln C + p \ln h \quad (4.7)$$

Por tanto, si se representa el logaritmo del error frente el logaritmo del espaciado de malla para varios pares ϵ, h , se obtiene el orden de convergencia como la pendiente de la recta. Otra forma es simplemente utilizar dos mallados 1 y 2, siendo el 1 el más fino, y

$$p = \frac{\ln\left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right)}{\ln\left(\frac{h_2}{h_1}\right)} \quad (4.8)$$

En general, aquí se optará siempre por $\frac{h_{i+1}}{h_i} = 2$.

Volviendo al problema de Sod, se estimará el orden de convergencia de las dos formas vistas: (4.7) y (4.8). Sobre la primera, se realizarán simulaciones con distintos tamaños de mallado y se ajustarán los datos a la recta dada por (4.7). Los tamaños de mallado se muestran en la tabla 4.4 y los resultados de los ajustes en la figura 5.1 en el apéndice 5.3 y en la tabla 4.4.

En cuanto a la segunda forma de obtener p , el procedimiento a seguir será ir simulando pares de mallas tal que $\frac{h_{i+1}}{h_i} = 2$. Cada vez que se obtenga un nuevo valor de p según (4.8) se comparará con el anterior, y solamente se parará cuando la diferencia sea menor que una tolerancia dada

$$p_{i+1} - p_i < \text{tolerancia}$$

Este segundo método es bastante más fiable, puesto que en la expresión (4.7) es *aproximadamente* una recta. Los términos de mayor orden que se despreciaban revelan un comportamiento asintótico para el orden de convergencia, así que es más fiable estimarlo con (4.8). Se ha optado por utilizar los dos para tener dos puntos de vista del mismo resultado.

Δx (m)	10^{-4}	$2 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-4}$
t_{simulado} (ms)	0,5			

Tabla 4.4: Parámetros utilizados para las simulaciones para la expresión (4.7). Los parámetros no indicados aquí son exactamente los utilizados en el problema de Sod en la sección 4.3.

	MacComarck	Roe	HLLS	HLLCS
p	$-0,97 \pm 0,06$	$-0,97 \pm 0,08$	$-0,96 \pm 0,10$	$-0,95 \pm 0,11$

Tabla 4.5: Resultados obtenidos de los ajustes lineales a (4.7). Las incertidumbres se muestran con un intervalo del 95 % de confianza.

	MacCormack	Roe	HLLS	HLLCS
p	-0.987	-0.986	-0.982	-0.979

Tabla 4.6: Orden de convergencia obtenido para los cuatro métodos con una tolerancia $\epsilon = 0,0001$.

En cuanto a los resultados del método iterativo, se pueden ver en la tabla 4.6. Vemos que son muy próximos a la unidad, que es el orden de convergencia que esperaríamos.

5. Conclusiones

A lo largo de este trabajo se han visto varios algoritmos que nos sirven para resolver el comportamiento de flujos. Estos algoritmos se basan en los mismos esquemas fundamentales: el de volúmenes finitos y el esquema numérico de Godunov; ambos ampliamente utilizados en Mecánica de Fluidos Computacional. No hay ningún algoritmo que podamos considerar claramente mejor que los demás, puesto que cada uno tiene su utilidad en problemas diferentes. Aunque sí que se podría decir que, específicamente para este tipo de flujos y estos problemas, el que mejor se comporta es el método de Roe y, casi con resultados idénticos, HLLC. MacCormack es el único que no podemos considerar útil en un escenario de investigación, al menos sin correcciones adicionales. Presenta muy poca disipación numérica y no responde bien cuando fijan condiciones de contorno en toda la frontera, aunque como primer acercamiento a la Mecánica de Fluidos Computacional es quizá el más intuitivo y más sencillo. En cuanto HLL, a pesar de no funcionar del todo bien con ondas de contacto, es un algoritmo ideado con ingenio y consigue ser bastante preciso al mismo tiempo que mantiene un esquema muy sencillo.

Durante la realización del trabajo se ha visto que la simulación numérica de fluidos es un tema que puede cobrar bastante complejidad si se intenta modelizar cualquier escenario siendo fiel al problema físico real. Pero no cabe duda de que la Mecánica de Fluidos Computacional es una herramienta fundamental en la investigación que brinda una comprensión mucho más profunda del comportamiento real de los fluidos y que puede ser muy útil para resolver situaciones complejas que no se pueden tratar analíticamente o experimentalmente. Por supuesto, también surgen muchos resultados que no tienen significado físico y son, simplemente, erróneos. Un ejemplo claro son las ondas de choque de rarefacción, que no se corresponden con la fenomenología física. Por tanto, si bien son una herramienta muy útil, siempre tiene que estar de acuerdo con la teoría y deben estar acompañadas por exhaustivos experimentos reales.

Apéndices

5.1. Código

El programa está realizado en C++ y se compone de cuatro archivos principales: «main.cpp», «methods.cpp», «methods.h», «constants.h». En total cuenta con poco más de 1300 líneas de código.

El programa se encuentra en: <https://github.com/MiguelCaAr/NozzleFlow>

5.2. Condiciones iniciales

5.2.1. Entrada subsónica y salida supersónica

Para poner unas condiciones iniciales suaves se utilizan las funciones

$$P(x) = P_{out} + \frac{P_{in} - P_{out}}{1 + \frac{\exp(8x)}{1000}} \quad \begin{array}{l} P_{in} = 200000 \text{ Pa} \\ P_{out} = 19220 \text{ Pa} \end{array}$$

$$T(x) = T_{out} + \frac{T_{in} - T_{out}}{1 + \frac{\exp(8x)}{1000}} \quad \begin{array}{l} T_{in} = 300 \text{ K} \\ T_{out} = 152 \text{ K} \end{array}$$

$$v(x) = v_{out} + \frac{v_{in} - v_{out}}{1 + \frac{\exp(8x)}{1000}} \quad \begin{array}{l} v_{in} = 0,3\sqrt{\gamma RT_{in}} \frac{\text{m}}{\text{s}} \\ v_{out} = 2,21\sqrt{\gamma RT_{out}} \frac{\text{m}}{\text{s}} \end{array}$$

que conectan en ambos extremos del problema con las condiciones de frontera.

5.2.2. Flujo subsónico en toda la tobera

Esta vez se eligen unas condiciones iniciales más simples

$$p(x) = \begin{cases} 200000 \text{ Pa} & \text{si } x \leq 1 \text{ m} \\ 199000 \text{ Pa} & \text{si } x > 1 \text{ m} \end{cases}$$

$$T(x) = 300 \text{ K } \forall x$$

$$v(x) = \begin{cases} (1+x) 0,1\sqrt{\gamma RT} \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{si } x \leq 1 \text{ m} \\ [2 - (x-1)] 0,1\sqrt{\gamma RT} \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{si } x > 1 \text{ m} \end{cases}$$

5.2.3. Flujo subsónico con $M = 1$ en la garganta

Esta vez se inicializa con una función recta a trozos.

$$p(x) = \begin{cases} 200000 - (200000 - 187872)x \text{ Pa} & \text{si } x \leq 1 \text{ m} \\ 187872 + (130000 - 187872)x \text{ Pa} & \text{si } x > 1 \text{ m} \end{cases}$$

$$T(x) = 300 \text{ K } \forall x$$

$$v(x) = \begin{cases} (1 + 2,3x) 0,3\sqrt{\gamma RT} \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{si } x \leq 1 \text{ m} \\ [3,3 - 2,3(x-1)] 0,3\sqrt{\gamma RT} \frac{\text{m}}{\text{s}} & \text{si } x > 1 \text{ m} \end{cases}$$

5.3. Figuras

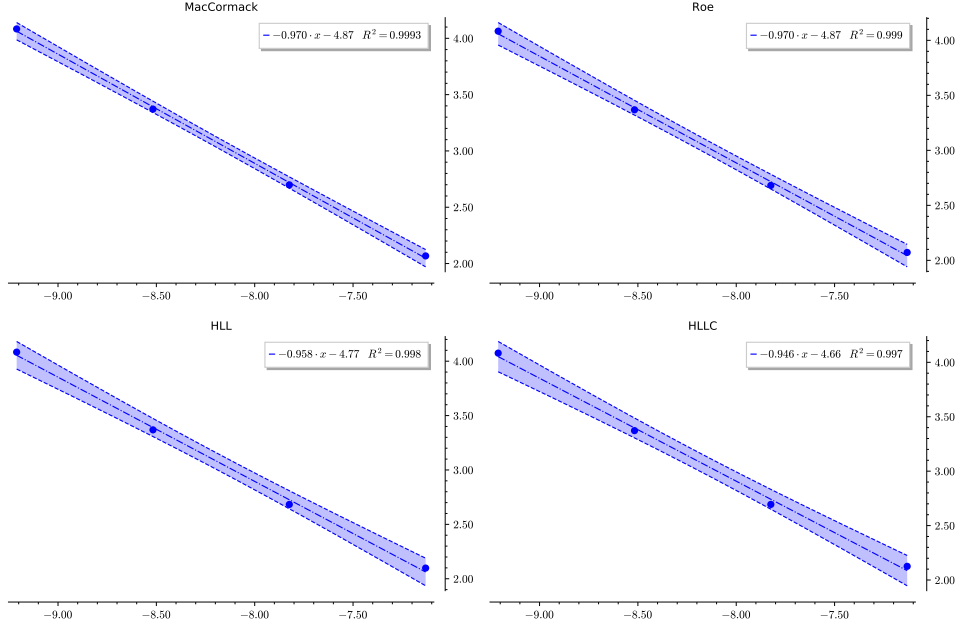


Figura 5.1: Se muestran los ajustes a la ecuación (4.7) obtenidos. El área azul es la región de incertidumbre, con un intervalo de confianza del 95 %.

5.4. Coeficientes método de Roe

Para tener el problema escrito en la base de los vectores propios, es necesario el valor de los coeficientes llamados «wave-strenghts» α_i con $i = 1, 2, 3$

$$\delta \mathbf{U} = \sum_{i=1}^3 \tilde{\alpha}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \quad (5.1)$$

Si se sustituye y se despejan los tres coeficientes, queda

$$\tilde{\alpha}_1 = \frac{1}{\tilde{a} (2\tilde{H} - \tilde{v}^2)} \left[\left(\tilde{H}\tilde{v} + \frac{\tilde{a}\tilde{v}^2}{2} - \frac{\tilde{v}^3}{2} \right) \delta U_1 + \left(\frac{\tilde{v}^2}{2} - \tilde{H} - \tilde{a}\tilde{v} \right) \delta U_2 + \tilde{a}\delta U_3 \right] \quad (5.2)$$

$$\tilde{\alpha}_2 = \frac{2}{2\tilde{H} - \tilde{v}^2} \left[\left(\tilde{H} - \tilde{v}^2 \right) \delta U_1 + \tilde{v}\delta U_2 - \tilde{a}\delta U_3 \right] \quad (5.3)$$

$$\tilde{\alpha}_3 = \frac{1}{\tilde{a} (2\tilde{H} - \tilde{v}^2)} \left[\left(\frac{\tilde{v}^3}{2} + \frac{\tilde{a}\tilde{v}^2}{2} - \tilde{H}\tilde{v} \right) \delta U_1 + \left(\tilde{H} - \frac{\tilde{v}^2}{2} - \tilde{a}\tilde{v} \right) \delta U_2 + \tilde{a}\delta U_3 \right] \quad (5.4)$$

Por otro lado, hay que añadir el término fuente al algoritmo, para lo cual se introducen otros coeficientes β_i , que expresan el término fuente también en la misma base de autovectores

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^3 \tilde{\beta}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \quad (5.5)$$

Análogamente a lo realizado arriba, se despejan los tres coeficientes en función del resto de términos, quedando

$$\tilde{\beta}_1 = -\frac{\tilde{p}\delta A}{\tilde{a}} \left(\frac{\tilde{H} + \tilde{v}\tilde{a} - \frac{\tilde{v}^2}{2}}{2\tilde{H} - \tilde{v}^2} \right) \quad (5.6)$$

$$\tilde{\beta}_2 = \frac{\tilde{p}\delta A}{\tilde{a}} \left(\frac{2\tilde{v}\tilde{a}}{2\tilde{H} - \tilde{v}^2} \right) \quad (5.7)$$

$$\tilde{\beta}_3 = \frac{\tilde{p}\delta A}{\tilde{a}} \left(\frac{\tilde{H} - \tilde{v}\tilde{a} - \frac{\tilde{v}^2}{2}}{2\tilde{H} - \tilde{v}^2} \right) \quad (5.8)$$

5.5. Ecuaciones cuasi-unidimensionales de un flujo compresible no viscoso por un conducto de área variable

Para obtener nuestras ecuaciones en forma diferencial, primero comenzaremos desarrollando el problema desde la formulación integral y trabajando con el volumen de control mostrado en la figura 5.2.

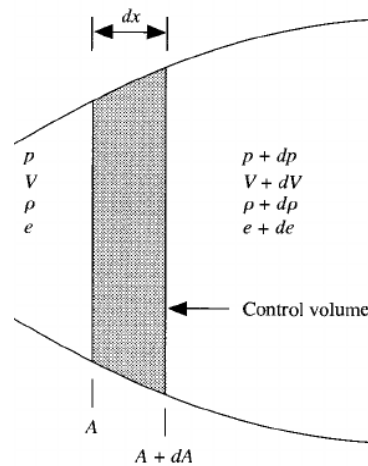


Figura 5.2: Esquema del problema y el volumen de control utilizado.

5.5.1. Ecuación de continuidad

Empezamos con la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V p dV + \iint_S \rho \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (5.9)$$

El término de superficie será, despreciando diferenciales de segundo orden o superiores

$$\iint_S \rho \vec{v} \cdot d\vec{S} = -\rho v A + (\rho + d\rho)(v + dv)(A + dA) =$$

$$= \rho V dA + \rho A dV + AV d\rho = d(\rho AV)$$

Entonces, (5.9) queda

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho A dx) + d(\rho Av) = 0$$

que, dividido por dx es

$$\boxed{\frac{\partial(\rho A)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho Av)}{\partial x} = 0}$$

5.5.2. Ecuación de conservación del momento lineal

Partimos de la ecuación del momento en forma integral, donde solo tenemos en cuenta las fuerzas de superficie como fuerzas externas, ya que no hay viscosidad y suponemos el efecto de la gravedad despreciable.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho v dV + \iint_S (\rho v \vec{v}) \cdot d\vec{S} = - \iint_S (pdS)_x \quad (5.10)$$

con el subíndice x se indica que trabajamos con la componente en x .

En cuanto al primer término

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho v dV = \frac{\partial}{\partial t} (\rho v A dx)$$

Sobre el segundo (despreciando términos de segundo orden o superiores):

$$\begin{aligned} \iint_S (\rho v \vec{v}) \cdot d\vec{S} &= -\rho v^2 A + (\rho + d\rho)(v + dv)^2 (A + dA) = \\ &= -\rho v^2 A + (A\rho + dA\rho + Ad\rho)(v + dv)^2 = -\rho v^2 A + (A\rho + dA\rho + Ad\rho)(v^2 + 2vdv) = \\ &= \rho v^2 dA + d\rho v^2 A + 2\rho v (dv) A = d(\rho Av^2) \end{aligned}$$

Y sobre el tercero, un poco más delicado de visualizar (figura 5.3)

$$\begin{aligned} \iint_S (pdS)_x &= -pA + (p + dp)(A + dA) - 2p \frac{dA}{2} = \\ &= Adp \end{aligned}$$

Así que finalmente (5.10) queda

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v A dx) + d(\rho Av^2) = -Adp$$

que, dividiendo por dx y utilizando que $\frac{\partial(\rho A)}{\partial x} = p \frac{\partial A}{\partial x} + A \frac{\partial p}{\partial x}$

$$\frac{\partial(\rho v A)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Av^2)}{\partial x} = -A \frac{\partial p}{\partial x} \iff \boxed{\frac{\partial(\rho Av)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Av^2 + Ap)}{\partial x} = p \frac{\partial A}{\partial x}}$$

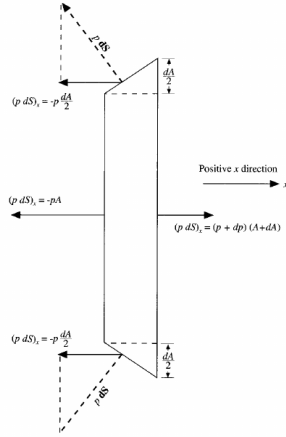


Figura 5.3: Descomposición de fuerzas de superficie.

5.5.3. Ecuación de conservación de la energía

Finalmente, consideraremos la ecuación de la conservación de la energía en formulación integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) dV + \iint_S \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \vec{v} \cdot d\vec{S} = - \iint_S (p\vec{v}) \cdot d\vec{S} \quad (5.11)$$

En cuanto al primer término

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) dV = \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) A dx \right]$$

El segundo término, quedándonos a primer orden en los diferenciales como de costumbre

$$\begin{aligned} \iint_S \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \vec{v} \cdot d\vec{S} &= \\ &= -\rho v A \left(e + \frac{v^2}{2} \right) + (\rho + d\rho) \left(\left(e + de \right) + \frac{(v + dv)^2}{2} \right) (v + dv) (A + dA) = \\ &= -\rho v A \left(e + \frac{v^2}{2} \right) + (\rho + d\rho) \left(e + \frac{v^2}{2} + de + v dv \right) (v + dv) A + \\ &\quad + (\rho + d\rho) \left(e + \frac{v^2}{2} + de + v dv \right) (v + dv) dA = \\ &= -\rho v A \left(e + \frac{v^2}{2} \right) + (\rho + d\rho) \left(e + \frac{v^2}{2} + de + v dv \right) Av + \\ &\quad + (\rho + d\rho) \left(e + \frac{v^2}{2} + de + v dv \right) Adv + \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) v dA = \\ &= \rho Av \underbrace{(de + v dv)}_{d\left(e + \frac{v^2}{2}\right)} + d\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) Av + \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) Adv + \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) v dA = \end{aligned}$$

$$= d \left[\rho A v \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right]$$

Sobre el último término

$$\begin{aligned} \iint_S (p\vec{v}) \cdot d\vec{S} &= -pvA + (p + dp)(v + dv)(A + dA) - 2 \left(pv \frac{dA}{2} \right) = \\ &= pdvA + pvdA + dpvA = d(pvA) \end{aligned}$$

Así, la ecuación (5.11) queda

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right) A dx \right] + d \left[\rho A v \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \right] = -d(pvA)$$

y dividiendo por dx y sustituyendo $E = \rho \left(e + \frac{v^2}{2} \right)$

$$\frac{\partial [AE]}{\partial t} + \frac{\partial [AvE]}{\partial x} = -\frac{\partial (Avp)}{\partial x} \iff \boxed{\frac{\partial [AE]}{\partial t} + \frac{\partial [Av(E+p)]}{\partial x} = 0}$$

5.5.4. Obtención de las relaciones entre las variables y el número de Mach

La conservación de la energía para un flujo adiabático, no viscoso en estacionario se puede expresar como (recordando que $h = e + \frac{p}{\rho}$)

$$h_1 + \frac{v_1^2}{2} = h_2 + \frac{v_2^2}{2} \quad (5.12)$$

donde h_i son las entalpías y v_i las velocidades evaluadas en un par de puntos arbitrarios. Como trabajamos con un gas ideal, $h = c_p T = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} T$ (porque $\frac{c_p}{c_v} = \gamma$ y por la relación de Mayer $c_p - c_v = R$). Evaluando el punto 1 en el punto sónico (en el que el flujo llevaría $v = a$) y el punto 2 en un punto arbitrario

$$\frac{\gamma R}{\gamma - 1} T_* + \frac{v_*^2}{2} = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} T + \frac{v^2}{2}$$

y además, como la velocidad del sonido se define $a = \sqrt{\gamma R T}$

$$a_*^2 \left(\frac{1}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \right) = \frac{a^2}{\gamma - 1} + \frac{v^2}{2}$$

donde también hemos utilizado la igualdad $v_* = a_*$ en el punto sónico.

Si ahora dividimos por a^2 .

$$\frac{a_*^2}{a^2} \left(\frac{1}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\gamma - 1} + \frac{M^2}{2}$$

y utilizando la condición de continuidad $\rho^* v^* A^* = \rho v A \implies \frac{a_*^2}{v^2} = \left(\frac{\rho A}{\rho^* A^*} \right)^2$

$$M^2 \left(\frac{\rho A}{\rho^* A^*} \right)^2 \left(\frac{1}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\gamma - 1} + \frac{M^2}{2}$$

$$\left(\frac{A}{A^*}\right)^2 = \left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^2 \left(\frac{2 + M^2(\gamma - 1)}{M^2(\gamma - 1)}\right) \left(\frac{2 + (\gamma - 1)}{(\gamma - 1)}\right)^{-1} \quad (5.13)$$

Ahora, intentaremos encontrar una expresión para $\frac{\rho_*}{\rho}$. Para ello, recurrimos de nuevo a (5.12), esta vez evaluando en los puntos con velocidad nula y un punto arbitrario

$$h_0 = h + \frac{v^2}{2} \iff \frac{\gamma R}{\gamma - 1} T_0 = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} T + \frac{v^2}{2}$$

Así

$$\frac{\gamma R}{\gamma - 1} T_0 = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} T + \frac{v^2}{2}$$

y entonces, si lo ponemos en función del número de Mach

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{(\gamma - 1)}{2} M^2 \quad (5.14)$$

Por otro lado, como estamos en flujo isentrópico,

$$ds = 0 = c_p \frac{dT}{T} - \frac{pdV}{T} = c_p \frac{dT}{T} - R \frac{dp}{p}$$

y de aquí deducimos directamente que

$$\begin{aligned} c_p \frac{dT}{T} = R \frac{dp}{p} &\iff \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{dT}{T} = \frac{dp}{p} \iff \\ &\iff \ln \frac{p_2}{p_1} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \ln \frac{T_2}{T_1} \end{aligned}$$

y, por tanto,

$$\frac{p_0}{p} = \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^\gamma = \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$$

Con esto último y con (5.14), ya obtenemos las expresiones para $\frac{\rho_0}{\rho}$ y $\frac{p_0}{p}$:

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad \frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \quad (5.15)$$

Ahora, para quitar el término $\frac{\rho_*}{\rho}$ en la ecuación (5.13), evaluamos nuestra nueva expresión en el punto sónico:

$$\frac{\rho_0}{\rho_*} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}$$

y ahora sustituimos ρ_0 de nuevo en la expresión

$$\frac{\rho_*}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{1}{\gamma-1}} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2}\right)^{\frac{-1}{\gamma-1}}$$

Finalmente, sustituyendo en (5.13):

$$\left(\frac{A}{A^*}\right)^2 = \frac{1}{M^2} \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right) \right]^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \quad (5.16)$$

5.6. Corrección de la entropía

El algoritmo de Roe como se ha mostrado tiene un problema. Y es que, el hecho de que este tipo de algoritmos resuelva problemas de Riemann locales puede provocar que situaciones donde la solución no es discontinua, acabe en una onda de choque¹. Esto ocurre principalmente en ondas de rarefacción². Cuando la onda de rarefacción es transónica, aparecen ondas de choque ficticias que violan la conservación de la entropía. Para prevenir esto, en el libro de Toro [6] se expone una forma de corregirlo. Para la rarefacción transónica «por la izquierda» se propone la sustitución de $\tilde{\lambda}_1$ en la expresión de los flujos (3.20) por

$$\bar{\lambda}_1 = \lambda_1^L \left(\frac{\lambda_1^R - \tilde{\lambda}_1}{\lambda_1^R - \lambda_1^L} \right)$$

siempre que $\lambda_1^L < 0 < \lambda_1^R$ (es decir, que haya rarefacción).

Para la rarefacción transónica «por la derecha» el método es análogo; se sustituye $\tilde{\lambda}_3$ en los flujos por

$$\bar{\lambda}_3 = \lambda_3^R \left(\frac{\tilde{\lambda}_3 - \lambda_3^L}{\lambda_3^R - \lambda_3^L} \right)$$

siempre que $\lambda_3^L < 0 < \lambda_3^R$. Los superíndices L y R se refieren a los parámetros evaluados en la celda izquierda y de la derecha, respectivamente.

5.7. Modificación HLLS

HLLS es una modificación del modelo HLL para que se incluya dentro del método el efecto de los términos fuente [13]. La principal diferencia radicará en que ahora el estado intermedio \mathbf{U}^{hll} se verá dividido en dos estados, también uniformes a trazos como muestra la figura 5.4, \mathbf{U}_L^- y \mathbf{U}_R^+ .

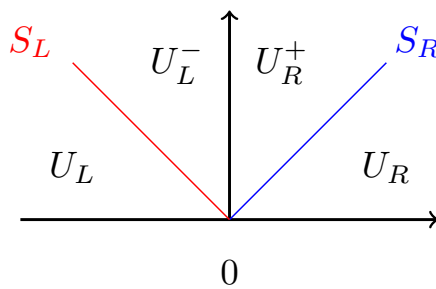


Figura 5.4: Esquema de regiones de estado uniforme, \mathbf{U}_L , \mathbf{U}^{hll} , \mathbf{U}_R separadas por las velocidades de señal más rápidas S_L y S_R

No se desarrollara todo el método aquí, solamente se muestran los nuevos esquemas de flujos:

¹Puesto que al resolver problema de Riemann todas las soluciones se resuelven como un conjunto de discontinuidades.

²Es decir, cuando hay zonas de las que el aire se aleja en ambas direcciones y se «vacían» parcialmente.

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^- = \begin{cases} \mathbf{F}_L & S_L \geq 0 \\ \frac{S_R \mathbf{F}_L - S_L \mathbf{F}_R + S_R S_L (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L) + S_L (\mathbf{S}_{i+1/2} - S_R H_{i+1/2})}{S_R - S_L} & S_L < 0 < S_R \\ \mathbf{F}_R - \mathbf{S}_{i+1/2} & S_R \leq 0 \end{cases} \quad (5.17)$$

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^+ = \begin{cases} \mathbf{F}_L + \mathbf{S}_{i+1/2} & S_L \geq 0 \\ \frac{S_R \mathbf{F}_L - S_L \mathbf{F}_R + S_R S_L (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L) + S_R (\mathbf{S}_{i+1/2} - S_L H_{i+1/2})}{S_R - S_L} & S_L < 0 < S_R \\ \mathbf{F}_R & S_R \leq 0 \end{cases}$$

Esta vez, para las dos velocidades de señal S_L y S_R , para que sea consistente la modificación para incluir los términos fuente, se debe elegir

$$S_L = \tilde{v} - \tilde{a} \quad S_R = \tilde{v} + \tilde{a} \quad (5.18)$$

Además, queda construir el vector H que aparece en el esquema de los flujos. Este vector será $H = \tilde{\mathbf{J}}^{-1} \mathbf{S}$, donde $\tilde{\mathbf{J}}$ es la matriz jacobiana del problema evaluada con los promedios de Roe y \mathbf{S} el vector de términos fuente.

$$H = \tilde{\mathbf{J}}^{-1} \mathbf{S} \quad (5.19)$$

En cuanto a cada avance en el tiempo, se sigue el mismo esquema,

$$\mathbf{U}_i^{t+1} = \mathbf{U}_i^t - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{i+1/2}^- - \mathbf{F}_{i-1/2}^+ \right) \quad (5.20)$$

Cálculo del vector H Si realizamos el cálculo del vector H de manera directa a partir de la expresión ((5.19)), se obtiene lo siguiente

$$H = -\frac{1}{2a} \tilde{p} \frac{dA}{dx} \begin{bmatrix} \frac{2}{\tilde{v}} \left(\frac{2\tilde{a}\tilde{v} + \tilde{v}^2 - 2\tilde{H}}{\tilde{v}^2 - 2\tilde{H}} - 1 \right) - \frac{1}{\tilde{v} - \tilde{a}} \left(\frac{2\tilde{a}\tilde{v} + \tilde{v}^2 - 2\tilde{H}}{\tilde{v}^2 - 2\tilde{H}} - 2 \right) - \frac{1}{\tilde{v} + \tilde{a}} \left(\frac{2\tilde{a}\tilde{v} + \tilde{v}^2 - 2\tilde{H}}{\tilde{v}^2 - 2\tilde{H}} \right) & 0 \\ \tilde{v} \left(\frac{2\tilde{a}\tilde{v} + \tilde{v}^2 - 2\tilde{H}}{\tilde{v}^2 - 2\tilde{H}} - 1 \right) - \frac{\tilde{H} - \tilde{a}\tilde{v}}{\tilde{v} - \tilde{a}} \left(\frac{2\tilde{a}\tilde{v} + \tilde{v}^2 - 2\tilde{H}}{\tilde{v}^2 - 2\tilde{H}} - 2 \right) - \frac{\tilde{H} + \tilde{a}\tilde{v}}{\tilde{v} + \tilde{a}} \left(\frac{2\tilde{a}\tilde{v} + \tilde{v}^2 - 2\tilde{H}}{\tilde{v}^2 - 2\tilde{H}} \right) & \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

que, además de complicado y poco práctico, presenta un par de problemas. El primero es que cuando $\tilde{v} \rightarrow 0$, el esquema «explota» al aparecer v en el denominador. Esto se puede solventar sustituyendo este caso particular por el límite

$$\lim_{v \rightarrow 0} H = -\frac{1}{2a} \tilde{p} \frac{dA}{dx} \begin{bmatrix} -\frac{2(\tilde{a}^2 + \tilde{H})}{\tilde{H}\tilde{a}} \\ 0 \\ -\frac{2\tilde{H}}{\tilde{a}} \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

Pero, pese a todo, queda un escenario aún peor; el caso cuando $\tilde{v} \rightarrow \pm \tilde{a}$. En este caso, ambos límites divergen a ∞ .

Para resolver este problema se puede realizar otro acercamiento que simplifica todo un poco. Se reescribe el vector H sustituyendo todas las variables por las expresiones equivalentes en función de S_L y S_R . Las equivalencias vienen dadas por (5.18)

$$\tilde{v} = \frac{S_2 + S_1}{2} \quad \tilde{a} = \frac{S_2 - S_1}{2} \quad (5.23)$$

Para sustituir \tilde{H} , utilizaremos también la relación (3.17)

$$\tilde{a}^2 = (\gamma - 1) \left(\tilde{H} - \frac{1}{2} \tilde{v}^2 \right) \implies \tilde{H} = \frac{\tilde{a}^2}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \tilde{v}^2 \quad (5.24)$$

A partir de estas identidades y un procedimiento un poco tedioso, se puede reescribir el vector H de la siguiente forma:

$$H = -\frac{\tilde{p} \frac{dA}{dx}}{S_L S_R} \begin{bmatrix} \gamma \\ 0 \\ \frac{\gamma(3-\gamma)(S_L+S_R)^2 - 8S_L S_R}{8(\gamma-1)} \end{bmatrix} \quad (5.25)$$

Muchísimo más compacto y solamente depende de S_L y S_R . Ahora, aunque sigue divergiendo en el caso que $\tilde{v} \rightarrow \pm \tilde{a}$, ya que entonces o $S_L \rightarrow 0$ o bien $S_R \rightarrow 0$ y $H \rightarrow \infty$, este problema desaparece en la práctica. Si se observa en las expresiones del flujo HLLS 5.17, lo que aparece en las ecuaciones es $S_L S_R H$, con lo que desaparecen las dos velocidades del denominador y se evita el problema.

Problema de entropía. Aunque se ha comentado que HLL no presentaba el problema de la entropía en las rarefacciones transónicas, hay que tener en cuenta que esto era por el uso de los estimadores de velocidad (3.22). Ahora, por consistencia con el método utilizado para introducir el término fuente, se deben utilizar los estimadores (5.18) que vuelven a tener el problema de la entropía. En general, lo que se hará es utilizar los estimadores de HLL si no hay términos fuente, y los estimadores (5.18) para el resto de casos. Es decir

$$S_L = \begin{cases} \min(v_L - a_L, \tilde{v} - \tilde{a}, v_R - a_R) & \text{si } |\mathbf{S}| = 0 \\ \tilde{v} - \tilde{a} & \text{si } |\mathbf{S}| \neq 0 \end{cases}$$

$$S_R = \begin{cases} \max(v_L + a_L, \tilde{v} + \tilde{a}, v_R + a_R) & \text{si } |\mathbf{S}| = 0 \\ \tilde{v} + \tilde{a} & \text{si } |\mathbf{S}| \neq 0 \end{cases}$$

Teóricamente con esto ya no debería aparecer ningún problema. Sin embargo, se ha observado que en casos particulares del problema de la tobera, puede crear pequeñas ondas de choque no físicas cuando hay rarefacción transónica. Estas soluciones ficticias violan el principio de conservación de la entropía, como ocurría con el método de Roe sin la corrección.

Llegado este punto, hay dos opciones. Se puede eliminar el problema de la entropía, sustituyendo los estimadores de velocidad del caso $|\mathbf{S}| \neq 0$ con los estimadores del caso $|\mathbf{S}| = 0$, siempre que haya rarefacción transónica. El único problema de esto es que crea un ligero defecto en la solución, porque el término fuente se calcula con un pequeño error, al no utilizar los estimadores con los que está deducido HLLS. Aquí se ha optado por esta opción, pues parece preferible este pequeño defecto que la aparición de soluciones que violan la conservación de la entropía.

5.8. Modificación HLLCS

Análogamente a lo que ocurría con HLL y los términos fuente, ocurre con HLLC. Por lo que se puede desarrollar una modificación de HLLC para incluir los términos fuente en el método. De nuevo, el procedimiento está desarrollado en el artículo [13] para un contexto distinto pero se puede recalcular todo para las ecuaciones de Euler con el término fuente del área.

La filosofía de la modificación es similar a la de HLLS, pero más enrevesada por la mayor complejidad de HLLC. En HLLC teníamos cuatro zonas de estado constante separadas por las velocidades S_L , S_R y S_* (figura 3.3). Al introducir el término fuente, dividiremos las dos zonas intermedias en dos más (cada una); llegando a los estados \mathbf{U}_L , \mathbf{U}_{*L}^- , \mathbf{U}_{*L}^+ , \mathbf{U}_{*R}^- , \mathbf{U}_{*R}^+ y \mathbf{U}_R . Por tanto, la velocidad intermedia S_* se despliega en dos velocidades intermedias S_*^+ y S_*^- .

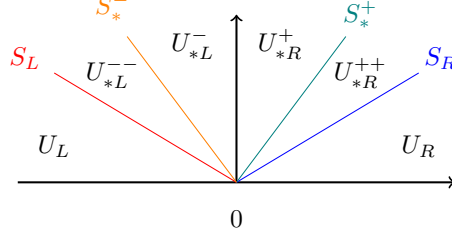


Figura 5.5: Esquema de zonas de estado constante y velocidades de HLLCS

El desarrollo está expuesto en los apéndices; aquí se presenta directamente el esquema de flujos HLLCS:

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{hllcs-} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & S_L \geq 0 \\ \mathbf{F}_L + S_L (\mathbf{U}_{*L}^- - \mathbf{U}_L) & S_L \leq 0 \leq S_*^+ \\ \mathbf{F}_R + S_R (\mathbf{U}_{*R}^+ - \mathbf{U}_R) - \mathbf{S}_{i+1/2} & S_*^- \leq 0 \leq S_R \\ \mathbf{F}_R - \mathbf{S}_{i+1/2} & S_R \leq 0 \end{cases}$$

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{hllcs+} = \begin{cases} \mathbf{F}_L + \mathbf{S}_{i+1/2} & S_L \geq 0 \\ \mathbf{F}_L + S_L (\mathbf{U}_{*L}^- - \mathbf{U}_L) + \mathbf{S}_{i+1/2} & S_L \leq 0 \leq S_*^+ \\ \mathbf{F}_R + S_R (\mathbf{U}_{*R}^+ - \mathbf{U}_R) & S_*^- \leq 0 \leq S_R \\ \mathbf{F}_R & S_R \leq 0 \end{cases}$$

donde

$$\mathbf{U}_{*L}^- = \frac{A_R \rho_R (S_R - v_R) - S_R H_1^-}{S_R - S_*^-} \begin{pmatrix} 1 \\ S_*^- \\ \frac{E_R}{\rho_R} + (S_*^- - v_R) \left(S_*^- + \frac{p_R}{\rho_R (S_R - v_R)} \right) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}_{*R}^+ = \frac{A_L \rho_L (S_L - v_L) + S_L H_1^+}{S_L - S_*^+} \begin{pmatrix} 1 \\ S_*^+ \\ \frac{E_L}{\rho_L} + (S_*^+ - v_L) \left(S_*^+ + \frac{p_L}{\rho_L (S_L - v_L)} \right) \end{pmatrix}$$

Las velocidades vienen dadas ahora por

$$S_*^\pm = \frac{p_R - p_L + \rho_L v_L (S_L - v_L) - \rho_R v_R (S_R - v_R) + S_R S_L H_1^\pm}{\rho_L (S_L - v_L) - \rho_R (S_R - v_R) + S_{L/R} H_1^\pm} \quad S_{L/R} = \begin{cases} S_L & \text{si } S_*^- \\ S_R & \text{si } S_*^+ \end{cases}$$

Finalmente, los vectores H^+ y H^- vienen dados por

$$H^+ = -\frac{\tilde{p} \frac{dA}{dx}}{S_L S_R} \begin{bmatrix} \gamma \\ 0 \\ \frac{\gamma(3-\gamma)(S_L+S_R)^2 - 8S_L S_R}{8(\gamma-1)} \end{bmatrix}_L \quad (5.26)$$

$$H^- = -\frac{\tilde{p} \frac{dA}{dx}}{S_L S_R} \begin{bmatrix} \gamma \\ 0 \\ \frac{\gamma(3-\gamma)(S_L+S_R)^2 - 8S_L S_R}{8(\gamma-1)} \end{bmatrix}_R$$

Los subíndices R y L significan que se evalúa el vector con los valores en cada lado

5.9. Obtención parámetros HLLC

En el método HLLC lo que hacemos es lo siguiente:

$$\frac{1}{T(S_R - S_L)} \int_{TS_L}^{TS_R} \mathbf{U}(x, T) dx = \frac{1}{T(S_R - S_L)} \int_{TS_L}^{TS_*} \mathbf{U}(x, T) dx + \frac{1}{T(S_R - S_L)} \int_{TS_*}^{TS_R} \mathbf{U}(x, T) dx$$

donde definimos \mathbf{U}_{*L} y \mathbf{U}_{*R} :

$$\mathbf{U}_{*L} = \frac{1}{T(S_* - S_L)} \int_{TS_L}^{TS_*} \mathbf{U}(x, T) dx$$

$$\mathbf{U}_{*R} = \frac{1}{T(S_R - S_*)} \int_{TS_*}^{TS_R} \mathbf{U}(x, T) dx$$

entonces, la condición de consistencia (también utilizada para el HLL) queda:

$$\left(\frac{S_* - S_L}{S_R - S_L} \right) \mathbf{U}_{*L} + \left(\frac{S_R - S_*}{S_R - S_L} \right) \mathbf{U}_{*R} = \mathbf{U}^{hll}$$

Los flujos para el método HLLC vienen dados como:

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{hllc} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & S_L \geq 0 \\ \mathbf{F}_{*L} & S_L \leq 0 \leq S_* \\ \mathbf{F}_{*R} & S_* \leq 0 \leq S_R \\ \mathbf{F}_R & S_R \leq 0 \end{cases}$$

Aplicando las condiciones de Rankine-Hugoniot a través de cada onda,

$$\mathbf{F}_{*L} = \mathbf{F}_L + S_L (\mathbf{U}_{*L} - \mathbf{U}_L)$$

$$\mathbf{F}_{*R} = \mathbf{F}_{*L} + S_* (\mathbf{U}_{*R} - \mathbf{U}_{*L}) = \mathbf{F}_R + S_R (\mathbf{U}_{*R} - \mathbf{U}_R)$$

Buscamos dos flujos intermedios a los del HLL: \mathbf{F}_{*L} y \mathbf{F}_{*R} , para lo cual buscamos dos vectores de estado intermedios \mathbf{U}_{*L} y \mathbf{U}_{*R} . Como hay más incógnitas que ecuaciones, imponemos algunas condiciones extra:

$$p_{*L} = p_{*R} = p_*$$

$$v_{*L} = v_{*R} = v_*$$

además, vamos a poner una velocidad de señal intermedia, que definimos como

$$S_* = v_*$$

por lo tanto, nos interesa encontrar un estimador para S_* . Reorganizando las expresiones de los flujos, podemos dejar a la derecha los vectores conocidos

$$S_L \mathbf{U}_{*L} - \mathbf{F}_{*L} = S_L \mathbf{U}_L - \mathbf{F}_L$$

$$S_R \mathbf{U}_{*R} - \mathbf{F}_{*R} = S_R \mathbf{U}_R - \mathbf{F}_R$$

Además, tenemos en cuenta la relación:

$$\mathbf{F} = vA\mathbf{U} + pAD \quad D = (0, 1, v)^T$$

Echando cuentas:

$$(S_L A_{*L} - v_{*L} A_{*L}) \begin{pmatrix} \rho_{*L} \\ \rho_{*L} v_{*L} \\ E_{*L} \end{pmatrix} - p_{*L} A_{*L} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ v_{*L} \end{pmatrix} = (S_L A_L - v_L A_L) \begin{pmatrix} \rho_L \\ \rho_L v_L \\ E_L \end{pmatrix} - p_L A_L \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ v_L \end{pmatrix}$$

$$(S_R A_{*R} - v_{*R} A_{*R}) \begin{pmatrix} \rho_{*R} \\ \rho_{*R} v_{*R} \\ E_{*R} \end{pmatrix} - p_{*R} A_{*R} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ v_{*R} \end{pmatrix} = (S_R A_R - v_R A_R) \begin{pmatrix} \rho_R \\ \rho_R v_R \\ E_R \end{pmatrix} - p_R A_R \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ v_R \end{pmatrix}$$

si utilizamos las dos primeras componentes llegamos a

$$(S_L - v_L) \rho_L A_L \underbrace{v_{*L}}_{S_*} - p_{*L} A_{*L} = (S_L - v_L) \rho_L A_L v_L - p_L A_L$$

$$(S_R - v_R) \rho_R A_R \underbrace{v_{*R}}_{S_*} - p_{*R} A_{*R} = (S_R - v_R) \rho_R A_R v_R - p_R A_R$$

de aquí, podemos obtener dos estimaciones de la presión para las zonas * (si $A_{*K} = A_K$ con $K = R, L$)

$$p_{*L} = p_L + \rho_L (S_L - v_L) (S_* - v_L)$$

$$p_{*R} = p_R + \rho_R (S_R - v_R) (S_* - v_R)$$

con la suposición de que la presión es constante en la zona *,

$$S_* = \frac{p_R - p_L + \rho_L v_L (S_L - v_L) - \rho_R v_R (S_R - v_R)}{\rho_L (S_L - v_L) - \rho_R (S_R - v_R)}$$

Entonces, solamente necesitamos los estimadores de S_R y S_L . Para calcular el flujo, tenemos

$$\mathbf{F}_{*K} = \mathbf{F}_K + S_K (\mathbf{U}_{*K} - \mathbf{U}_K)$$

con \mathbf{U}_K deducido de las expresiones de los flujos (he sustituido $p_{*L} = p_L + \rho_L (S_L - v_L) (S_* - v_L)$)

$$(S_L - v_{*L}) \mathbf{U}_{*L} = A_L \rho_L (S_L - v_L) \left[\begin{pmatrix} 1 \\ v_L \\ \frac{E_L}{\rho_L} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{p_L (S_* - v_L)}{\rho_L (S_L - v_L)} \end{pmatrix} + (S_* - v_L) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ S_* \end{pmatrix} \right]$$

$$\mathbf{U}_{*L} = A_L \rho_L \frac{S_L - v_L}{S_L - v_{*L}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_L + S_* - v_L \\ \frac{E_L}{\rho_L} + \frac{p_L (S_* - v_L)}{\rho_L (S_L - v_L)} + (S_* - v_L) S_* \end{pmatrix}$$

uniendo todo en un solo vector

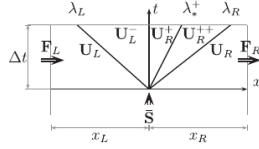
$$\mathbf{U}_{*L} = A_L \rho_L \frac{S_L - v_L}{S_L - v_{*L}} \begin{pmatrix} 1 \\ S_* \\ \frac{E_L}{\rho_L} + (S_* - v_L) \left(S_* + \frac{p_L}{\rho_L(S_L - v_L)} \right) \end{pmatrix}$$

que, como vemos, depende del área (porque \mathbf{U}_{*L} está definido con el área dentro).

5.10. Obtención parámetros HLLCS

En la modificación dividiremos la estimación de la velocidad de señal de onda de contacto en 2 S_*^\pm

Estimación de S_*^+



tenemos

$$\mathbf{U} = \frac{(S_R - S_*^+) \mathbf{U}_R^{++} + S_*^+ \mathbf{U}_R^+ - \mathbf{U}_L^- S_L}{S_R - S_L}$$

$$(\rho_R A_R)^+ = \frac{\rho_L A_L (v_L - S_L) - S_L H_1^+}{S_*^+ - S_L}$$

$$\mathbf{U}_R^+ = \mathbf{U}_{*L} = \frac{A_L \rho_L (S_L - v_L) + S_L H_1^+}{S_L - S_*} \begin{pmatrix} 1 \\ S_* \\ \frac{E_L}{\rho_L} + (S_* - v_L) \left(S_* + \frac{p_L}{\rho_L(S_L - v_L)} \right) \end{pmatrix}$$

\mathbf{S} es el vector de términos fuente.

$$\mathbf{H} = \mathbf{J} \mathbf{S}$$

$$\mathbf{H} = -\frac{p}{2a} \frac{dA}{dx} \begin{bmatrix} \frac{2(\Pi-1)}{v} - \frac{(\Pi-2)}{v-a} - \frac{\Pi}{a+v} \\ 0 \\ \frac{v^2(\Pi-1)}{v} + \frac{(av-\mathbf{H})(\Pi-2)}{v-a} - \frac{(av+\mathbf{H})\Pi}{v+a} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{H}^+ = \mathbf{H}_L$$

$$\mathbf{U}_L^- = \mathbf{U}_R^+ - \mathbf{H}^+$$

$$\mathbf{F}_L^- = \mathbf{F}_L + S_L (\mathbf{U}_L^- - \mathbf{U}_L) \quad \mathbf{F}_R^+ = \mathbf{F}_L + S_L (\mathbf{U}_L^- - \mathbf{U}_L) + J$$

Ahora, como

$$(\rho_R A_R)^{++} = (\rho_R A_R) \left(\frac{v_R - S_R}{S_*^+ - S_R} \right)$$

$$S_*^+ = \frac{S_L \rho_R A_R (v_R - S_R) - S_R \rho_L A_L (v_L - S_L) + S_R S_L \mathbf{H}_1^+}{\rho_R A_R (v_R - S_R) - \rho_L A_L (v_L - S_L) + S_L \mathbf{H}_1^+}$$

Estimación de S_*^-

$$\begin{aligned}\rho_L^- &= \frac{\rho_R(v_R - S_R) + S_R \mathbf{H}_1^-}{S_*^- - S_R} \\ \mathbf{U}_L^- &= \rho_L^- \begin{pmatrix} 1 \\ S_*^- \\ E_L \end{pmatrix} \\ \mathbf{H}^- &= \mathbf{H}_R \\ \mathbf{U}_R^+ &= \mathbf{H}^- + \mathbf{U}_L^- \\ \rho_L^{--} &= \rho_L \left(\frac{v_L - S_L}{S_*^- - S_L} \right) \\ S_*^- &= \frac{S_L \rho_R (v_R - S_R) - S_R \rho_L (v_L - S_L) + S_R S_L \mathbf{H}_1^-}{\rho_R (v_R - S_R) - \rho_L (v_L - S_L) + S_R \mathbf{H}_1^-}\end{aligned}$$

En resumen, el método

Si $S_L \geq 0$

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS-} = \mathbf{F}_L \quad \mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS+} = \mathbf{F}_L + \mathbf{S}_{i+1/2}$$

si $S_R \leq 0$

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS-} = \mathbf{F}_R - \mathbf{S}_{i+1/2} \quad \mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS+} = \mathbf{F}_R$$

si no, si $S_*^+ > 0$

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS-} = \mathbf{F}_L + S_L (\mathbf{U}_L^- - \mathbf{U}_L) \quad \mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS+} = \mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS-} + \mathbf{S}_{i+1/2}$$

si $S_*^- < 0$

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS-} = \mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS+} - \mathbf{S}_{i+1/2} \quad \mathbf{F}_{i+1/2}^{HLLCS+} = \mathbf{F}_R + S_R (\mathbf{U}_R^+ - \mathbf{U}_R)$$

Bibliografía

- [1] Lewis Fry Richardson. «*Weather Prediction by Numerical Process*». Cambridge University Press (1922)
- [2] A. Thom, D.Sc., Ph.D. «*The Flow Past Circular Cylinders at Low Speeds*». University of Glasgow (1933)
- [3] Platzman GW. The ENIAC Computations of 1950: Gateway to Numerical Weather Prediction. Bulletin of the American Meteorological Society. 1979;60:302–312.
- [4] Barrero Ripoll, Antonio. «*Fundamentos y aplicaciones de la mecánica de fluidos*». McGraw-Hill, D.L. 2005

- [5] P. L. Roe. «*Approximate riemann solvers, parameter vectors and difference schemes*». Journal of Computational Physics, 43, 357-372, (1981)
- [6] Eleuterio F. Toro. «*Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction, Third Edition*». Springer (2009)
- [7] Harten, Amiram; Lax, Peter D.; Van Leer, Bram (1983). «*On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*». SIAM Review. 25 (1): 35–61.
- [8] «*Courant–Friedrichs–Lewy condition*». Wikipedia, Wikimedia Foundation, April 2021. https://en.wikipedia.org/wiki/Courant-Friedrichs-Lewy_condition
- [9] John D. Anderson. «*Computational Fluid Dynamics: The Basics With Applications, Third Edition*». McGraw-Hill Education (1995)
- [10] John D. Anderson. «*Fundamentals of Aerodynamics, 5th Edition*». McGraw-Hill Education (2010)
- [11] P. García Navarro, A. Navas Montilla, J. Fernández Pato. «*Introducción a la mecánica de fluidos computacional*». Prensas de la Universidad De Zaragoza (2021)
- [12] Apuntes del curso 2019-2020 de las clases impartidas por la profesora Pilar García Navarro en la Universidad de Zaragoza.
- [13] J. Murillo , P. García-Navarro. «*Augmented versions of the HLL and HLLC Riemann solvers including source terms in one and two dimensions for shallow flow applications*». Journal of Computational Physics 231 (2012) 6861–6906
- [14] Randall J. LeVeque. «*Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*». Cambridge University Press (2002)
- [15] C.P. Dullemond and H.H. Wang. «*Numerical fluid mechanics lectures*». University Of Heidelberg (2009). https://www.ita.uni-heidelberg.de/~dullemond/lectures/num_fluid_2009/index.shtml?lang=en
- [16] MacCormack, R. W. «*The Effect of viscosity in hypervelocity impact cratering*» , AIAA Paper, 69-354 (1969).
- [17] Toro, E. F.; Spruce, M.; Speares, W. (1994), «*Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver*», Shock Waves, 4 (1): 25–34
- [18] R. Eymard, T Gallouët and R. Herbin. «*Finite volume methods*». Handbook of Numerical Analysis, (2000)
- [19] G. A. Sod. A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws. J. Comput. Phys., 27:1–31, 1978.
- [20] J. Chaskalovic. «*Finite elements methods for engineering sciences*». Springer Verlag (2008)