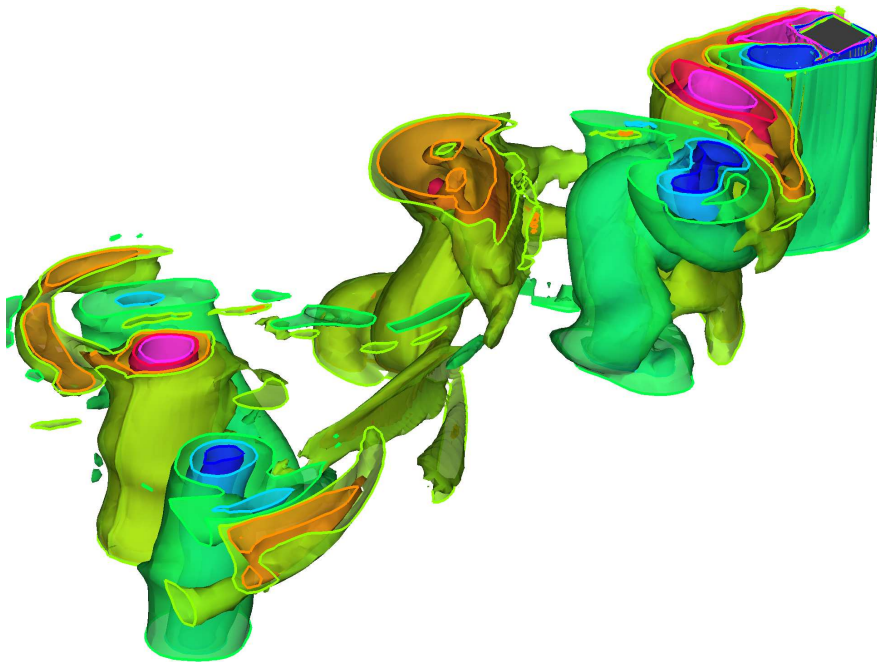


Resolución acoplada de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante una implementación parcialmente implícita de la interpolación del momento

Tesis Doctoral
Ana Cubero García



Área de Mecánica de Fluidos
Universidad de Zaragoza
Diciembre 2007

*A Yago,
por ser como eres.
Gracias por Pablo.*

*A mi madre,
con cariño.*

Agradecimientos

Ahora que un trabajo de largos años, con altibajos en su progreso y con una feliz interrupción por el nacimiento de Pablo (mi hijo), se presenta para su evaluación por la comunidad científica, quiero dar las gracias a todas las personas que han contribuido de una u otra manera a su desarrollo. En especial,

- a Norberto Fueyo, por sus valiosos consejos y su estímulo para reflejar en artículos el trabajo realizado.
- a los compañeros de trabajo, por las conversaciones sobre nuestros temas de investigación, y por hacer amables los ratos de asueto, por jugar partidillos de futbito y por tomar café. Quiero agradecerles especialmente su compañerismo para facilitarme el trabajo desde casa tras mi maternidad. Agradezco a Alberto Sánchez y Paula Martínez su paciencia en sus incursiones en el código.
- a Ugo Piomelli, por su dedicación durante los meses de estancia en su grupo de investigación y su posterior seguimiento del trabajo iniciado.
- a Yago, por su ánimo y apoyo, sin los cuales este barco probablemente no hubiese llegado a puerto.

Figura de la portada: isosuperficies de vorticidad (transversal) en la estela turbulenta generada tras un cilindro de sección cuadrada, resuelta aplicando el algoritmo acoplado propuesto en esta memoria y el modelo de Simulación de las Grandes Escalas (LES).

Prólogo

Esta disertación es un requerimiento parcial para la obtención del grado académico de Doctora por la Universidad de Zaragoza. Este trabajo se ha llevado a cabo en el Área de Mecánica de Fluidos, bajo la supervisión del Doctor Norberto Fueyo, Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza.

En esta tesis se propone un nuevo algoritmo de resolución acoplada de las ecuaciones de Navier-Stokes, basado en una implementación parcialmente implícita del método de interpolación del momento. Su contenido se estructura en nueve capítulos. El primero de ellos presenta una introducción general de los temas tratados en este trabajo y el último un resumen de las principales conclusiones junto con posibles líneas futuras de investigación. El resto de capítulos puede agruparse en tres grandes secciones. En primer lugar, se describe detalladamente el algoritmo de discretización y resolución acoplada e implícita de las ecuaciones de Navier-Stokes propuesto en este trabajo (los Capítulos 3 y 4 contienen las contribuciones más relevantes) y se muestra su comportamiento en casos utilizados habitualmente para la validación de algoritmos numéricos (Capítulo 6). A continuación, el Capítulo 7 trata sobre la aplicación del método a la resolución de flujos turbulentos mediante el modelo de Simulación de las Grandes Escalas (LES) e incluye la motivación para su tratamiento, una breve introducción a la teoría y un caso de aplicación práctica del algoritmo a LES. Finalmente, el Capítulo 8 presenta el comportamiento computacional del código de CFD paralelo desarrollado durante este trabajo, y con el que se han obtenido todos los resultados presentados en el cuerpo de esta memoria.

El orden de los capítulos no sigue necesariamente el orden cronológico de la investigación. En la memoria se ha tratado de exponer en primer lugar los temas con contenidos novedosos y así, por ejemplo, aunque la verificación del código computacional es un paso previo al resto, en esta memoria se presentan antes los resultados del análisis del comportamiento del algoritmo de resolución acoplada de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Por último, en el Apéndice A se describe brevemente la estructura del código desarrollado y en el Apéndice B se presenta el contenido del CD anexo a esta memoria con información suplementaria.

En base a la investigación llevada a cabo en esta tesis doctoral se han escrito hasta la fecha los siguientes artículos:

- A. Cubero y N. Fueyo. **A compact momentum interpolation procedure for unsteady flows and relaxation**. Publicado en *Numerical Heat Transfer, Part B-Fundamentals*, 52 (6), 507-529. 2007. (Corresponde en esencia al contenido del Capítulo 3).
- A. Cubero y N. Fueyo. **Preconditioning based on a partially implicit implementation of Momentum Interpolation for coupled solvers**. Aceptado para publicación en *Numerical Heat Transfer, Part B-Fundamentals* en Enero de 2008.

Otras contribuciones de la autora de esta memoria relacionadas, en mayor o menor medida, con el trabajo que se presenta en la memoria son:

- A. Cubero y U. Piomelli. **Large-eddy simulations of channel flows with variable filter-width-to-grid-size ratios**. Presentación oral en el *workshop Direct and Large Eddy Simulation, VI* (Poitiers, Francia, 12-14 Sept. 2005) y contribución seleccionada, tras revisión, para su publicación en las actas del congreso, editado por *Ercortaf Series*. ISBN: 978-1-4020-4909-5.
- S. Izquierdo, A. Cubero y N. Fueyo. **Minimisation of pollutant emissions in combustion processes using Genetic Algorithms..** Presentación oral en el congreso *Evolutionary Methods for Design, Optimization and Control (EUROGEN 2003)*, Barcelona, España, 15-17 Sept. 2003

Resumen

En este trabajo se propone un nuevo algoritmo para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes de una manera acoplada e implícita que combina técnicas utilizadas por los dos grandes grupos de algoritmos tradicionales (*i.e.* métodos basados en la presión, implícitos y segregados, y métodos basados en la densidad, explícitos y acoplados). Con el propósito de mejorar el número de condicionamiento de la matriz del sistema acoplado, se deduce una ecuación para la presión a partir de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento y se añade un término de compresibilidad artificial a la ecuación de Poisson resultante.

Las ecuaciones de Navier-Stokes son discretizadas siguiendo el método de volúmenes finitos y el modelo de malla colocalizada. Para evitar el bien conocido fenómeno de desacoplamiento velocidad-presión que ocurre en este tipo de mallas, las componentes de velocidad del flujo másico a través de las caras correspondientes se calculan mediante el modelo de Interpolación del Momento, que añade un término de corrección a la interpolación lineal estándar entre nodos; dicho término involucra gradientes de presión entre el propio nodo y el vecino correspondiente. En este trabajo se propone una nueva expresión que evita ciertas inconsistencias de la formulación original y permite además obtener una ecuación de Poisson (para la presión) compacta, así como su implementación parcialmente implícita, consiguiendo el acoplamiento velocidad-presión ($u_P - p_P$) en la misma iteración (la actual), sin aumentar el tamaño de la molécula computacional.

La resolución, mediante un código de CFD paralelo desarrollado *ex profeso* para este trabajo, de una amplia gama de casos de validación, muestra un algoritmo con buen comportamiento en lo referente a precisión, robustez y escalabilidad numérica, apto para resolver flujos tanto incompresibles y altamente dominados por la convección como con fuertes gradientes de temperatura y densidad variable. Los términos transitorios son discretizados mediante un esquema implícito, comprobándose la eficiencia y precisión del método implícito para flujos no estacionarios mediante la resolución del desprendimiento de vórtices laminar tras un cilindro cuadrado.

Por último, se muestra la capacidad del algoritmo propuesto para resolver un problema computacionalmente exigente: la simulación tridimensional y transitoria del desprendimiento de vórtices turbulento a un número de Reynolds moderadamente alto ($Re = 21400$) mediante el modelo de Simulación de las Grandes Escalas (LES).

Abstract

In this work, a new algorithm for solving the Navier-Stokes equations in a coupled and implicit manner is proposed; it combines techniques alternatively used in the two traditional approaches in the field (i.e. methods based on pressure, implicit and segregated, and methods based on density, explicit and coupled). In order to improve the conditioning of the matrix of the coupled system, an equation for pressure is derived from the equations of continuity and momentum, and a term of ‘artificial compressibility’ is added to the resulting Poisson equation.

The Navier-Stokes equations are discretized according to the finite volume method and the co-located grid scheme. To avoid the well-known phenomenon of velocity-pressure decoupling that occurs in this kind of grids, the velocity components of the mass flow through the corresponding faces are calculated following the Momentum Interpolation method, which adds a corrective term to the standard lineal interpolation between nodes; such term involves pressure gradients between each node and its corresponding neighbour. This work makes use of a new formulation for this interpolation which avoids some of the inconsistencies in the original expression; it also allows to obtain a compact Poisson equation (for pressure), as well as its implementation in a partially implicit way, thus achieving the velocity-pressure coupling ($u_P - p_P$) in the same (current) iteration, without increasing the size of the computational molecule.

The solution of a wide range of benchmark cases, by means of a parallel CFD code also developed along this research, confirms the good behaviour of the algorithm regarding accuracy, robustness, and numerical stability. It is found adequate for both incompressible, highly convection-dominated flows and those where strong temperature gradients and variable density are present. The transient terms are discretized in an implicit manner; the efficiency and accuracy of the implicit method for non-stationary flows have been verified solving, as a test case, the laminar vortex shedding after a square cylinder.

Finally, the capacity of the proposed algorithm for solving a computationally demanding problem is shown: the simulation of the three dimensional, transient and turbulent vortex shedding at a moderately high Reynolds number ($Re = 21400$) is performed using Large Eddy Simulation (LES).

Índice general

Agradecimientos	II
Prólogo	III
Resumen	V
Abstract	VI
Índice General	VII
Índice de Figuras	X
Índice de Tablas	XVI
Nomenclatura	XVIII
1. Introducción General	1
1.1. Motivación	1
1.2. Estado del arte	2
1.3. Objetivos	9
2. Algoritmo de discretización	11
2.1. Ecuaciones que gobiernan el flujo	11
2.2. Algoritmo de discretización sobre mallas colocadas	12
2.3. Esquemas Convectivos de Alto Orden	15
2.4. Esquemas temporales implícitos	17
2.5. Sistema algebraico de ecuaciones	18
3. Interpolación Compacta del Momento	21
3.1. Interpolación Original del Momento	23
3.2. Relajación lineal e inercial	26
3.3. Flujos no estacionarios	29
3.3.1. Esquema temporal Euler de primer orden	30
3.3.2. Esquema temporal Euler de segundo orden	32
3.3.3. Esquema temporal Adams-Moulton de segundo orden	34
3.4. Una Interpolación Compacta del Momento	35

4. Precondicionamiento	40
4.1. Linealización	40
4.2. Ecuaciones de cantidad de movimiento	42
4.3. Ecuación de continuidad	43
4.4. Matriz de coeficientes resultante del precondicionamiento . . .	47
5. Detalles algorítmicos	50
5.1. Resolución del sistema en forma delta	50
5.2. Control de las iteraciones exteriores e interiores	51
5.3. Implementación de las condiciones de contorno	53
5.3.1. Tratamiento de la corrección de la interpolación del momento en los contornos	55
5.3.2. Pared	56
5.3.3. Entrada de flujo	56
5.3.4. Plano de simetría	57
5.3.5. Salida de flujo	57
5.3.6. Condiciones de contorno periódicas	58
5.4. Código computacional paralelo	60
6. Resultados. Comportamiento del algoritmo acoplado	64
6.1. Validación de la CMI	65
6.1.1. Cavidad con pared móvil, $Re=100$	65
6.1.2. Vórtices de Taylor-Green	70
6.2. Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$	73
6.3. Cavidad con pared móvil a altos Re	80
6.4. Convección natural en una cavidad	83
6.5. Flujo laminar tras un cilindro cuadrado	89
6.6. Expansión brusca en una tubería cilíndrica	97
7. Simulación de las Grandes Escalas (LES)	105
7.1. Motivación	105
7.2. Introducción a la teoría de LES	108
7.2.1. Modelos para los esfuerzos sub-malla	109
7.2.2. Definición del filtro	111
7.2.3. Mallas no uniformes	112
7.3. Estela turbulenta tras un cilindro cuadrado	114
7.3.1. Detalles de la simulación numérica	116
7.3.2. Etapa de transición	119
7.3.3. Parámetros integrales	126
7.3.4. Variables del flujo promediadas en el tiempo	129
7.3.5. Promediados de fase	134

7.3.6.	Campos instantáneos	138
7.3.7.	Comportamiento del algoritmo acoplado e implícito en LES	144
8.	Comportamiento del código paralelo	147
8.1.	Verificación y validación del código computacional	147
8.1.1.	Taylor-Green 3D	148
8.1.2.	Precisión de la discretización espacial	150
8.2.	Comportamiento de la paralelización del código	153
8.3.	Optimización: uso de CPU y memoria	156
9.	Conclusiones y trabajo futuro	161
	Bibliografía	166
	Anexos:	177
A.	Código computacional paralelo	177
A.1.	Estructura de datos	178
A.2.	Diagrama de bloques	183
A.2.1.	Módulo de usuario	183
B.	Información suplementaria en el CD anexo	187

Índice de figuras

2.1. Notación en la celda (izquierda) y disposición colocalizada de las variables (derecha)	13
2.2. Esquema de etiquetado para los nodos involucrados en los Esquemas Convectivos de Alto Orden	16
5.1. Frontera sur del dominio computacional.	54
5.2. Fuerzas de presión (incógnitas) involucradas en el cálculo del flujo másico a través de la frontera oeste.	55
5.3. Estrategia de paralelización usando PETSc.	62
6.1. Cavidad con pared móvil. Esquema del problema y condiciones de contorno.	65
6.2. Cavidad con pared móvil, $Re = 100$, malla 21×21 . Líneas de corriente (izquierda) y contornos de presión (derecha) en la convergencia.	67
6.3. Cavidad con pared móvil, $Re = 100$, malla 21×21 . Las oscilaciones generadas por el esquema OMI (izquierda) cuando se emplea un paso de tiempo pequeño ($\Delta t/t_D = 0.001$) son eliminadas por el esquema CMI (derecha).	68
6.4. Vórtices de Taylor-Green. Contornos de u (izquierda), v (centro) y p (derecha) en $t = 0.50$ obtenidos usando el esquema temporal Adams-Moulton de segundo orden con $\Delta t/t_D = 0.02$	71
6.5. Vórtices de Taylor-Green. Evolución de los perfiles de u (izquierda), v (derecha) y p (abajo) en $y = \pi/2$ usando el esquema Euler de segundo orden con $\Delta t/t_D = 0.01$. Comparación con las curvas teóricas.	72
6.6. Vórtices de Taylor-Green. Error en u en el punto $(x, y, t) = (\pi, \pi/2, 0.5)$ como una función del tamaño de paso temporal Δt para los tres esquemas considerados en este trabajo.	72
6.7. Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Líneas de corriente (izquierda) y contornos de presión (derecha) en la convergencia.	73

6.8.	Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Comparación de los resultados obtenidos en este trabajo ($u, v, p - p_{ref}$ en las líneas centrales) con las soluciones de referencia de Ghia <i>et al.</i> [39] y Botella y Peyret [11].	74
6.9.	Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Historia de la convergencia para varios tamaños de falso paso temporal $\Delta\tau$. Norma del residuo de la ecuación de continuidad (izquierda) y número de iteraciones interiores (derecha) en función de las iteraciones exteriores.	75
6.10.	Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$. Tiempo de CPU en función del número de celdas de la malla; el caso de referencia está etiquetado con el número 1 (ver Tabla 6.4 para una descripción de los casos). La línea representa el ajuste de una función potencial incluyendo todos los puntos mostrados ($f = n^{1.5}$).	77
6.11.	Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla uniforme 41×41 . Coeficiente de preconditionamiento a^{pp} (Ecuación (4.9)) en la solución convergida para cuatro tamaños diferentes del falso paso temporal: $\Delta\tau/\Delta\tau_c = 1, 5, 10, 100$ (de izquierda a derecha y de arriba a abajo).	78
6.12.	Cavidad con pared móvil, $Re = 5000$ (izquierda) y $Re = 10000$ (derecha). Líneas de corriente y contornos de presión (líneas discontinuas). Malla no uniforme 128×128	80
6.13.	Cavidad con pared móvil, $Re = 10000$. Comparación de los resultados de este trabajo con dos mallas diferentes (líneas) con las soluciones de referencia de Ghia <i>et al.</i> [39] y Erturk <i>et al.</i> [28].	81
6.14.	Cavidad con pared móvil, $Re = 10000$, malla 121×121 . Historia de la convergencia con $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 10$	82
6.15.	Convección natural en cavidad. Esquema de definición del problema.	83
6.16.	Convección natural en cavidad, $Ra = 1e7$ y $\epsilon = 0.6$. Líneas de corriente (izquierda) y contornos de temperatura (derecha).	85
6.17.	Convección natural en cavidad, $Ra = 1.0e7$ y $\epsilon = 0.6$. Historia de la convergencia usando un falso paso temporal de $\Delta\tau/\Delta\tau_0 = 1$. Evolución de la norma del vector de corrección para cada variable (izquierda) y número de iteraciones interiores del método iterativo (GMRES) de resolver el sistema acoplado (derecha).	87
6.18.	Cilindro cuadrado. Diagrama de definición del problema.	89

6.19. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Lado de la celda en dirección y como función de la posición de la cara sur de la celda.	90
6.20. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Malla de discretización del dominio completo y detalle entorno al obstáculo.	91
6.21. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Vista detallada de las líneas de corriente (arriba), de los contornos de presión (medio) y de contornos de vorticidad ω_z (líneas discontinuas para valores negativos, abajo) cerca del cilindro en un instante dado.	94
6.22. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Evolución del coeficiente de sustentación del cilindro con el tiempo.	95
6.23. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Promedio del módulo de la velocidad.	95
6.24. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Comparación de los contornos de la velocidad horizontal obtenidos con el esquema SMART (izquierda) y CDS (derecha). Vista detallada en torno al obstáculo.	96
6.25. Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Historia de la convergencia. Norma del vector de actualización (izquierda) y número de iteraciones exteriores (derecha) al final de cada paso temporal.	96
6.26. Volumen de control en coordenadas cilíndrico-polares (derecha) y fuerzas de presión sobre una celda en el plano $r - \theta$ (izquierda).	97
6.27. Expansión brusca en una tubería, $Re = 100$. Vectores de velocidad y líneas de corriente en la zona de recirculación.	99
6.28. Expansión brusca en una tubería, $Re = 100$. Historia del residuo de la ecuación de continuidad para dos mallas diferentes y distinta relajación. En la leyenda, entre paréntesis, se indica el número medio de iteraciones interiores.	101
6.29. Expansión brusca en una tubería, $Re = 100$, malla 92×62 . Comparación de la historia del residuo de la ecuación de continuidad con un tratamiento implícito y explícito de los términos adicionales de la ecuación para v_r . Se indica entre paréntesis el número medio de iteraciones interiores.	101
6.30. Cavidad con pared móvil, $Re=1000$, malla 128×128 . Historia de la convergencia. Comparación de la resolución segregada ($\Delta\tau/\Delta\tau_C = 0.1$) y acoplada ($\Delta\tau/\Delta\tau_C = 10$) de las ecuaciones de Navier-Stokes (se indica entre paréntesis el número medio de iteraciones interiores).	103

7.1.	Estelas de viento a sotavento de la isla del Pacífico Sur Alexander Selkirk (izquierda) y de las islas Madeira y Canarias (derecha). Imágenes de satélite tomadas por la NASA, orientadas con el Norte hacia arriba. En el primer caso, viento S; en el segundo, NNE.	115
7.2.	LES. Cilindro cuadrado (Re=21400). Esquema del problema y malla de discretización.	117
7.3.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Evolución transitoria de la velocidad transversal, w , en un punto de monitorización $x/D = 9.5, y/D = 8.5, z/D = 2$	119
7.4.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Isosuperficies de vorticidad transversal (w_z) en un tiempo anterior ($t = 40D/U$, izquierda) y posterior ($t = 50D/U$, derecha) al momento en que empieza a manifestarse el carácter tridimensional de la turbulencia. La flecha marca la dirección del flujo.	120
7.5.	LES. Cilindro cuadrado. Esquema ilustrativo del desarrollo de las inestabilidades de modo A, tomado de Luo <i>et al.</i> [61].	121
7.6.	LES. Cilindro cuadrado. Esquema ilustrativo del desarrollo de las inestabilidades de modo B, tomado de Luo <i>et al.</i> [61].	122
7.7.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Isosuperficies de vorticidad transversal ω_z (arriba) y longitudinal ω_x (abajo) en $t = 50D/U$. Se observan las inestabilidades correspondientes al modo B (ver Figura 7.6).	123
7.8.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Contornos de ω_z (arriba) y ω_x (abajo) en el plano $x - z$ en $t = 50D/U$. Se observan las inestabilidades modo B (ver Figura 7.6).	124
7.9.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Isocontornos de ω_x (escala de grises) y ω_z (con líneas discontinuas para valores negativos) en $t = 50D/U$	125
7.10.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Evolución del coeficiente de sustentación (izquierda) y su análisis espectral (derecha).	126
7.11.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Perfil de velocidad horizontal media en el plano central del cilindro. Comparación de los cálculos en el presente trabajo (línea continua) con los resultados experimentales de Lyn <i>et al.</i> [62] (símbolos).	129
7.12.	LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Perfiles verticales de la velocidad horizontal media $\langle v \rangle / U$ (línea continua). Comparación con los resultados experimentales de Lyn <i>et al.</i> [62] (símbolos).	130

7.13. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Perfiles verticales de la velocidad horizontal media $\langle v \rangle / U$ (línea continua). Comparación con los resultados experimentales de Lyn <i>et al.</i> [62] (símbolos).	131
7.14. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Perfiles verticales de los esfuerzos de Reynolds $\langle u'v' \rangle / U^2$, promediados en el tiempo. Comparación del presente trabajo (línea sólida) con los resultados experimentales de Lyn <i>et al.</i> [62] (símbolos).	132
7.15. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Contornos del coeficiente de presión ($\langle C_P \rangle$, izquierda), de los esfuerzos cortantes de Reynolds ($\langle u'v' \rangle / U^2$, derecha) y líneas de corriente (abajo) en el plano $x - y$	133
7.16. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Líneas de corriente promediadas en la fase correspondiente a los valores máximos del periodo del coeficiente de sustentación C_L (Figura 7.10, izquierda).	134
7.17. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Comparación del campo de vorticidad transversal periódica ($\widehat{w}_z * L/U$) obtenida en este trabajo (abajo) con los resultados experimentales de Lyn <i>et al.</i> [62]. Nótese la existencia de una zona sin datos experimentales en torno al cilindro en [62].	135
7.18. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Promediado en fase de vorticidad $[\omega_z] * L/U$ (arriba), energía cinética turbulenta $[k] = [u''u'' + v''v'' + w''w''] / U^2)^{1/2}$ (centro) y esfuerzos cortantes de Reynolds $[u''v''] / U^2$ (abajo).	137
7.19. LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Isosuperficies de vorticidad transversal (ω_z , arriba) y longitudinal (ω_x , abajo) en $t * U/D = 90$	140
7.20. LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Isosuperficies de la vorticidad transversal (abajo) y del coeficiente de presión (arriba) en $t * U/D = 95.6$. Ejemplo de <i>paring</i>	141
7.21. LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Isosuperficies del coeficiente de presión (arriba) y de la vorticidad transversal (abajo) en $t * U/D = 109.6$. Se observa la dislocación de un vórtice.	142
7.22. LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Evolución de los coeficientes de sustentación (C_L , izquierda) y arrastre (C_D , derecha). Se señala el instante en el que ocurre la dislocación de uno de los vórtices primarios ω_z	143
7.23. LES. Cilindro cuadrado (Re=22000). Evolución de la norma del residuo de la ecuación de continuidad (izquierda) y del número de iteraciones exteriores (derecha).	146

8.1.	Verificación. Vórtices de Taylor-Green. Contornos de presión en dos planos equivalentes localizados en el punto medio del dominio. Casos con $w = 0$ (izquierda) y $u = 0$ (derecha) en el instante inicial.	149
8.2.	Verificación. Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$. Valor de las variables de referencia en función del tamaño de celda normalizado.	151
8.3.	Resolución del flujo tras un escalón abrupto en $np = 16$ procesadores. Descomposición de la malla completa (arriba) y detallada de las zonas de recirculación (abajo).	153
8.4.	Comportamiento del código paralelo. Escalón abrupto. <i>Speed-up</i> con una malla de 128000 y 512000 celdas.	155
8.5.	Distribución del tiempo de ejecución en el programa principal. Caso del flujo en un canal tras un escalón abrupto (128000 celdas y 224 iteraciones interiores).	159
8.6.	Evolución de la memoria usada en una ejecución. Caso del flujo en un canal tras un escalón abrupto (128000 celdas y 224 iteraciones interiores).	160
A.1.	Miembros de las clases que permiten forman listas de objetos (arriba). Diagrama de colaboración del tipo de dato <code>St_Local</code> (abajo), elaborada con el <i>software</i> Doxygen [47].	180
A.2.	Diagrama de flujo en un problema estacionario.	184
A.3.	Diagrama de las subrutinas llamadas en el módulo de usuario.	186

Índice de Tablas

3.1.	Coeficientes c_i en el esquema CMI (Ecuaciones (3.48) o (3.50))	36
5.1.	Condiciones de contorno. Pared en la cara norte moviéndose en dirección horizontal con velocidad U .	59
5.2.	Condiciones de contorno. Entrada de flujo en la cara oeste con velocidad U .	59
5.3.	Condiciones de contorno. Plano de simetría en la cara sur.	59
5.4.	Condiciones de contorno. Salida de flujo en la cara este. En el caso del coeficientes $a^{u,p}$ se escribe su valor tanto si se supone presión constante e igual a 0 ($a^{u,p} = 0$) como gradiente nulo ($a^{u,p} = -A_e$) en la salida.	59
5.5.	Ejemplo de partición de malla. Numeración global (izquierda) y local a un procesador (derecha) de las celdas de la malla, según el objeto DA de PETSc.	61
6.1.	Cavidad con pared móvil. Comparación del efecto del tamaño de paso temporal en la solución convergida usando la OMI y el esquema propuesto CMI.	66
6.2.	Cavidad con pared móvil. Combinaciones de Δt and $\Delta \tau$ (La solución del estado estacionario y convergido es idéntica para todos los casos).	69
6.3.	Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Comparación de la eficiencia del algoritmo para varios tamaños del falso paso temporal.	75
6.4.	Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$. Batería de casos ejecutados con diferente número de celdas y relaciones de aspecto de la malla de discretización. Se indica con un doble asterisco el caso usado como referencia en la Figura 6.10.	76
6.5.	Convección natural en cavidad. Magnitudes de referencia en los casos simulados.	85

6.6.	Convección en cavidad natural, $\epsilon = 0.6$. Comparación de los resultados de este trabajo con la solución de referencia de Vierendeels et al. [110] y, para el caso con $Ra = 1.0e6$, con los valores calculados de las correlaciones proporcionadas por Chenoweth and Paolucci [16]. Se indica el error en los valores de este trabajo respecto a los de Vierendels.	88
6.7.	Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Parámetros numéricos relevantes en los casos comparados en la Tabla 6.8	91
6.8.	Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Comparación de los resultados obtenidos en este trabajo usando el esquema convectivo SMART con resultados de Sohankar <i>et al.</i> usando el esquema QUICK [104] y el esquema de Van-Leer [103].	92
6.9.	Comparación de la longitud de recirculación (L_r/H) obtenida en este trabajo con otros resultados experimentales ([64]) y computacionales ([30], [75]).	100
7.1.	LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Comparación de los parámetros integrales obtenidos en este trabajo con otros resultados experimentales y computacionales.	128
8.1.	Verificación. Cavidad cuadrada con pared móvil. Valores de velocidad y presión obtenidos en tres mallas sucesivamente refinadas.	150
8.2.	Verificación. Cavidad con pared móvil. Parámetros de la precisión espacial obtenidos siguiendo el procedimiento de extrapolación de Richardson. También se presentan, para su comparación, los resultados de alta precisión de Botella y Peyret [11].	151
8.3.	Comportamiento paralelo del código desarrollado. Tiempos de ejecución en la resolución del problema del escalón abrupto con una malla de 128000 celdas.	154
8.4.	Comportamiento paralelo del código desarrollado. Tiempos de ejecución en la resolución del problema del escalón abrupto con una malla de 512000 celdas.	154

Nomenclatura

Caracteres romanos

A	matriz de coeficientes del sistema algebraico
<i>A</i>	área de la cara
$a^{\phi_1\phi_2}$	coeficiente de la matriz del sistema acoplado; coeficiente en la ecuación de ϕ_1 que multiplica a la variable ϕ_2
a^t	coeficiente del término temporal ($\rho V/\Delta t$)
a^τ	coeficiente de relajación inercial (o falso paso temporal) ($\rho V/\Delta\tau$)
b	vector del término fuente del sistema algebraico
C_S	constante de Smagorinsky en el modelo de LES
<i>D</i>	longitud característica del problema
E_{np}	eficiencia del cálculo paralelo
\dot{m}_{nb}	flujo másico a través de la cara <i>nb</i>
f_x	fuerza de presión en la dirección <i>x</i>
g	vector aceleración de la gravedad
L_r	longitud de recirculación
<i>np</i>	número de procesadores
<i>Nu</i>	número de Nusselt
<i>p</i>	presión
P_r	número de Prandtl
<i>q</i>	orden del esquema numérico
R	vector residuo en el sistema algebraico
<i>Ra</i>	número de Rayleigh
<i>Re</i>	número de Reynolds
RE_{np}	eficiencia reducida del cálculo paralelo
<i>s</i>	<i>speed-up</i>
<i>S</i>	fuente en la ecuación de convección-difusión discretizada
S_{ij}	componente <i>ij</i> del tensor de velocidad de deformación
<i>St</i>	número de Strouhal
<i>t</i>	tiempo

T	temperatura
u, v, w	componentes del vector velocidad
u^{MI}	corrección MI para u
\hat{u}	pseudo-velocidad
U	velocidad característica del problema
v_i	componente i del vector velocidad
V	volumen de la celda
x, y, z	componentes del vector espacial
x_i	componente i del vector espacial

Caracteres griegos

α	relajación lineal
β^t	a^t/a ; coeficiente MI del paso de tiempo real
β^τ	a^τ/a ; coeficiente MI de relajación inercial o falso paso temporal
C_D	coeficiente de arrastre
C_L	coeficiente de sustentación
C_P	coeficiente de presión $(p - p_0)/(1/2\rho AU^2)$
Δ	anchura del filtro en el modelo LES
Δt	tamaño del paso temporal real
$\Delta \tau$	tamaño del falso paso temporal
Δx	anchura de la celda en dirección x
$\Delta \Phi$	vector corrección en el sistema algebraico
ϵ	parámetro adimensional de variación de temperatura
Γ	coeficiente de difusión
κ	coeficiente de difusión térmica
ϕ	variable incógnita genérica
$\overline{\phi}$	variable incógnita filtrada según el modelo LES
ϕ'	fluctuación de una variable genérica respecto a su valor promediado en el tiempo
ϕ''	fluctuación de una variable genérica respecto a su valor promediado en fase
Φ	vector de incógnitas del sistema algebraico
λ	coeficiente geométrico de interpolación lineal
μ	viscosidad
ρ	densidad
τ'_{ij}	componente ij del tensor de esfuerzos
θ	temperatura adimensional
ω	vorticidad

Subíndices

nb	cara vecina
NB	nodo vecino
w, e, n, s, h, b	cara oeste, este, norte, sur, alta, baja
W, E, N, S, P	nodo oeste, este, norte, sur, propio
0	valores de referencia

Superíndices

k	índice de iteración exterior
L	relajación lineal
n	índice de paso de tiempo
r	relajación unificada

Acrónimos

$ChMI$	Interpolación del Momento de Choi
CMI	Interpolación Compacta del Momento
CS	Esquema Convectivo
GCI	Índice de Convergencia de la Malla
$HOCS$	Esquema Convectivo Alto Orden
MMI	Interpolación Modificada del Momento
OMI	Interpolación Original del Momento
SMI	Interpolación del Momento de Shen y colaboradores
$YOMI$	Interpolación del Momento de Yu <i>et al.</i> sin relajación ni término transitorio
YMI	Interpolación del Momento de Yu <i>et al.</i>

Símbolos especiales

$[\odot]_{nb}$	interpolación lineal de \odot desde nodos adyacentes a la cara compartida
$\langle \odot \rangle$	variable promediada en el tiempo
$[\odot]$	variable promediada en fase
$\underline{\triangleright}$	aproximado como

Capítulo 1

Introducción general

La simulación acaso no es ni teoría ni experimento sino una tercera aproximación a la realidad a punto de renovar el mismo método científico con tres dialécticas (experiencia-simulación, teoría-simulación y experiencia-teoría).

- Jorge Wagensberg

Este trabajo de investigación se enmarca en el campo de la Fluidodinámica Computacional (CFD, de sus siglas en inglés), que engloba la resolución numérica de las ecuaciones que rigen el movimiento de los fluidos con el fin de obtener, para un problema particular (definido por unas condiciones iniciales y de contorno), el campo solución discreto (es decir, el valor de las variables en cada uno de los nodos que forman la malla computacional, en cada paso del tiempo).

En este capítulo se exponen las razones generales que motivaron este trabajo y los objetivos concretos planteados, junto con una breve exposición del estado del arte en la materia. Se presenta una descripción más detallada de cada campo en capítulos posteriores.

1.1. Motivación

La Fluidodinámica Computacional ha experimentado una gran evolución desde sus inicios (en los años 60), con aplicaciones reducidas al ámbito académico y conocida por un escaso número de expertos, hasta convertirse en una herramienta de alcance industrial, ampliamente utilizada (y quizá ya imprescindible) en el diseño y análisis de dispositivos de ingeniería. A esta rápida expansión contribuyeron tanto el crecimiento de la potencia de los recursos computacionales (y su abaratamiento) como el desarrollo

de algoritmos numéricos para resolver las ecuaciones de manera eficiente y con un bajo requerimiento de memoria, haciendo viable la simulación de configuraciones realistas. El punto de inflexión lo marcó, quizá, la publicación en 1972 del primer método segregado para resolver las ecuaciones del flujo incompresible (Patankar y Spalding [84]), junto con el desarrollo de métodos de discretización para mallas complejas (años 80); finalmente, la aparición de códigos comerciales (FLUENT, CFX, etc.) ‘popularizó’ definitivamente la CFD como herramienta industrial.

En la última década este campo está experimentando una nueva transformación, esta vez propiciada por la expansión en la disponibilidad de memoria computacional y por el progreso en los métodos iterativos para resolver sistemas lineales. El hecho de que los requerimientos de memoria sean cada vez menos un cuello de botella y de que el patrón de llenado de la matriz de coeficientes pueda ser más complejo ha conducido a un replanteamiento de los algoritmos tradicionales, diseñados en el marco de los recursos computacionales y numéricos disponibles en la época en la que se desarrollaron; además, conforme se extiende el uso de la CFD en el campo industrial, también crecen sus exigencias. Se requieren códigos eficientes y robustos, capaces de resolver con precisión y fiabilidad fenómenos físicos complejos en un tiempo razonable y evitando (en la medida de lo posible) la presencia de parámetros numéricos libres a elegir por el usuario en función de su experiencia. Puesto que los métodos completamente acoplados e implícitos pueden en principio satisfacer estas necesidades (a costa de penalizar en memoria), se dedican actualmente importantes esfuerzos a su desarrollo (ésta es también la visión expuesta en el artículo publicado en 2007 por Acharya *et al.* [1] en un número especial de la revista *Journal of Heat Transfer-Transactions of ASME* en honor del Profesor Patankar). El presente trabajo se enmarca en esta novedosa línea de investigación.

1.2. Estado del arte

El método de discretización, las variables incógnita, la distribución de dichas variables en la malla computacional o el algoritmo para resolver el sistema algebraico resultante de la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes presentan diversas opciones entre las que elegir en el desarrollo de un código de Fluidodinámica Computacional.

Mallas decaladas y colocalizadas

En este trabajo se usa el método de discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes de volúmenes finitos, basado en una partición del dominio del problema en pequeños volúmenes de control (o celdas) y la aplicación de las ecuaciones de conservación a cada celda. Una elección clave en el procedimiento de discretización es la disposición de las variables en la malla computacional. Habitualmente se usan dos métodos: malla colocalizada y malla decalada (una comparación detallada de ambos métodos se encuentra en [85]). El primero puede considerarse como la opción ‘natural’ ya que el valor de todas las incógnitas es almacenado en el centro de las celdas. Sin embargo, dicha disposición presenta una desventaja importante cuando se resuelve una gran mayoría de flujos: puesto que sólo el gradiente de presión, y no directamente la presión, aparece en las ecuaciones de cantidad de movimiento, su discretización colocalizada puede desacoplar la presión y la velocidad en una celda, resultando en campos de presión oscilatorios, conocidos como campos tipo ‘tablero de ajedrez’ (en una malla estructurada y rectangular, por ejemplo, los gradientes de presión entre las celdas pertenecientes a las filas impares son correctos y también lo son entre las de las pares; el nivel absoluto de la presión en un grupo de celdas respecto al otro está, en cambio, desplazado). Por esta razón, la alternativa de malla decalada se usa con frecuencia en dominios cartesianos. En este modelo, las componentes de velocidad se desplazan a las correspondientes caras de la celda, mientras que los valores de la presión (y, en su caso, otras variables transportadas, como la temperatura) se mantienen en el centro de la celda, consiguiendo de esta manera un fuerte acoplamiento entre la velocidad y la presión. La extensión de este algoritmo a geometrías complejas, sin embargo, no es directa. Así, por ejemplo, Zang *et al.* [117] discuten diversas elecciones para las componentes de la velocidad (cartesianas o covariantes) sobre mallas curvilíneas y decaladas e informan de dificultades en la implementación de todas ellas debido a un excesivo gasto computacional, a la complejidad en la discretización o a la pérdida de un acoplamiento fuerte entre velocidad y presión. Además, puesto que el modelo decalado debe manejar cuatro mallas diferentes (en 3D), la implementación de técnicas multi-malla para la aceleración de la convergencia del procedimiento iterativo de resolución del sistema no lineal de ecuaciones es una tarea ardua.

Un modelo alternativo, que puede ser considerado como una combinación entre la disposición colocalizada y decalada de las variables, fue propuesto por Rhie and Chow [92]. Se retiene la simplicidad de las mallas colocalizadas almacenando todas las incógnitas (tanto las componentes cartesianas de la velocidad como la presión y otros escalares) en el centro de las celdas.

Además, unas nuevas variables, las velocidades de convección (*i.e.* aquellas involucradas en el cálculo del flujo de masa a través de las caras de las celdas), son definidas en la correspondiente cara de la celda y se calculan usando una interpolación especial (llamada Interpolación del Momento¹) con el propósito de conseguir un acoplamiento fuerte entre la velocidad y la presión en cada nodo (ver Figura 2.1, más adelante). Dicha interpolación se basa en la formulación de una ecuación de cantidad de movimiento discretizada en la cara de la celda, de tal forma que el cálculo del gradiente de presión implica valores de presión en los nodos adyacentes a la cara y, consecuentemente, en el propio nodo. Sin embargo, el modelo de Rhie and Chow presenta algunas inconsistencias y las soluciones obtenidas pueden depender del factor de relajación o del paso de tiempo utilizado ([65], [74], [18], [115]). La única mejora encontrada en la bibliografía de la Interpolación Original del Momento que evita de manera eficaz estas indeseables dependencias de la solución es la formulación presentada por Yu *et al.* [116], escasamente utilizada debido a su compleja implementación.

Algoritmo de resolución

Respecto a la manera de resolver las ecuaciones discretizadas, los algoritmos de CFD se clasifican frecuentemente en dos grandes grupos: métodos basados en la presión y métodos basados en la densidad [114]. Históricamente, los métodos basados en la presión se propusieron para resolver flujos incompresibles, mientras que los métodos basados en la densidad se desarrollaron principalmente en el campo de la aeronáutica y se dedicaron a la resolución de flujos en régimen transónico o hipersónico. El carácter hiperbólico de las ecuaciones que gobiernan el flujo compresible permite resolver el problema usando un esquema explícito de integración temporal, avanzando las variables dependientes en el tiempo a partir de un campo inicial. La densidad es la variable dependiente de la ecuación de continuidad (donde aparece la derivada temporal de dicha variable) y una ecuación de estado relaciona la densidad con la presión. En flujos incompresibles, en cambio, la relación entre densidad y presión es débil, y el papel que representa la ecuación de continuidad se reduce al de una mera ligadura para la presión, de forma que cuando los valores de los gradientes de presión introducidos en las ecuaciones de cantidad de movimiento son los correctos, las velocidades obtenidas satisfacen el criterio de conservación de la masa. Los métodos basados en la presión superan las dificultades numéricas asociadas a esta ausencia de

¹El nombre original *Momentum Interpolation* usado en inglés ha sido traducido como *Interpolación del Momento*, aunque quizá el término *cantidad de movimiento* es utilizado con más frecuencia en español para referirse al momento lineal.

una ecuación para la presión mediante la resolución segregada (o secuencial, desacoplada) de cada ecuación de conservación: se deduce una ecuación de corrección de la presión a partir de la ligadura de continuidad y se lleva a cabo un proceso iterativo entre las soluciones de cada ecuación hasta que se alcanza un campo de velocidades con divergencia nula en la convergencia. Son algoritmos implícitos, donde habitualmente se resuelve cada ecuación mediante un método iterativo para ecuaciones lineales, y cuya convergencia depende de la dominancia de la diagonal principal (una condición suficiente). Acharya *et al.* presentan una revisión de la evolución histórica de los métodos basado en la presión (desde los años 70 hasta la actualidad) en [1].

Existen algunos tipos de flujos, sin embargo, cuyas características no pertenecen claramente a ninguno de los dos grupos. Este es el caso, por ejemplo, de flujos en los que varía la densidad debido a fuertes efectos térmicos (como ocurre en combustión) o configuraciones en las que el flujo presenta un comportamiento subsónico en unas zonas y supersónico en otras (como es el caso en tuberías convergentes y divergentes). En el primer grupo la aplicación de métodos segregados puede deteriorar la eficiencia o robustez del procedimiento de resolución: aunque la técnica conocida como relajación ayuda a suavizar las sucesivas actualizaciones de las variables dependientes, conseguir la convergencia del método iterativo puede resultar difícil en problemas con fuerte acoplamiento entre las variables físicas. Por otra parte, los esquemas de tiempo explícito hacen que los métodos basados en la densidad sean muy ineficientes cuando resuelven flujos compresibles a bajo número de Mach debido a la gran disparidad de escalas existente (generalmente) entre la velocidad acústica y la de propagación convectiva. Criterios de estabilidad del método numérico imponen pasos de tiempo del orden del tiempo de residencia de la onda acústica, y éstos son prohibitivamente pequeños para capturar las propiedades físicas del flujo medio.

Si bien a lo largo de los años se han propuesto diferentes mejoras en ambas clases de algoritmos con el fin de extender su rango de aplicabilidad, los planteamientos iniciales para su desarrollo (basados en el requisito de un bajo consumo de memoria y en las limitaciones de los métodos iterativos lineales) se han quedado en cierta medida obsoletos debido, por un lado, a la fuerte expansión de los recursos computacionales (cálculos masivamente paralelos, en los que la memoria utilizada es cada vez menos el factor limitante) y, por otro lado, al progreso en los métodos iterativos para resolver sistemas lineales. Como se mencionó arriba, en los últimos años se están dedicando importantes esfuerzos al desarrollo de algoritmos unificados, que resuelven acoplada e implícitamente las ecuaciones de Navier-Stokes. El objetivo es conseguir algoritmos eficientes (en tiempo de CPU), robustos y aptos para resolver una amplia variedad de flujos.

Una ventaja importante de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes de una forma acoplada es que la robustez del método no se ve afectada de una manera negativa por la necesidad de tener en cuenta el acoplamiento entre las variables físicas. Sin embargo, este método no ha sido tradicionalmente usado para flujos incompresibles, debido a que la matriz del sistema resultante de la discretización está mal condicionada y la solución numérica del sistema resulta difícil, siendo necesario preconditionar la matriz. Han surgido diferentes estrategias de preconditionamiento, según provenga su desarrollo histórico de métodos basados en la presión o en la densidad. Dentro de los basados en la presión, los intentos iniciales para evitar los ceros en la diagonal principal consistieron en la reordenación de las ecuaciones o en el método de penalización, que incluye el término artificial p/λ (con λ un parámetro a ajustar) en la ecuación de continuidad. Sin embargo, los resultados de estos intentos no fueron satisfactorios: en el primer caso, se requerían técnicas de reordenación demasiado sofisticadas y costosas; en el segundo, aunque el número de iteraciones para alcanzar la convergencia se reducía de una manera importante respecto a las formulaciones segregadas, el coste computacional por iteración era mucho más elevado y en su conjunto resultaba ser un método menos eficiente [82]. Deng *et al.* propusieron una mejora del número de condicionamiento de la matriz con un mayor sentido físico, basada en la deducción de una ecuación de Poisson para la presión desde la ecuación de continuidad ([25],[24]). Su propuesta implicaba la resolución de un conjunto adicional de variables (las llamadas pseudo-velocidades) para implementar la ecuación discretizada de la presión sin incrementar el tamaño de la molécula computacional. Más recientemente, Ammara y Masson compararon una formulación similar con los métodos segregados y encontraron que su modelo era más eficiente, y robusto, para todos los problemas estudiados (flujo laminar) [3].

Por otra parte, el preconditionamiento aplicado en los métodos basados en la densidad para mitigar las dificultades numéricas asociadas a la disparidad de escalas en un flujo compresible a bajo número de Mach, se basa habitualmente en el método conocido como pseudo-compresibilidad [20], consistente en la adición de un término transitorio artificial para la presión en la ecuación de continuidad, viz $(1/\beta)\partial p/\partial t$. Este modelo, sin embargo, puede sufrir falta de robustez ya que se debe elegir, sirviendo como guía la experiencia numérica, un parámetro libre β . Se han propuesto en la literatura modelos alternativos y más sofisticados, basados en la definición de una velocidad pseudo-acústica ($1/\beta = \partial\rho/\partial p = 1/c_\tau$) y una matriz no diagonal de preconditionamiento ([114], [66], [109]). Dicha velocidad pseudo-acústica c_τ puede ser referida a una velocidad tanto global como local, no siendo enteramente satisfactoria ninguna de las dos opciones: la definición de una velocidad global es difícil

en flujos compresibles con múltiples regímenes de número de Mach, mientras que la especificación de una velocidad local apropiada es un tema abierto en torno a las regiones de estancamiento [109], donde dicha velocidad local (y de ahí β) tienden a cero.

Por otro lado, la introducción del término de pseudo-compresibilidad como preconditionador modifica las ecuaciones originales que rigen los flujos no estacionarios. El procedimiento de integración en el tiempo conocido como paso dual se usa habitualmente para obtener soluciones transitorias precisas [99]: el campo de flujo en cada paso de tiempo físico es tratado como un problema estacionario en el pseudo-tiempo, cuya solución convergida proporciona una solución precisa en el tiempo. Este método, implícito en la integración del término temporal real, permite elegir el paso de tiempo de acuerdo con las escalas que gobiernan el flujo; las estrategias para mejorar la convergencia del método numérico se confinan al término artificial.

La resolución implícita del sistema acoplado evita las restricciones en el máximo paso temporal impuestas por la condición de estabilidad numérica; sin embargo, la robustez y eficiencia de los métodos usados para resolver los sistemas resultantes, grandes, pseudo-lineales y acoplados, son esenciales, y aún más, para flujos no estacionarios. En el marco de códigos acoplados desarrollados a partir de métodos basados en la densidad (más abundantes en la literatura que los que provienen de métodos basados en la presión), la linealización de las ecuaciones se lleva a cabo mayoritariamente mediante una aproximación de tipo Newton ([17], [69], [114], [99]). Sin embargo, la reducción del esfuerzo computacional de construir el Jacobiano de la matriz en los métodos de Newton (para estrategias tanto inexactas como aproximadas) y el diseño de preconditionadores robustos para la matriz Jacobiana son temas abiertos ([24], [27]). En el conocimiento de la autora de esta memoria, sólo Deng *et al.* ([25], [24]), y Ammara y Masson en [3] estudian un procedimiento de sustitución sucesiva (Picard) y métodos iterativos lineales para resolver un sistema acoplado. Estos mismos autores llevaron a cabo una comparación con la linealización tipo Newton y no encontraron una tendencia concluyente: el procedimiento tipo Newton requiere menos iteraciones para alcanzar la convergencia, pero es menos robusto y requiere más gasto computacional por iteración, atribuible a la mala condición de la matriz jacobiana.

Simulación de las Grandes Escalas de un flujo turbulento

Un reto importante para esta nueva clase de algoritmos, acoplados e implícitos, es la resolución de flujos turbulentos mediante el modelo de Simulación de las Grandes Escalas (LES). La turbulencia, presente en una gran mayoría de aplicaciones prácticas, es un fenómeno muy complejo que necesita

de modelización para poder ser resuelta en configuraciones realistas. Un mecanismo esencial de la turbulencia es la cascada de energía, por el cual se transfiere energía desde las escalas más grandes (del orden de las dimensiones del problema) hacia escalas más y más pequeñas, hasta un tamaño en el que la disipación viscosa molecular es efectiva (ver, por ejemplo, Pope [88] para una revisión de flujos turbulentos y modelos para su cálculo numérico). Resolver directamente las ecuaciones de Navier-Stokes discretizadas (Simulación Numérica Directa, DNS) capturando este amplio rango de escalas requiere una densidad de malla prohibitiva. Si bien el modelo RANS, basado en el promediado en el tiempo de las ecuaciones de Navier-Stokes ha sido utilizado con éxito en aplicaciones industriales para conocer tendencias y mejorar diseños, la técnica LES es, en la actualidad, la más prometedora. Se basa en la idea de resolver de manera directa únicamente las escalas mayores de la turbulencia y modelizar el efecto de las pequeñas (que consiste, básicamente, en la absorción de energía de las escalas grandes). Aunque, respecto a RANS, las soluciones obtenidas con LES tienen un mayor carácter predictivo (proporciona campos instantáneos) y universal (el comportamiento de las escalas que se modelan, *i.e.* las que pertenecen al rango inercial de la cascada de energía, depende poco del problema particular), su aplicación en problemas prácticos se ha visto algo ralentizada. Por un lado, el diseño de la malla influye de manera importante en los resultados y, además, parece necesario avanzar en los diferentes modelos teóricos para utilizarlos con confianza en mallados complejos; el método necesita ganar por tanto en robustez. Por otro lado, son simulaciones transitorias que requieren una resolución tanto espacial como temporal fina para que las escalas más pequeñas que se resuelven pertenezcan al rango inercial, donde es válido el modelo: son simulaciones, aunque generalmente asumibles, computacionalmente costosas. Debido a esta exigente resolución espacial, se usan por lo general métodos explícitos de integración temporal en LES. Sin embargo, las mallas utilizadas también son finas y la restricción en el paso temporal impuesta por la condición de estabilidad numérica puede ser varios órdenes de magnitud menor que el requerido por consideraciones físicas. Es en este punto donde un algoritmo eficiente, acoplado e implícito, puede reducir el coste computacional de una simulación LES, contribuyendo a su viabilidad en aplicaciones prácticas. En la literatura se encuentran escasos estudios de la ganancia en eficiencia de un método implícito respecto a uno explícito en LES ([2], [57]). En el Capítulo 7 de esta memoria se lleva a cabo una introducción más amplia a este campo.

Por último, además de precisión, eficiencia y robustez (mejores métodos numéricos y modelos físicos), la aplicación industrial necesita que los resultados numéricos sean fiables. Así, instituciones de prestigio han desarrollado protocolos para verificar y validar los códigos de CFD. Es decir, guías para

cuantificar, una vez implementados los modelos físicos y numéricos en un código computacional y eliminadas los fallos en la programación, tanto los errores debidos al modelo físico como los errores debidos a la discretización de las ecuaciones y la resolución del sistema algebraico. Oberkampf y Trucano han revisado recientemente el estado del arte en verificación y validación, y formulan recomendaciones para diseñar experimentos y soluciones numéricas de referencia con los que comparar los resultados obtenidos con un código dado de CFD [79].

1.3. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es contribuir al desarrollo de la nueva clase de algoritmos mediante la propuesta de un nuevo método, con bases sólidas, para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes de manera acoplada e implícita en mallas colocalizadas. Para ello, se plantean los siguientes objetivos concretos:

- Mejorar el modelo original de Interpolación de Momento para evitar las oscilaciones espurias de presión en mallas colocalizadas; se pretende obtener una formulación consistente (es decir, que genere soluciones independientes de la relajación y el paso temporal) y, también, sencilla de implementar.
- Revisar las técnicas de preconditionamiento de los métodos basados tanto en la presión como en la densidad, y buscar un nuevo método acoplado e implícito, que pueda beneficiarse de ambos tipos de técnicas.
- Desarrollar un nuevo código de CFD paralelo (para poder ejecutar casos computacionalmente exigentes) donde implementar y analizar el algoritmo acoplado e implícito propuesto; comprobar el comportamiento del código en tres aspectos: verificación, escalabilidad paralela y optimización en el uso de memoria y tiempo de CPU.
- Estudiar el comportamiento del nuevo algoritmo propuesto en un amplio repertorio de casos utilizados habitualmente para validar los métodos numéricos (configuraciones sencillas, pero que presentan comportamientos complejos del flujo, de tienen interés práctico), analizando tanto la precisión de las soluciones obtenidas como la eficiencia y la robustez del método.
- Aplicar el algoritmo acoplado e implícito a la resolución de un flujo turbulento mediante el modelo de Simulación de las Grandes Escalas

1. Introducción general

(LES), comparando los resultados obtenidos con trabajos experimentales y computacionales previos y estimando la ganancia en eficiencia del método implícito respecto a otro explícito.

Capítulo 2

Ecuaciones que gobiernan el flujo y algoritmo de discretización

Y Dios dijo: que Newton sea.

- Alexander Pope

En este capítulo se presentan las ecuaciones que describen los tipos de flujos resueltos en este trabajo, y el algoritmo de discretización usado para su resolución. Se describen el método de volúmenes finitos con una disposición colocalizada de las incógnitas en la malla y la estrategia conocida como limitador de flujo para construir esquemas convectivos de alto orden con buenas propiedades numéricas. Asimismo, se tratan los esquemas implícitos, multi-punto, para la integración temporal de las ecuaciones en flujos no estacionarios.

2.1. Ecuaciones que gobiernan el flujo

El algoritmo desarrollado en este trabajo se aplica tanto a flujos incompresibles como a flujos compresibles a muy bajo número de Mach. Para modelar estos flujos se utiliza una versión simplificada de las ecuaciones de Navier-Stokes que retienen, no obstante, todos los fenómenos de interés desde el punto de vista de exigencia algorítmica. Estas ecuaciones son las de continuidad y cantidad de movimiento, y una ecuación para la temperatura derivada a partir de la ecuación para la energía. Puesto que la velocidad del flujo es pequeña comparada con la del sonido, se desprecian los efectos del trabajo de las fuerzas de presión y de la disipación viscosa, y se considera variable la densidad (y otras propiedades termodinámicas del fluido), si bien

se supone dependiente únicamente de la temperatura (y no de la presión). Las ecuaciones utilizadas son ¹:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0 \quad ; \quad (2.1)$$

$$\frac{(\partial \rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i v_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau'_{ij}}{\partial x_j} - \rho g_i \quad ; \quad (2.2)$$

$$\frac{(\partial \rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \quad , \quad (2.3)$$

donde g_i es la componente i de la aceleración de la gravedad, κ es un coeficiente de difusión térmica y el calor específico c_p se ha supuesto constante. El tensor de esfuerzos viscosos τ'_{ij} es :

$$\tau'_{ij} = \mu \left\{ \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \right\} \quad , \quad (2.4)$$

siendo μ la viscosidad del fluido.

En los siguientes apartados se describen los procedimientos de discretización usados para transformar estas ecuaciones en derivadas parciales en un sistema algebraico de ecuaciones, apto para ser resuelto numéricamente.

2.2. Algoritmo de discretización sobre mallas colocalizadas

Las variables primitivas (v_i , p y T) se eligen como las incógnitas del sistema y se disponen en la malla siguiendo el modelo de malla colocalizada. Así, la presión p , las componentes cartesianas de velocidad v_i y (si se requiere) otras variables transportadas ϕ son almacenadas en el centro de las celdas. Además, siguiendo el modelo de la interpolación del momento (mencionado en la introducción y descrito en detalle en el Capítulo 3), se define un nuevo conjunto de variables, las llamadas *velocidades convectivas* (velocidades involucradas en el cálculo del flujo de masa a través de las caras), y se almacenan en la cara correspondiente. La Figura 2.1 ilustra (en un ejemplo en 2D, por simplicidad) la notación y la disposición de variables seguida en este trabajo. Se emplean letras mayúsculas para referir a las celdas y minúsculas para sus caras. Las velocidades convectivas están etiquetadas con el superíndice MI (de las siglas en inglés de Interpolación del Momento).

¹Se puede encontrar una deducción razonada de las ecuaciones generales en [54].

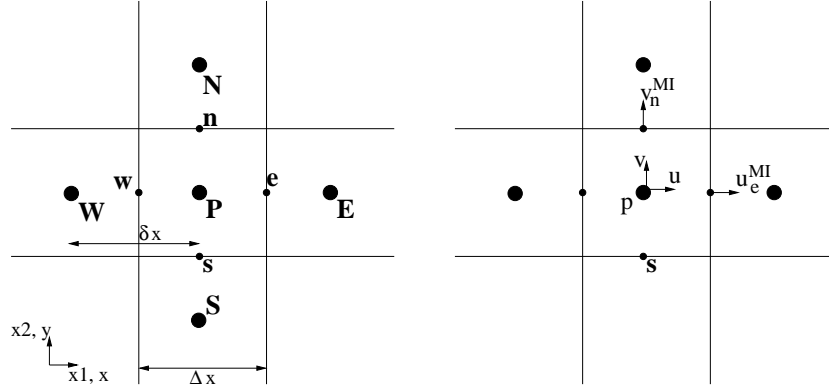


Figura 2.1: Notación en la celda (izquierda) y disposición colocalizada de las variables (derecha)

En el método de volúmenes finitos se discretiza el espacio físico en pequeños volúmenes de control (o celdas) y se aplica en cada uno de ellos las ecuaciones de conservación (Ecuaciones (2.1)-(2.3)), expresadas en su forma integral [29]. Dichas ecuaciones pueden escribirse de forma general como la suma de los términos temporal, convectivo, difusivo y fuente de una variable transportada ϕ :

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \oint_A \rho \phi \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA - \oint_A \Gamma^\phi \text{grad} \phi \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = \int_V S^\phi dV \quad , \quad (2.5)$$

donde V es el volumen de control y A es la superficie que limita dicho volumen, $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector unitario normal a la superficie apuntando hacia afuera, \mathbf{v} es el vector velocidad, ρ es la densidad del fluido, Γ^ϕ es un coeficiente de difusión para el escalar ϕ , y S_P^ϕ engloba todos los términos fuente (o sumideros) de ϕ . Las integrales de superficie y de volumen son calculadas considerando constantes los valores del integrando, e iguales al valor en el centro de la cara o celda, lo que constituye una aproximación de segundo orden de la integral (teorema del punto medio). Este procedimiento conduce a la siguiente ecuación semi-discretizada, escrita para una celda P :

$$\left. \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right|_P V_P + \sum_{nb(P)} \dot{m}_{nb} \phi_{nb} - \sum_{nb(P)} \Gamma_{nb}^\phi A_{nb} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x_{nb}} \right|_{nb} = S_P^\phi V_P \quad . \quad (2.6)$$

El sumatorio en la ecuación anterior recorre todas las caras de la celda, (*i.e.*, $nb = \{w, e, s, n\}$ ² en un problema 2D; ver Figura 2.1), siendo \dot{m}_{nb} el flujo a través de la cara nb : $\dot{m}_{nb} = \rho_{nb} A_{nb} v_{nb}$. Aquí, v_{nb} es la componente de la

² nb , por 'neighbour', 'vecino'.

velocidad (*i.e.*, la componente en la dirección normal a la cara nb). El área de la cara A_{nb} se define como $A_{nb} = A\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{e}}$ (siendo $\hat{\mathbf{e}}$ el vector unitario del sistema de referencia) y es por tanto positiva en las caras este y norte y negativa en las oeste y sur. Por último, x_{nb} representa la dirección normal a la cara nb .

Puesto que la disposición de las incógnitas en la malla sigue el modelo colocalizado, todos los valores en las caras que aparecen en la ecuación discretizada (Ecuación (2.6)) deben ser referidos a valores en los centros de las celdas. A continuación, se describe las aproximaciones utilizadas en este trabajo. Para calcular la derivada espacial de ϕ en el término difusivo, se emplea el esquema de diferencias centradas (CDS), que da lugar para la dirección x , a modo de ejemplo a:

$$\begin{aligned} \partial\phi/\partial x_e &\equiv \partial\phi/\partial x_1|_e \supseteq (\phi_E - \phi_P)/(\Delta x_{1P} + \Delta x_{1E})/2 & ; & & (2.7) \\ \partial\phi/\partial x_w &\equiv \partial\phi/\partial x_1|_w \supseteq (\phi_P - \phi_W)/(\Delta x_{1P} + \Delta x_{1W})/2 & . & & \end{aligned}$$

El símbolo \supseteq puede ser leído como “calculado como”, o “aproximado como”. Por simplicidad, se empleará x en lugar de x_1 de ahora en adelante donde su uso no sea ambiguo.

Respecto al término convectivo, el flujo másico \dot{m}_{nb} debe satisfacer el balance de masa total en cada celda y es apropiado el uso de una interpolación lineal para las velocidades involucradas en su cálculo³. Sin embargo, es bien conocido que el uso de una interpolación lineal para las variables transportadas ϕ puede conducir a campos con oscilaciones espurias en regiones de gradientes altos [29]. El esquema convectivo *Upwind* tiene en cuenta la dirección del flujo para evitar dichas soluciones sin sentido físico. Este esquema es una aproximación de primer orden que introduce difusión artificial, numérica, en las ecuaciones de transporte y no resulta adecuado para obtener soluciones precisas [56]. En este trabajo se usan esquemas convectivos de alto orden para obtener aproximaciones menos difusivas. De ahora en adelante, la notación ϕ_{nb}^{CS} indicará la interpolación a la cara nb de ϕ siguiendo un determinado esquema convectivo *CS*.

En el caso de las ecuaciones de cantidad de movimiento, el término fuente incluye el gradiente de presión. Dicho término es discretizado como la fuerza de presión sobre la celda en la dirección correspondiente f_{iP} ; para la dirección x , es:

$$f_{xP} \supseteq -(A_w p_w + A_e p_e) \quad . \quad (2.8)$$

³No obstante, para evitar el indeseable desacoplamiento velocidad-presión que ocurre en mallas colocalizadas, se añade una corrección a la interpolación lineal siguiendo el método de interpolación del momento.

Los valores de presión en las caras son entonces aproximados mediante una interpolación lineal entre los nodos adyacentes:

$$p_e \cong \lambda_e p_E + (1 - \lambda_e) p_P \equiv [p]_e \quad . \quad (2.9)$$

Aquí, λ_e es el coeficiente geométrico de interpolación lineal para la cara este, y se ha introducido una nueva notación en el último término para escribir la interpolación lineal de una forma compacta: el símbolo $[\odot]_{nb}$ indica interpolación lineal de la cantidad rodeada, \odot , desde los dos nodos adyacentes al centro de la cara compartida nb . En caso de ser variables las propiedades del fluido (ρ , Γ), se usa también para ellas una interpolación lineal.

Antes de presentar los esquemas de alto orden, es interesante destacar que la interpolación utilizada para la velocidad es diferente en función de su papel en las ecuación de transporte. Así, se usan las velocidades de convección definidas en las caras de las celdas y calculadas de acuerdo con la interpolación del momento (v_{nb}^{MI} ; ver Figura 2.1, derecha) para obtener el flujo másico tanto en las ecuaciones de transporte como en la ecuación de continuidad. Por otro lado, las componentes cartesianas de la velocidad, que son las incógnitas del sistema y están definidas en el centro de las celdas, tienen el papel de una variable transportada y se emplea un esquema convectivo para su interpolación a las caras. Así, por ejemplo, el término convectivo de la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección x se discretiza de la siguiente forma:

$$\sum_{nb(P)} \dot{m}_{nb} v_{nb} \cong \sum_{nb(P)} [\rho]_{nb} A_{nb} v_{nb}^{MI} u_{nb}^{CS} \quad , \quad (2.10)$$

y la ecuación de continuidad como:

$$\sum_{nb(P)} \dot{m}_{nb} \cong \sum_{nb(P)} [\rho]_{nb} A_{nb} v_{nb}^{MI} \quad . \quad (2.11)$$

2.3. Esquemas Convectivos de Alto Orden

Los Esquemas Convectivos de Alto Orden (HOCSs por sus siglas en inglés), al igual que la aproximación *Upwind*, tienen en cuenta la dirección del flujo para calcular los valores en las caras de las variables transportadas. Están diseñados para cumplir los criterios de monotonía (desde los nodos aguas arriba de la posición de la cara en cuestión) y acotación de la función local, criterios que proporcionan una buena resolución cuando existen gradientes abruptos y evitan la aparición de oscilaciones en la solución. En este trabajo

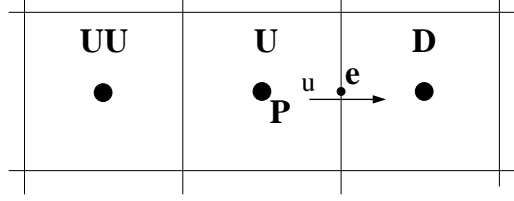


Figura 2.2: Esquema de etiquetado para los nodos involucrados en los Esquemas Convectivos de Alto Orden

se aplica el modelo conocido como *limitador de flujo* para construir dichos esquemas de alta resolución, que permite obtener una expresión general para una amplia variedad de HOCSs ([112]). El cálculo de valores en las caras involucra tres nodos, etiquetados en función de la dirección del flujo (ver Figura 2.2): los dos nodos adyacentes (el nodo aguas arriba U y el nodo aguas abajo D) y un nodo adicional, situado aguas arriba del nodo U (etiquetado UU). Usando esta notación, el valor en la cara de una variable transportada, ϕ_{nb} , en una malla no uniforme se expresa de la siguiente forma [90]:

$$\phi_{nb}^{CS} = \phi_U + \psi_{nb}(\phi_U - \phi_{UU}) \quad (2.12)$$

La función limitadora de flujo ψ_{nb} determina el esquema convectivo elegido, de los que hay disponibles en la literatura una amplia variedad (SMART [35], QUICK [50], NOTABLE [83], Van-Leer [108], etc.). Se puede encontrar un compendio de esquemas en el artículo de Waterson *et al.* [112]). Dicha función representa la parte ‘anti-difusiva’ añadida al esquema de primer orden *Upwind* (donde $\phi_{nb}^{Upwind} = \phi_U$) y depende del ratio r entre la variación de ϕ aguas arriba y abajo de la cara y de dos coeficientes g_U y g_D que incluyen el coeficiente de interpolación lineal para la cara aguas arriba, λ_U , esto es

$$\begin{aligned} r &\equiv (\phi_D - \phi_U)/(\phi_U - \phi_{UU}) & (2.13) \\ g_D &= 0.5 * \lambda_U * (1 + \lambda_U) \\ g_U &= 0.5 * \lambda_U * (1 - \lambda_U) \end{aligned} .$$

En el Apartado 6.5 se compara el comportamiento del esquema convectivo de diferencias centradas (CDS, o interpolación lineal) y el esquema de alto orden SMART en la resolución de un flujo con altos gradientes de velocidad usando una malla con celdas que tienen una relación de aspecto alta. La expresión de la función limitadora de flujo utilizada para implementar el esquema SMART es:

$$\psi_{nb} = \max(0, \min(\beta_1 - 1r, g_D + g_U r, \beta_2)) \quad , \quad (2.14)$$

con $\beta_1 = 3$ y $\beta_2 = 1$.

2.4. Esquemas temporales implícitos

En la solución de flujos no estacionarios es necesario integrar las ecuaciones de transporte en el tiempo además de en el espacio. Como se mencionó en la introducción, los esquemas de tiempo explícitos no son apropiados para la resolución de problemas físicos con un amplio rango de escalas de tiempo (problemas *stiff*) debido a la restricción del paso de tiempo impuesta por criterios de estabilidad del método iterativo. Si el problema transitorio con su valor inicial es expresado de la siguiente manera:

$$\partial\phi/\partial t + f(t, \phi(t)) = 0 \quad ; \quad \phi(t = 0) = \phi_0 \quad , \quad (2.15)$$

donde ϕ es una variable genérica y f representa la ecuación discretizada en el espacio, la aproximación de primer orden implícita (o esquema Euler) consiste en estimar la derivada en el tiempo de la siguiente forma:

$$\partial\phi/\partial t \cong (\phi^n - \phi^{n-1})/(\Delta t) \quad , \quad (2.16)$$

donde n y $n - 1$ son el tiempo actual y anterior (respectivamente) y Δt es el tamaño del paso temporal.

Algunas aplicaciones, sin embargo, requieren integrar en el tiempo con una aproximación mayor que la de primer orden. Los esquemas temporales se agrupan en dos familias principales: multi-punto y multi-etapa. Las aproximaciones multi-punto usan, además de la solución actual, soluciones en pasos de tiempo anteriores; las aproximaciones multi-etapa (como el método Runge-Kutta), en cambio, hacen uso de evaluaciones intermedias entre un punto y el siguiente. En el algoritmo desarrollado en este trabajo, se ha preferido aplicar esquemas multi-punto en la resolución de flujos no estacionarios porque se evitan evaluaciones adicionales y se requiere un menor esfuerzo computacional. Además, la dificultad inherente a las aproximaciones multi-punto de inicializar el procedimiento (en los instantes iniciales, no se dispone de las soluciones previas requeridas para avanzar la solución en el tiempo según la expresión general), es un inconveniente menor en la solución de problemas no estacionarios que surgen por inestabilidades en el flujo (por ejemplo, el desprendimiento periódico de vórtices de Von-Karman tras un obstáculo). En estos casos, el valor de las variables físicas promediadas en el tiempo permanece constante y se descartan las soluciones anteriores al estado estadísticamente estacionario.

Una de las aproximaciones multi-punto de segundo orden más utilizada es el esquema de tres niveles de diferencias centradas hacia atrás (también llamado Euler de segundo orden). La discretización del término temporal según esta aproximación resulta:

$$\partial\phi/\partial t \cong (3\phi^n - 4\phi^{n-1} + \phi^{n-2})/(2\Delta t) \quad . \quad (2.17)$$

En el código desarrollado se ha implementado también el esquema Adams-Moulton de segundo orden. Los métodos Adams-Moulton pertenecen a la categoría multi-punto de dos niveles, y permiten la construcción de aproximaciones de cualquier orden. La expresión general es:

$$\phi^n - \phi^{n-1} \supseteq \sum_{l=0}^{l=k-1} \beta_l f^{n-l} \quad , \quad (2.18)$$

donde β_l son coeficientes que dependen del orden de aproximación k . En el caso del segundo orden ($k = 2$), $\beta_0 = \beta_1 = -0.5$, siendo el esquema resultante equivalente a aplicar la regla del trapecioide en el cálculo numérico de la integral temporal:

$$\phi^n - \phi^{n-1} \supseteq -(f^n + f^{n-1})/(2\Delta t) \quad . \quad (2.19)$$

La aproximación Adams-Moulton de segundo orden es más precisa que el esquema de tres niveles de Euler para un mismo tamaño de paso de tiempo, pero puede ser inestable para problemas no lineales cuando se usan pasos de tiempo grandes (algo habitual en la resolución de problemas *stiff*) [29].

2.5. Sistema algebraico de ecuaciones

La discretización de cada ecuación de conservación resulta en un sistema de ecuaciones algebraico, siendo las incógnitas los valores de las variables dependientes almacenados en el centro de las celdas. En el método propuesto, la ecuación de continuidad y las de cantidad de movimiento son resueltas simultáneamente. Si es el caso y si es apropiado por las particularidades físicas del problema, también se resuelve simultáneamente la ecuación de energía. En este apartado, sin embargo, se describe el sistema acoplado para las incógnitas (v_i, p) , por simplicidad.

En notación matricial, el sistema acoplado se escribe como $\mathbf{A}\Phi = \mathbf{b}$, donde \mathbf{A} es la matriz de coeficientes, Φ es el vector incógnita y \mathbf{b} el vector fuente. En una malla computacional de N nodos, el vector solución tiene $4N$ dimensiones y las incógnitas están ordenadas de la siguiente manera:

$$\Phi = \{u_1, v_1, w_1, p_1; u_2, v_2, w_2, p_2; \dots; u_N, v_N, w_N, p_N\} \quad (2.20)$$

También se puede representar el sistema de ecuaciones acoplado mediante bloques de sub-matrices 4×4 para cada celda P . De esta forma, el vector de

incógnicas se escribe $\Phi_{\mathbf{P}} = \{u, v, w, p\}_P$ y $\mathbf{A}_{\mathbf{P}}$ es:

$$\mathbf{A}_{\mathbf{P}} = \begin{pmatrix} a^{uu} & a^{uv} & a^{uw} & a^{up} \\ a^{vu} & a^{vv} & a^{vw} & a^{vp} \\ a^{wu} & a^{wv} & a^{ww} & a^{wp} \\ a^{pu} & a^{pv} & a^{pw} & a^{pp} \end{pmatrix}_{\mathbf{P}}, \quad (2.21)$$

donde el coeficiente $a^{\phi^1\phi^2}$ proviene de la discretización de la ecuación para la variable dependiente ϕ^1 y contiene términos implícitos de la variable ϕ^2 . En esta sub-matriz $\mathbf{A}_{\mathbf{P}}$ los elementos no nulos fuera de la diagonal principal son debidos al acoplamiento de las ecuaciones (por ejemplo, $a^{up} \neq 0$ ya que la presión aparece en las ecuaciones de cantidad de movimiento). A continuación, a modo de ejemplo, se expresa la ecuación de cantidad de movimiento en dirección x para un problema estacionario:

$$a_P^{uu}u_P + \sum_{NB(P)} a_{NB}^{uu}u_{NB} - f_{xP} = b_P, \quad (2.22)$$

donde los coeficientes de la matriz a^{uu} engloban los términos convectivos y difusivos de la ecuación de transporte y su cálculo relaciona la celda P y todas sus celdas vecinas NB ⁴. $f_{xP} = -(A_w p_w + A_e p_e)$ es el gradiente de presión discretizado, el cual implica a celdas vecinas en la dirección x y da lugar a coeficientes de acoplamiento no nulos ($a^{up} \neq 0$). Por último, b_P representa otros términos fuentes (como, por ejemplo, fuerzas de volumen).

La ecuación de continuidad, por su parte, se expresa de la siguiente manera:

$$\sum_j a_P^{pv_j} v_{jP} + \sum_{NB(P)} a_{NB}^{pv_j} v_{jNB} = 0, \quad (2.23)$$

Los coeficientes $a_{NB}^{pv_j}$ son nulos cuando la dirección en la que se encuentra la celda vecina, respecto a P , no corresponde con la de la componente de la velocidad (es decir, a_{NB}^{pu} incluye dos únicos coeficientes distintos de cero y son a_E^{pu} y a_W^{pu}).

Las dos ecuaciones anteriores conducen al siguiente patrón de llenado de la matriz $\mathbf{A}_{\mathbf{P}}$:

$$\mathbf{A}_{\mathbf{P}} = \begin{pmatrix} a^{uu} & 0 & 0 & a^{up} \\ 0 & a^{vv} & 0 & a^{vp} \\ 0 & 0 & a^{ww} & a^{wp} \\ a^{pu} & a^{pv} & a^{pw} & 0 \end{pmatrix}_{\mathbf{P}}, \quad (2.24)$$

⁴Es interesante destacar que, en las ecuaciones de cantidad de movimientos para la dirección y y z , $a^{uu} = a^{vv} = a^{ww}$.

Una dificultad numérica importante en la resolución acoplada e implícita de las ecuaciones de Navier-Stokes es la mala condición de la matriz: la ecuación de continuidad no contiene explícitamente la incógnita presión p y por tanto algunos elementos de la diagonal principal son cero ($a^{pp} = 0$). Como consecuencia, se debe aplicar preconditionamiento para resolver el sistema; este aspecto del algoritmo numérico será tratado en el Capítulo 4. Previamente y como preparación a la exposición del método de preconditionamiento, se describe la técnica de interpolación del momento usada en este trabajo.

Capítulo 3

Una nueva formulación, compacta, de la interpolación del momento (CMI)

¡Más madera, es la guerra!

- *Groucho Marx*
(*doblado al español*)

La disposición de las incógnitas del sistema algebraico en la malla según el modelo colocalizado es una opción natural, cuyo principal inconveniente respecto a la disposición escalonada (el desacoplamiento velocidad-presión en la celda) puede evitarse aplicando la técnica conocida como interpolación del momento.

La Interpolación del Momento originariamente propuesta por Rhie y Chow [92] (en adelante OMI) presenta, sin embargo, algunas deficiencias. En los métodos iterativos de resolución del sistema de ecuaciones se utiliza con frecuencia relajación para suavizar el cambio en las variables de una iteración a otra y evitar la divergencia. Majumdar [65] y Miller y Schmidt [74] advirtieron que, en caso de aplicar la interpolación del momento en su formulación original, la solución convergida depende del factor de relajación empleado. Posteriormente, Choi [18] encontró que la solución de flujos estacionarios, cuando se resuelven como transitorios (*i.e.* partiendo de una solución inicial y avanzando en el tiempo hasta alcanzar el estado estacionario), también depende del tamaño del paso temporal. Aunque la precisión de los resultados no se ve significativamente afectada, la técnica original puede incluso fallar en su principal objetivo de evitar oscilaciones espurias de la presión cuando se utilizan coeficientes de relajación o tamaños de paso temporal pequeños

[115]. En estos casos, por tanto, es inevitable aplicar una versión mejorada del modelo original.

Majumdar [65] y Miller y Schmidt [74] desarrollaron, separadamente, un método de interpolación del momento que conduce a campos solución independientes del coeficiente de relajación lineal. El esquema propuesto por Choi [18] para flujos no estacionarios, por otro lado, consigue el objetivo de eliminar las oscilaciones espurias en el campo de presión, pero Yu *et al.* [115] mostraron que las soluciones estacionarias y convergidas obtenidas con este esquema dependen todavía del paso de tiempo. Asimismo, el método propuesto por Shen *et al.* [98] para el esquema temporal de tres niveles puede ser considerado, en su aplicación a mallas uniformes, como una extensión natural al segundo orden del esquema de Choi [18] y, por tanto, tampoco es independiente del tamaño de paso de tiempo.

Se ha encontrado en la literatura un único método modificado de la interpolación del momento que evita de manera eficaz la indeseable dependencia de la solución numérica tanto del factor de relajación lineal como del tamaño de paso de tiempo, propuesto por Yu *et al.* [116] (aunque Bergeles utilizó previamente una formulación similar en [52], no justificó su desarrollo ni hizo un estudio sistemático de su comportamiento). En el presente trabajo, se propone un modelo alternativo, que será llamado en adelante Interpolación Compacta del Momento (CMI), y se detallan algunas de las ventajas respecto a la formulación de Yu *et al.* [116]. Dicho método CMI puede acomodar tanto relajación lineal como inercial (o de falso paso temporal) y, para flujos transitorios, puede usarse con esquemas de discretización de orden alto. En este trabajo, se muestra el procedimiento para esquemas de Euler y Adams-Moulton de segundo orden. La independencia de los coeficientes de relajación y del paso de tiempo de la formulación compacta de la interpolación del momento propuesta será mostrada tanto a través del análisis numérico de las ecuaciones (a lo largo de este capítulo) como de experimentos numéricos consistentes en la simulación de casos de validación (en el Capítulo 6). Además, el orden real de la aproximación del esquema temporal de discretización es determinado usando el problema de decaimiento de vórtices de Taylor-Green en 2D, para el cual se dispone de solución analítica.

En este capítulo se presenta un desarrollo detallado de la estrategia de interpolación del momento, comenzando por el algoritmo original OMI. A continuación, se desarrollan los algoritmos modificados propuestos para tener en cuenta ambas formulaciones de la relajación y varios esquemas de integración temporal. Finalmente, se combinan todas las anteriores formulaciones en una única expresión para dar lugar al método de Interpolación Compacta del Momento (CMI) propuesto en este trabajo.

3.1. Interpolación Original del Momento

Esta sección presenta un breve resumen de la técnica de Interpolación Original del Momento (OMI), sobre la que se construye la formulación compacta propuesta en este trabajo. Dicha técnica se puede considerar el método estándar de interpolación del momento para resolver flujos estacionarios sin usar relajación.

Es bien conocido que el débil acoplamiento entre velocidad y presión que resulta de la discretización de las ecuaciones sobre mallas colocadas no se manifiesta sobre mallas decaladas, donde los valores de la presión son almacenados en el centro de las celdas mientras que las incógnitas velocidad son escalonadas a las caras. En este caso, la discretización por volúmenes finitos de la fuerza de presión en la ecuación de cantidad de movimiento (o velocidad) engloba un patrón (*stencil*) de malla pequeño, ya que la evaluación de este término en la cara involucra incógnitas presión en el centro de las celdas adyacentes, que están separadas por una distancia $1\delta x$ (ver Figura 2.1). En el modelo colocados, en cambio, tanto las velocidades como la presión se disponen en el centro de las celdas y la fuerza de presión involucra valores en las caras que se deben interpolar dando lugar a un patrón de malla más grande ($2\delta x$, si se usa una interpolación lineal). La ecuación de velocidad en un nodo no está directamente conectada con la presión en el mismo nodo (en una malla uniforme; en una malla no uniforme resulta un acoplamiento débil, en cualquier caso), y este desacoplamiento es el causante de los campos de presión de ‘tipo ajedrez’.

La estrategia propuesta por Rhie y Chow [92] para remediar esta deficiencia de las mallas colocadas trata de imitar la situación de las mallas decaladas calculando la velocidad en las caras no a través de una interpolación directa desde los nodos vecinos, sino usando una formulación de la ecuación de cantidad de movimiento en la cara de la celda. Esta estrategia de interpolación del momento será descrita a continuación para la velocidad en la cara este.

La ecuación de cantidad de movimiento discretizada en dirección x , que es la ecuación de transporte para la velocidad u , se escribe para un flujo estacionario y sin introducir relajación,

$$a_P u_P + \sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} = f_{xP} + b_P \quad , \quad (3.1)$$

donde las incógnitas u son evaluadas en el centro de las celdas. Los símbolos a_{NB} y a_P ¹ incluyen coeficientes de convección y difusión, f_{xP} corresponde al

¹Los superíndices uu (indican la ecuación y la variable asociada al coeficiente, ver

gradiente de presión y b_P representa (otros) términos fuente. El gradiente de presión se discretiza como la fuerza de presión sobre la celda P en la dirección x :

$$f_{xP} = -(A_w p_w + A_e p_e) \quad . \quad (3.2)$$

La estrategia de la Interpolación Original del Momento (OMI) comienza obteniendo el valor de la componente de la velocidad en el nodo P , u_P , a partir de la Ecuación (3.1):

$$u_P = -\frac{\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P}{a_P} + \frac{f_{xP}}{a_P} = \hat{u}_P + \frac{f_{xP}}{a_P} \quad . \quad (3.3)$$

El último miembro muestra una descomposición de las contribuciones de la velocidad, usada frecuentemente, en dos partes: la primera, \hat{u}_P , a veces llamada pseudo-velocidad, incluye los efectos de convección y difusión desde celdas vecinas, y otras fuerzas (*e.g.* fuerzas de volumen) que no son debidas a la presión; y el segundo término f_{xP}/a_P representa la contribución de la fuerza de presión.

Usando una celda imaginaria alrededor del centro de la cara este, se puede escribir una ecuación análoga a la anterior para la velocidad en la cara este:

$$u_e = \hat{u}_e + \frac{f_{xe}}{a_e} \quad . \quad (3.4)$$

Aquí, \hat{u}_e y a_e son variables nuevas (*i.e.* no pueden ser calculadas inmediatamente en la discretización original), mientras que f_{xe} se interpreta como la fuerza de presión sobre una celda desplazada y centrada en la cara este, y se calcula usando una ecuación similar a la Ecuación (3.2):

$$f_{xe} = -(A_P p_P + A_E p_E) \quad , \quad (3.5)$$

donde la presión en los nodos son incógnitas del problema algebraico. Este término f_{xe} en la ecuación de arriba es crucial para la estrategia de la interpolación del momento ya que implica un patrón de malla pequeño (δx) y, por tanto, se consigue un acoplamiento fuerte entre la velocidad en la cara y la presión en los nodos P y E .

La pseudo-velocidad en la cara es calculada en el método original de Rhie y Chow [92] usando una interpolación lineal:

$$\hat{u}_e \cong [\hat{u}]_e \quad , \quad (3.6)$$

Apartado 2.5) han sido eliminados del coeficiente de la matriz por simplicidad; en el resto de la memoria, allí donde no haya confusión posible, tampoco se escribirán estos superíndices.

sustituyendo la pseudo-velocidad \hat{u}_P de la Ecuación (3.3) y usando una ecuación similar para obtener \hat{u}_E . La pseudo-velocidad \hat{u}_e en la cara calculada así es entonces introducida en la Ecuación (3.4) resultando en la siguiente expresión para la velocidad en la cara según la OMI:

$$u_e^{OMI} = [u]_e - \left[\frac{f_x}{a} \right]_e + \frac{1}{a_e} f_{xe} \quad . \quad (3.7)$$

Esta interpolación en la cara puede ser por tanto interpretada como la composición de una interpolación lineal de valores en los nodos vecinos y un término de corrección: $u_e^{OMI} = [u]_e + u_e'^{OMI}$, el cual está dado por

$$u_e'^{OMI} = \frac{1}{a_e} f_{xe} - \left[\frac{f_x}{a} \right]_e \quad . \quad (3.8)$$

El termino $1/a_e$ es desconocido en la discretización usada, y es aproximado de nuevo mediante una interpolación lineal:

$$\frac{1}{a_e} \supseteq \left[\frac{1}{a} \right]_e \quad . \quad (3.9)$$

Miller y Schmidt [74] mostraron que la velocidad en la cara corregida por el modelo OMI retiene el segundo orden de aproximación de la interpolación lineal.

Para terminar con la exposición acerca de la técnica de interpolación original del momento, se describen algunas interpretaciones de dicha técnica encontradas en la literatura. La corrección $u_e'^{OMI}$ puede ser vista como un término de disipación que elimina las oscilaciones no realistas de la presión ([51], [91]). Si la interpolación lineal de f_x/a es aproximada como:

$$\left[\frac{f_x}{a} \right]_e \supseteq \frac{1}{a_e} [f_x]_e \quad , \quad (3.10)$$

entonces el término de corrección resulta:

$$u_e'^{OMI} = \frac{1}{a_e} (f_{xe} - [f_x]_e) \quad , \quad (3.11)$$

y, en el caso de mallas uniformes:

$$\begin{aligned} u_e'^{OMI} &= \left[\frac{1}{a} \right]_e A_x [(p_P - p_E) - 0.25(p_W - p_E) - 0.25(p_P - p_{EE})] \leq \\ &\leq \left[\frac{1}{a} \right]_e \left. \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} \right|_e \quad . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Así, el término adicional representa un operador de discretización de una disipación, el cual decrece cuadráticamente con el refinamiento de malla. Puede controlarse la cantidad de disipación introducida mediante un coeficiente: $u_e^{OMI} = [u]_e + Cu_e^{OMI}$. Dicho coeficiente C varía normalmente entre 0.5 y 1, pudiendo elegirse de modo que sea más pequeño en regiones con gradientes de presión grandes [51].

Por su parte, Papageorgakopoulos *et al.* [81] han propuesto una mejora del método de interpolación del momento para aumentar su precisión basada en la interpretación de la velocidad en la cara de acuerdo con la Ecuación (3.4) (*i.e.* como la suma de la pseudo-velocidad en la cara y un término que representa la fuerza de presión sobre la celda decalada). Su propuesta consiste en usar una aproximación de mayor orden que la interpolación lineal para calcular las pseudo-velocidades en la cara. Dichos autores analizan, concretamente, una interpolación cuadrática de polinomios y encuentran que los resultados de su método son más precisos que la técnica original en un problema típico de validación (la cavidad con una pared móvil) usando mallas gruesas.

3.2. Modificación de la Interpolación del Momento para tener en cuenta relajación lineal e inercial

El método original de interpolación del momento conduce a soluciones convergidas que dependen del factor de relajación empleado en el proceso iterativo de resolución del sistema no lineal. Majumdar [65] y Miller y Schmidt [74] propusieron, separadamente, un método de Interpolación Modificada del Momento (MMI) que evita este inconveniente. Dichos autores siguen el procedimiento descrito en el apartado precedente, e incluyen explícitamente los términos de relajación en las ecuaciones de cantidad de movimiento discretizadas de partida. En este apartado su método, desarrollado para la relajación lineal, es modificado y extendido a la llamada relajación inercial (o de falso paso temporal). Este tipo de relajación consiste en introducir un falso término transitorio en las ecuaciones de Navier-Stokes, y tiene la ventaja práctica de permitir elegir el parámetro de relajación, *viz* el tamaño del falso paso temporal, basándose en criterios físicos (*e.g.* como una fracción de un tiempo característico del problema físico). El procedimiento de la interpolación del momento para relajación inercial puede extenderse directamente a un problema transitorio (real), aspecto discutido en el siguiente apartado.

Además, al final de esta sección se presenta una formulación única para tener en cuenta tanto la relajación lineal como la inercial.

Análogamente al método propuesto por Majumdar [65] o Miller y Schmidt [74], la derivación del método modificado desarrollado en este trabajo parte de las ecuaciones de cantidad de movimiento conteniendo explícitamente el término pseudo-transitorio. Este término es, si se añade al lado derecho de la ecuación discretizada:

$$\rho \frac{u_P^{k-1} - u_P}{\Delta\tau} V_P = a_P^\tau (u_P^{k-1} - u_P) \quad , \quad (3.13)$$

donde $k-1$ es la iteración previa, $\Delta\tau$ es el falso paso temporal (el parámetro de relajación ajustable), y se ha introducido $a_P^\tau = \rho V / \Delta\tau$ por conveniencia. Insertando el nuevo término en la ecuación discretizada (Ecuación (3.1)) y reagrupando, se obtiene:

$$a_P^\tau u_P + a_P u_P + \sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P - f_{xP} = a_P^\tau u_P^{k-1} \quad . \quad (3.14)$$

Al igual que en el modelo OMI, u_P se deduce de la ecuación anterior y se agrupan los términos que no son influidos por la presión en la definición de la pseudo-velocidad:

$$\begin{aligned} u_P &= -\frac{1}{1 + \beta_P^\tau} \frac{\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P}{a_P} + \frac{1}{1 + \beta_P^\tau} \frac{f_{xP}}{a_P} + \frac{\beta_P^\tau}{1 + \beta_P^\tau} u_P^{k-1} = \quad (3.15) \\ &= \hat{u}_P + \frac{1}{1 + \beta_P^\tau} \frac{f_{xP}}{a_P} + \frac{\beta_P^\tau}{1 + \beta_P^\tau} u_P^{k-1} \quad , \end{aligned}$$

donde $\beta_P^\tau = a_P^\tau / a_P$. A continuación, se asume una expresión análoga para la velocidad en la cara, u_e :

$$u_e = \hat{u}_e + \frac{1}{1 + \beta_e^\tau} \frac{f_{xe}}{a_e} + \frac{\beta_e^\tau}{1 + \beta_e^\tau} u_e^{k-1} \quad (3.16)$$

Aproximando, como anteriormente, $\hat{u}_e \cong [u]_e$ e introduciendo los valores de u_P y u_E obtenidos de la Ecuación (3.15) y una equivalente para el nodo Este, resulta:

$$\begin{aligned} u_e^{MMI} &= [u]_e + \frac{1}{1 + \beta_e^\tau} \frac{1}{a_e} f_{xe} - \left[\frac{1}{1 + \beta^\tau} \frac{f_x}{a} \right]_e + \quad (3.17) \\ &+ \frac{\beta_e^\tau}{1 + \beta_e^\tau} u_e^{k-1} - \left[\frac{\beta^\tau}{1 + \beta^\tau} u^{k-1} \right]_e \quad . \end{aligned}$$

La velocidad en la cara en la iteración anterior (u_e^{k-1}) no se incluye en la definición de la pseudo-velocidad, y se evalúa usando su valor MI-correctado calculado y almacenado previamente; esto favorece, como señalaron Shen *et al.* [98], la consistencia de las ecuaciones de la velocidad en las caras y evita las oscilaciones espurias en el campo de presión con tamaños pequeños de paso temporal.

La siguiente etapa en el procedimiento propuesto es usar para calcular $1/a_e$ la misma aproximación que en el método OMI (*viz* Ecuación (3.9)), y adicionalmente $\beta_e^\tau \triangleright \lfloor \beta^\tau \rfloor_e$ y

$$\left[\frac{1}{1 + \beta^\tau} \frac{f_x}{a} \right]_e \triangleright \frac{1}{1 + \lfloor \beta^\tau \rfloor_e} \left[\frac{f_x}{a} \right]_e \quad ; \quad \left[\frac{\beta^\tau u^{k-1}}{1 + \beta^\tau} \right]_e \triangleright \frac{\lfloor \beta^\tau \rfloor_e \lfloor u^{k-1} \rfloor_e}{1 + \lfloor \beta^\tau \rfloor_e} \quad . \quad (3.18)$$

Una vez que estas aproximaciones han sido introducidas en la Ecuación (3.17), se puede expresar la velocidad en la cara según la MMI como una interpolación lineal más un término de corrección:

$$u_e^{MMI} = \lfloor u \rfloor_e + u_e^{MMI} \quad , \quad (3.19)$$

La expresión para corrección u_e^{MMI} es, tras hacer los cálculos algebraicos simples descritos arriba:

$$u_e^{MMI} = \frac{1}{1 + \lfloor \beta^\tau \rfloor_e} u_e^{OMI} + \frac{\lfloor \beta^\tau \rfloor_e}{1 + \lfloor \beta^\tau \rfloor_e} u_e^{MMI^{k-1}} \quad . \quad (3.20)$$

Para derivar esta ecuación, se ha usado la misma identidad para la iteración $k - 1$ que para la k , *viz*: $u_e^{MMI^{k-1}} = \lfloor u \rfloor_e^{k-1} + u_e^{MMI^{k-1}}$.

De esta forma, la corrección MMI resultante está compuesta por dos términos: el primero involucra u_e^{OMI} , la corrección según el modelo original OMI (Ecuación (3.8)), y el segundo término es una corrección adicional que incluye $u_e^{MMI^{k-1}}$, la propia corrección MMI en la iteración anterior. Así expresada, la velocidad en la cara corregida por la MMI es, en la convergencia ($u_e^{MMI} = u_e^{MMI^{k-1}}$), independiente del falso paso temporal (o coeficiente de relajación); además, las aproximaciones adicionales no comprometen la precisión de la solución ya que se recupera la corrección OMI en la convergencia.

Se puede deducir una expresión única de la MMI que tenga en cuenta tanto la relajación inercial como la lineal incluyendo ambas en la discretización original de la ecuación de cantidad de movimiento de la siguiente manera:

$$a_P^\tau u_P + a_P u_P + \alpha^L \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P \right) - \alpha^L f_{xP} = (1 - \alpha^L) a_P u_P^{k-1} + a_P^\tau u_P^{k-1} \quad , \quad (3.21)$$

donde α^L es el coeficiente de relajación lineal, una constante que varía desde 0 (donde se congela la solución) a 1 (cuando no se aplica relajación). En cambio, el coeficiente de relajación inercial, β_P^τ tal como se define arriba no es igual para todas las celdas y varía entre cero (sin relajación) e infinito (solución congelada). Es sencillo demostrar que la ecuación precedente puede ser reformulada usando un único coeficiente de relajación, β_P^r (nótese el uso de r en lugar de τ), que agrupa los dos tipos:

$$(1 + \beta_P^r)a_P u_P + \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P \right) - f_{xP} = \beta_P^r a_P u_P^{k-1} \quad , \quad (3.22)$$

donde

$$\beta_P^r = \frac{1 + \beta_P^\tau - \alpha^L}{\alpha^L} \quad . \quad (3.23)$$

La Ecuación (3.22) es formalmente equivalente a la ecuación de cantidad de movimiento discretizada con relajación inercial y un coeficiente β_P^r , de modo que puede interpretarse dicho parámetro como la forma inercial de la relajación total. De forma similar, se define un coeficiente α^r que representa la forma lineal de la relajación total como $\alpha_P^r = 1/(1 + \beta_P^r) = \alpha^L/(1 + \beta_P^\tau)$, y conduce a la siguiente ecuación discretizada para la relajación lineal:

$$\frac{1}{\alpha_P^r} a_P u_P + \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P \right) - f_{xP} = \frac{1 - \alpha_P^r}{\alpha_P^r} a_P u_P^{k-1} \quad (3.24)$$

A partir de esta expresión, se obtiene una corrección unificada del método MMI para relajación reemplazando β^τ por β^r en la Ecuación (3.20). El resultado es:

$$u_e'^{MMI} = \frac{\alpha^L}{1 + [\beta^\tau]_e} u_e'^{OMI} + \frac{1 + [\beta^\tau]_e - \alpha^L}{1 + [\beta^\tau]_e} u_e'^{MMI^{k-1}} \quad . \quad (3.25)$$

En la convergencia $u_e'^{MMI} = u_e'^{MMI^{k-1}}$, los coeficientes α y β son eliminados de la ecuación y se recupera la corrección OMI. Por tanto, la solución final no depende de los parámetros de relajación. Por otro lado, cuando no se aplica relajación inercial, $\beta^\tau = 0$ y se obtiene la misma expresión propuesta por Majumdar [65] y Miller y Schmidt [74].

3.3. Modificación en la Interpolación del Momento para flujos no estacionarios

En este apartado se describe una modificación del método OMI para problemas transitorios. Se consideran las tres integraciones implícitas del tér-

mino temporal descritas en el Apartado 2.4. Primero, se presenta la estrategia propuesta en este trabajo para la aproximación Euler de primer orden y, a continuación, se muestra su extensión al esquema Euler de segundo orden de tres niveles. Finalmente, se consideran también los métodos Adams-Moulton, una categoría de aproximaciones multi-punto que permite la construcción de esquemas de tiempo de cualquier orden de aproximación.

3.3.1. Esquema temporal Euler de primer orden

El procedimiento desarrollado en el apartado anterior para obtener un modelo de interpolación del momento con relajación inercial puede emplearse para la aproximación Euler de primer orden puesto que, en este caso, la discretización del término transitorio real y artificial es formalmente equivalente. Dicho esquema temporal (Ecuación (2.16)) conduce a la siguiente discretización del término transitorio de la ecuación de cantidad de movimiento:

$$\left. \frac{\partial \rho u}{\partial t} \right|_P V_P \supseteq a_P^t (u_P - u_P^{n-1}) \quad (3.26)$$

donde $n - 1$ es el tiempo anterior y a_P^t está dada por

$$a_P^t = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} \quad . \quad (3.27)$$

Aquí Δt es el paso de tiempo (físico), y se supone densidad constante.

La derivación del procedimiento modificado parte de la ecuación de cantidad de movimiento incluyendo explícitamente el término temporal discretizado, que involucra a la velocidad en el paso de tiempo anterior:

$$a_P^t u_P + a_P u_P + \sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P - f_{xP} = a_P^t u_P^{n-1} \quad , \quad (3.28)$$

ecuación formalmente idéntica a la Ecuación (3.14). Por tanto, usando el mismo procedimiento que para la relajación inercial, la corrección MMI para el esquema Euler resulta:

$$u_e^{MMI} = \frac{1}{1 + [\beta^t]_e} u_e^{OMI} + \frac{[\beta^t]_e}{1 + [\beta^t]_e} u_e^{MMI^{n-1}} \quad , \quad (3.29)$$

donde

$$\beta^t = a^t / a \quad . \quad (3.30)$$

Cuando se alcanza un estado estacionario después de una evolución transitoria, la solución es independiente del tamaño del paso de tiempo usado ya

que $u_e^{MMI} = u_e^{MMI^{n-1}}$, y los coeficientes β^t (que son los únicos que incluyen Δt) desaparecen de la ecuación.

Un paso crucial en la obtención del presente modelo es el uso de las ecuaciones equivalentes a las (3.18) para el paso de tiempo real:

$$\left[\frac{1}{1 + \beta_e^t} \frac{f_x}{a} \right]_e \geq \frac{1}{1 + [\beta^t]_e} \left[\frac{f_x}{a} \right]_e \quad ; \quad \left[\frac{\beta^t u^{n-1}}{1 + \beta^t} \right]_e \geq \frac{[\beta^t]_e [u^{n-1}]_e}{1 + [\beta^t]_e} \quad . \quad (3.31)$$

A diferencia de la solución de un flujo estacionario, los términos que surgen de esta aproximación no serán eliminados en los pasos de tiempo intermedios de una simulación de flujo transitorio. La precisión del esquema transitorio podría resultar alterada; por este motivo, el orden de aproximación del esquema temporal de discretización será examinado mediante ‘experimentos numéricos’ en el Capítulo 6, consistentes en la resolución del problema del amortiguamiento de vórtices bidimensionales (Taylor-Green) para distintos tamaños de paso de tiempo, y se mostrará que se conserva la precisión temporal.

El comportamiento asintótico de la corrección para u_e (Ecuación (3.29)) es consistente tanto para pasos de tiempo pequeños como para grandes. En este último caso (β^t es pequeña), la MMI conduce al método original (OMI), y por tanto el nuevo algoritmo numérico no introduce disipación extra. Cuando el paso de tiempo tiende a cero, la ecuación se reduce a $u_e^{MMI} = u_e^{MMI^{n-1}}$ como se espera para el esquema Euler de primer orden.

A continuación, se revisa el comportamiento de la formulación original y del método de Choi [18], remarcando su comportamiento asintótico. Si se emplease el método original en un problema transitorio, en cambio, la velocidad en la cara se expresaría como

$$u_e^{OMI} = [u]_e + \left[\frac{1}{a + a^t} \right]_e f_{xe} - \left[\frac{f_x}{a + a^t} \right]_e \quad , \quad (3.32)$$

y para $\Delta t \rightarrow 0$ se obtendría $u_e^{OMI} = [u]_e$. Por lo tanto, el término de acoplamiento de velocidad y presión introducido por la interpolación del momento desaparecería de la ecuación y el cálculo numérico podría conducir a campos de presión con oscilaciones no realistas. Un ejemplo de este mal comportamiento de la OMI será mostrado en el Capítulo 6.

Choi [18] señaló por primera vez que la OMI produce soluciones dependientes del tamaño del paso temporal y propuso el siguiente esquema mejorado (según la notación empleada en este trabajo y suponiendo que el

coeficiente de relajación lineal es igual a 1 ($\alpha^L = 1$):

$$u_e^{ChMI} = [u]_e - \left[\frac{f_x}{a + a^t} \right]_e + \left[\frac{1}{a + a^t} \right]_e f_{xe} + \left\{ a_e^t \left[\frac{1}{a + a^t} \right]_e u_e^{ChMI^{n-1}} - \left[\frac{a^t u^{n-1}}{a + a^t} \right] \right\} , \quad (3.33)$$

donde $a_e^t = \rho V_e / \Delta t$ siendo V_e el volumen de la celda decalada y centrada en la cara este. El comportamiento asintótico de la ecuación anterior es el apropiado para pasos de tiempo grandes (los coeficientes de a^t son pequeños y se recupera la corrección original). Para pasos de tiempo pequeños, sin embargo, se manifiesta cierta inconsistencia puesto que se obtiene

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \{ u_e^{ChMI} - [u]_e \} = \left\{ a_e^t \left[\frac{1}{a^t} \right]_e u_e^{ChMI} - [u]_e \right\}^{n-1} , \quad (3.34)$$

en lugar de la igualdad $u_e^{ChMI} = u_e^{ChMI^{n-1}}$. Además, Yu *et al.* [115] mostraron que, para pasos de tiempo intermedios, la solución del estado estacionario varía con este parámetro. Aunque la desviación no es significativa (comparada con errores de discretización), la dependencia con el paso de tiempo es no obstante un comportamiento indeseable.

A modo de conclusión, el método de interpolación propuesto para el cálculo de flujos no estacionarios consigue dos objetivos principales en la mejora del método MI: se evitan campos de presión del tipo de tablero de ajedrez, incluso para pasos de tiempo pequeños, y la solución del estado estacionario es independiente del paso de tiempo usado en la integración temporal.

3.3.2. Esquema temporal Euler de segundo orden

Algunas aplicaciones requieren integrar en el tiempo con mayor precisión que el primer orden. La modificación del método de interpolación del momento se extiende a continuación para esquemas temporales de segundo orden, haciendo uso del método Euler de tres niveles.

La discretización del término temporal de la ecuación de cantidad de movimiento utilizando el método Euler de tres niveles de diferencias hacia atrás (Ecuación (2.17)) resulta

$$\left. \frac{\partial \rho u}{\partial t} \right|_P V_P \triangleq \frac{3u_P - 4u_P^{n-1} + u_P^{n-2}}{2\Delta t} \rho V_P . \quad (3.35)$$

Análogamente al esquema implícito de primer orden (y, por consiguiente, a la relajación inercial), el procedimiento MMI para el esquema multi-nivel

se basa en incluir explícitamente en la ecuación de cantidad de movimiento los términos provenientes de la discretización en el tiempo, que contienen el paso de tiempo real (Δt). Cuando se usa el esquema Euler de segundo orden, aparecen tres niveles de tiempo en la ecuación discretizada:

$$\begin{aligned} a_P^{t0} &= \frac{3}{2} \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} = c_0 a_P^t & (3.36) \\ a_P^{t1} &= 2 \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} = c_1 a_P^t \\ a_P^{t2} &= -\frac{1}{2} \frac{\rho_P V_P}{\Delta t} = c_2 a_P^t \quad , \end{aligned}$$

donde $a_P^t = \rho_P V_P / \Delta t$, y los coeficientes c_i son $c_0 = 1.5$, $c_1 = 2.0$ and $c_2 = -0.5$. Entonces, la ecuación se escribe:

$$c_0 a_P^t u_P + a_P u_P + \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P \right) - f_{xP} = c_1 a_P^t u_P^{n-1} + c_2 a_P^t u_P^{n-2} \quad . \quad (3.37)$$

Siguiendo el mismo procedimiento descrito en el apartado anterior (y usando las mismas aproximaciones), la corrección de la velocidad en la cara para el esquema de tiempo Euler de segundo orden es

$$\begin{aligned} u_e'^{MMI} &= \frac{1}{1 + c_0 [\beta^t]_e} u_e'^{MMI} + & (3.38) \\ &+ \frac{c_1 [\beta^t]_e}{1 + c_0 [\beta^t]_e} u_e'^{MMI^{n-1}} + \\ &+ \frac{c_2 [\beta^t]_e}{1 + c_0 [\beta^t]_e} u_e'^{MMI^{n-2}} \quad . \end{aligned}$$

Shen *et al.* [98] sugirieron un motivo para las oscilaciones de presión obtenidas cuando se aplica la técnica original (OMI) a flujos no estacionarios: la inclusión de la velocidad en la cara en pasos de tiempo anteriores en la definición de la pseudo-velocidad conduce a cierta inconsistencia puesto que dichos valores han sido calculados previamente usando la interpolación del momento. La modificación a la OMI propuesta por Shen *et al.* [98] para el esquema Euler de segundo orden puede verse como una extensión natural al segundo orden del método, en mallas uniformes, de Choi [18] para el primer orden (Ecuación (3.33)). Tras algunas operaciones algebraicas y usando la notación seguida

en este trabajo, la expresión propuesta por Shen *et al.* queda:

$$\begin{aligned}
 u_e^{SMI} - [u]_e = & - \left[\frac{f_x}{a + c_0 a^t} \right]_e + \left[\frac{1}{a + c_0 a^t} \right]_e f_{xe} + \\
 & + \left\{ \left[\frac{c_1 a^t}{a + c_0 a^t} \right]_e u_e^{SMI^{n-1}} - \left[\frac{c_1 a^t u^{n-1}}{a + c_0 a^t} \right]_e \right\} \\
 & + \left\{ \left[\frac{c_2 a^t}{a + c_0 a^t} \right]_e u_e^{SMI^{n-2}} - \left[\frac{c_2 a^t u^{n-2}}{a + c_0 a^t} \right]_e \right\} .
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

El comportamiento asintótico de la ecuación anterior es consistente con el esquema de tiempo para tamaños de paso de tiempo pequeño:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} u_e^{SMI} = \frac{c_1}{c_0} u_e^{SMI^{n-1}} + \frac{c_2}{c_0} u_e^{SMI^{n-2}} . \tag{3.40}$$

Se obtiene también un buen comportamiento para pasos de tiempo largos ya que

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} u_e^{SMI} = u_e^{OMI} . \tag{3.41}$$

Sin embargo, cuando se usan pasos de tiempo intermedios, la solución del estado estacionario depende del paso; lo que se puede demostrar siguiendo el mismo procedimiento que Yu *et al.* [116] aplicaron a la corrección propuesta por Choi [18] para el esquema de primer orden. Por otro lado, inspeccionando las Ecuaciones (3.38) y (3.39) se observa que el esquema propuesto en este trabajo no presenta dicha deficiencia y no resulta más difícil de implementar que el esquema de Shen *et al.* [98].

3.3.3. Esquema temporal Adams-Moulton de segundo orden

Los métodos Adams-Moulton pertenecen a la categoría de esquemas multi-punto de dos niveles. La aproximación de segundo orden, es obtenida aplicando la regla del trapecoide a la ecuación integrada en el tiempo (ver Apartado 2.4), obteniéndose la siguiente ecuación de cantidad de movimiento discretizada:

$$\begin{aligned}
 2a_P^t u_P + a_P u_P + \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P \right) - f_{xP} = & \tag{3.42} \\
 = 2a_P^t u_P^{n-1} - \left\{ a_P u_P + \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P \right) - f_{xP} \right\}^{n-1} .
 \end{aligned}$$

De nuevo, la ecuación precedente es formalmente equivalente a la del primer orden de aproximación del término temporal (Ecuación (3.28)), excepto por el factor 2 que multiplica al coeficiente a_P^t y un término extra (entre llaves en el lado derecho de la ecuación) evaluado en el nivel de tiempo anterior. Como este término nuevo no depende explícitamente del tamaño de paso de tiempo, puede ser incluido por conveniencia en el término de pseudo-velocidad, *e.g.* usando un nuevo término fuente: $b_P^T = b_P - \left\{ a_P u_P + (\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P) - f_{xP} \right\}^{n-1}$. Por lo tanto:

$$\begin{aligned} u_P &= -\frac{1}{1+2\beta_P^t} \frac{\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P^T}{a_P} + \frac{1}{1+2\beta_P^t} \frac{f_{xP}}{a_P} + \frac{2\beta_P^t}{1+2\beta_P^t} u_P^{n-1} = \\ &= \hat{u}_P + \frac{1}{1+2\beta_P^t} \frac{f_{xP}}{a_P} + \frac{2\beta_P^t}{1+2\beta_P^t} u_P^{n-1} \quad . \end{aligned} \quad (3.43)$$

La corrección aplicada a la velocidad en la cara para el esquema Adams-Moulton de segundo orden es entonces

$$u_e^{MMI} = \frac{1}{1+2[\beta^t]_e} u_e^{OMI} + \frac{2[\beta^t]_e}{1+2[\beta^t]_e} u_e^{MMI^{n-1}} \quad . \quad (3.44)$$

Esta expresión es extensible directamente a cualquier orden de aproximación del método Adams-Moulton, sin más que cambiar el factor que multiplica a los coeficientes β^t (según la Ecuación (2.18)).

3.4. Una Interpolación Compacta del Momento

Las modificaciones a la interpolación original del momento de Rhie y Chow [92] desarrolladas en este trabajo (y descritas a lo largo de este capítulo) pueden combinarse en una única expresión compacta, la cual tiene en cuenta ambas formulaciones de la relajación (lineal e inercial) así como varios esquemas de integración en el tiempo. La ecuación de partida para esta Interpolación Compacta del Momento (CMI) es la ecuación de cantidad de movimiento formulada de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} c_O \beta_P^t a_P u_P + \frac{\beta_P^r + 1}{\alpha^L} a_P u_P + \left(\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P^T \right) - f_{xP} &= \quad (3.45) \\ = c_1 \beta_P^t a_P u_P^{n-1} + c_2 \beta_P^t a_P u_P^{n-2} + \frac{1 + \beta_P^r - \alpha^L}{\alpha^L} a_P u_P^{k-1} \quad , \end{aligned}$$

donde los coeficientes c_i se determinan en función del esquema de tiempo empleado, y se presentan en la Tabla 3.1. Siguiendo el procedimiento descrito en los apartados precedentes, se escribe una ecuación equivalente para la cara este y los nuevos términos que surgen se evalúan usando aproximaciones similares. Estas aproximaciones consisten en el uso de una interpolación lineal para la pseudo-velocidad ($\hat{u}_e^{CMI} \supseteq [\hat{u}^{CMI}]_e$), cuya definición en el nodo P resulta de una extensión natural desde su expresión en el caso OMI (Ecuación (3.3)) a la formulación compacta:

$$\hat{u}_P^{CMI} = -\frac{\alpha^L}{1 + \beta_P^\tau + c_0 \beta_P^t \alpha^L} \frac{\sum_{NB(P)} a_{NB} u_{NB} - b_P^T}{a_P}, \quad (3.46)$$

donde b_P^T involucra a todos los términos fuentes que no incluyen explícitamente coeficientes de relajación o pasos de tiempo real Δt . Como se hace frecuentemente en la estrategia MI, se usa también una interpolación lineal para calcular el término $(1/a_e) \supseteq [1/a]_e$. Además, el presente método introduce dos conjuntos de aproximaciones adicionales: las ecuaciones (3.18) si se usa relajación inercial y (3.31) en el caso de resolver flujos no estacionarios. Como resultado, la velocidad en la cara de acuerdo con el modelo de Interpolación Compacta del Momento (u_e^{CMI}) propuesto aquí puede ser expresada como una interpolación lineal más un término de corrección ($u_e'^{CMI}$):

$$u_e^{CMI} = [u]_e + u_e'^{CMI}. \quad (3.47)$$

El término de corrección está dado por

$$\begin{aligned} u_e'^{CMI} &= \frac{\alpha^L}{1 + [\beta^\tau]_e + c_0 [\beta^t]_e \alpha^L} u_e'^{OMI} + \\ &+ \frac{1 + [\beta^\tau]_e - \alpha^L}{1 + [\beta^\tau]_e + c_0 [\beta^t]_e \alpha^L} u_e'^{CMI^{k-1}} + \\ &+ \frac{c_1 [\beta^t]_e \alpha^L}{1 + [\beta^\tau]_e + c_0 [\beta^t]_e \alpha^L} u_e'^{CMI^{n-1}} + \\ &+ \frac{c_2 [\beta^t]_e \alpha^L}{1 + [\beta^\tau]_e + c_0 [\beta^t]_e \alpha^L} u_e'^{CMI^{n-2}}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

Tabla 3.1: Coeficientes c_i en el esquema CMI (Ecuaciones (3.48) o (3.50))

	c_0	c_1	c_2
Estacionario	0	0	0
Euler, primer orden	1	1	0
Euler, segundo orden	1.5	2	-0.5
Adams-Moulton, segundo orden	2	2	0

donde u_e^{OMI} es la corrección OMI (Ecuación (3.8)) y los coeficientes β se definen como $\beta^{\tau,t} = a^{\tau,t}/a$. Como se muestra en la Tabla 3.1, los coeficientes c_i cumplen la relación $c_0 = c_1 + c_2$ y, por tanto, cuando se alcanza una solución estacionaria y convergida, se recupera la corrección OMI. Por otro lado, cuando $\Delta t \rightarrow 0$, la velocidad en la cara es consistente con el esquema de tiempo usado:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} u_e^{CMI} = \frac{c_1}{c_0} u_e^{CMI^{n-1}} + \frac{c_2}{c_0} u_e^{CMI^{n-2}} \quad . \quad (3.49)$$

La Ecuación (3.48) puede ser escrita en una forma más compacta usando el parámetro de relajación total β^r , definido en la Ecuación (3.23).

$$u_e^{CMI} = \frac{1}{1 + [\beta^r]_e + c_0 [\beta^t]_e} \left\{ u_e^{OMI} + [\beta^r]_e u_e^{CMI^{k-1}} + \right. \quad (3.50) \\ \left. + c_1 [\beta^t]_e u_e^{CMI^{n-1}} + c_2 [\beta^t]_e u_e^{CMI^{n-2}} \right\} \quad .$$

De este modo, la corrección de velocidad en la cara calculada según el modelo CMI propuesto es sencilla de implementar. Consiste en la adición de varios términos a la corrección original (u_e^{OMI}) para tener en cuenta términos temporales o de relajación. Estos términos dependen de la propia corrección en la iteración anterior ($u_e^{CMI^{k-1}}$) o en niveles de tiempo anteriores ($u_e^{CMI^{n-1}}$, etc, dependiendo del esquema temporal), y están multiplicados por el coeficiente de relajación (β^r) o temporal (β^t). Comparando el coste computacional de este modelo respecto a la MI original, requiere la interpolación lineal de dos parámetros adicionales (β^r y β^t) y el almacenamiento de la propia corrección en niveles de tiempo previos.

Únicamente se tiene constancia de otro modelo de interpolación del momento en la literatura que conduzca a resultados independientes del tamaño del paso de tiempo: el método de Yu *et al.* [116], que es aplicable al esquema temporal Euler de primer orden así como a la relajación lineal. A continuación, se describen sus características, y se comparan con el nuevo método CMI. Usando la notación seguida en esta memoria, su expresión para la velocidad en la cara (u_e^{YMI}) se escribe

$$u_e^{YMI} = \frac{1}{[a]_e + a_e^t} \left\{ [(a + a^t)u]_e + (f_{xe} - [f_x]_e) \right\} + \quad (3.51) \\ + (1 - \alpha_L) \left\{ u_e^{YMI^{k-1}} - \frac{[(a + a^t)u^{k-1}]_e}{[a]_e + a_e^t} \right\} \\ + \frac{\alpha_L}{[a]_e + a_e^t} \left\{ a_e^t u_e^{YMI^{n-1}} - [a^t u^{n-1}]_e \right\} \quad ,$$

donde $a_e^t = \rho V_e / \Delta t$, con V_e el volumen de una celda desplazada y con centro en la cara este². Asimismo, no se han escrito los términos fuentes explícitos para simplificar la comparación con la presente propuesta, *viz* Ecuación (3.50) tomando $c_2 = 0$ y $\beta^r = (1 - \alpha^L) / \alpha^L$.)

En el modelo de Yu *et al.* [116], la velocidad en la cara en la convergencia y en el estado estacionario es

$$u_e^{YOMI} = \frac{[au]_e}{[a]_e} + \frac{1}{[a]_e} \{f_{xe} - [f_x]_e\} \quad . \quad (3.52)$$

y no requiere aproximaciones adicionales, a diferencia del método propuesto en esta memoria que emplea las aproximaciones de las Ecuaciones (3.18) y (3.31). En cambio, la velocidad en la cara u_e^{YMI} no es expresada como un término de corrección añadido a la interpolación lineal, haciendo más difícil controlar la disipación que se quiere introducir vía un coeficiente como se describió en el Apartado 3.1. Además, el coste computacional de implementar la ecuación de Yu *et al.* (Ecuación (3.51)) es algo mayor que la CMI propuesta, ya que involucra más interpolaciones y requiere el almacenamiento de parámetros nuevos adicionales, tales como $[au]_e$ y $[a^t u]_e$. Finalmente, el comportamiento asintótico del presente modelo para tamaños de paso de tiempo pequeños ($\Delta t \rightarrow 0$) es más apropiado ya que $u_e^{CMI} \rightarrow u_e^{CMI^{n-1}}$, mientras que la tendencia para la ecuación u_e^{YMI} depende del coeficiente de relajación lineal.

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\{ u_e^{YMI} - \frac{[au]_e}{[a]_e + a_e^t} \right\} &= (1 - \alpha^L) \left\{ u_e^{YMI} - \frac{[au]_e}{[a]_e + a_e^t} \right\}^{k-1} + \\ &+ \alpha^L \left\{ u_e^{YMI} - \frac{[au]_e}{[a]_e + a_e^t} \right\}^{n-1} \quad . \end{aligned} \quad (3.53)$$

El método de interpolación del momento de Yu *et al.* [116] se usa escasamente en aplicaciones prácticas debido a su ardua implementación, en comparación con el esquema de Choi [18], el cual ofrece una expresión más simple para tener en cuenta la presencia tanto de coeficientes de relajación lineal como de términos transitorios. Mientras que en el Apartado 3.3.1 se mostró el esquema de Choi suponiendo $\alpha^L = 1$, aquí se escribe la expresión completa:

$$\begin{aligned} u_e^{ChMI} &= \alpha^L u_e^{OMI} + (1 - \alpha^L) u_e^{ChMI^{k-1}} \\ &+ \alpha^L \left\{ a_e^t \left[\frac{1}{a + a^t} \right] u_e^{ChMI} - \left[\frac{a^t u}{a + a^t} \right] \right\}^{n-1} \quad . \end{aligned} \quad (3.54)$$

²El factor $(a + a^t)$ en el segundo término del lado derecho no aparece en la expresión publicada por Yu *et al.* [116]; probablemente debido a una errata tipográfica.

Esta ecuación se obtiene a partir del esquema temporal Euler de primer orden para la integración en el tiempo, y como se mencionó anteriormente, la expresión de Shen *et al.* [98] puede considerarse una extensión natural al segundo orden, al menos en mallas uniformes, donde a^t es constante. Sin embargo, las soluciones obtenidas usando la ecuación anterior dependen ligeramente del paso de tiempo ([116]).

Se considera que la formulación compacta propuesta en este trabajo de investigación puede ser competitiva y útil en aplicaciones prácticas puesto que no presenta las deficiencias mencionadas del esquema de Choi [18] y no es más complicada de implementar (comparar Ecuación (3.48) con $\beta^r = 0$) y Ecuación (3.54)).

Capítulo 4

Precondicionamiento basado en una implementación parcialmente implícita de la CMI

Go for the messes - that's where the action is.

- S. Weinberg

Una vez descrito el procedimiento de discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes en los dos capítulos precedentes, se detalla en este capítulo el método propuesto en este trabajo para resolver simultáneamente todas las ecuaciones algebraicas resultantes de la discretización. En primer lugar, se trata el procedimiento de linealización y la integración de paso dual implícita. A continuación, se describen las estrategias llevadas a cabo para forzar la dominancia de la diagonal principal del sistema acoplado, en las filas correspondientes tanto a las ecuaciones de cantidad de movimiento como a la de continuidad.

4.1. Procedimiento de linealización e integración en el tiempo de paso dual

El objetivo de resolver las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento simultáneamente es conseguir una metodología más robusta (respecto al método segregado) preservando el acoplamiento intrínseco de las variables físicas. Los métodos tipo Newton permiten una linealización exacta y evitan las iteraciones debidas a los términos no lineales, pero la evaluación del jacobiano de la matriz es, en general, muy costosa en tiempo computacional y el sistema lineal resultante puede estar mal condicionado y ser difícil de

resolver. Por otra parte, los métodos inexactos o aproximados de Newton buscan evaluar una matriz jacobiana menos compleja, eliminando directamente elementos en el primer caso o utilizando aproximaciones con más justificación física en el segundo; en cualquier caso, a costa de necesitar resolver varias veces un sistema lineal para alcanzar soluciones precisas (ver, por ejemplo, [68], [17] o [27]).

Un método alternativo de linealización es el procedimiento de sustitución sucesiva (o de Picard). Aunque el número de iteraciones exteriores (aquellas debidas al hecho de ser un sistema no lineal) es mayor en el método de Picard que en uno tipo Newton, cada sistema lineal se forma con un coste computacional comparativamente pequeño. La linealización por sustitución sucesiva se ha utilizado tradicionalmente para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes de forma segregada [29]. La aplicación del procedimiento de Picard a un sistema acoplado requiere la resolución y el almacenamiento de un sistema más grande (respecto a los segregados) en cada iteración y, por tanto, un mayor coste computacional; como contrapartida, se evitan los ciclos adicionales debidos al acoplamiento entre las ecuaciones de transporte. Teniendo en cuenta que el modelo de implementación diferida de la técnica de interpolación del momento propuesto en este trabajo (que será tratado en el Apartado 4.3) retiene el acoplamiento velocidad-presión en la ecuación de continuidad (además de en las de cantidad de movimiento) de una manera implícita (es decir, en la iteración actual), la linealización por sustitución sucesiva puede ser un método competitivo para algoritmos acoplados pocas veces documentado en la literatura.

Cuando se resuelven flujos no estacionarios, la integración temporal implícita permite elegir el paso de tiempo considerando únicamente las escalas de tiempo características del problema (las restricciones debidas a un esquema numérico explícito imponen habitualmente pasos de tiempo menores). Para aumentar la precisión de las soluciones transitorias, se puede recurrir a esquemas implícitos de orden alto. El precondicionamiento del problema, por otra parte, recae en el falso paso temporal de la relajación inercial o en el término de pseudo-compresibilidad (como se detallará en los apartados siguientes). El esquema implícito de primer orden es suficiente para integrar estos términos temporales artificiales ya que no se requieren soluciones precisas de las iteraciones exteriores. Como resultado, se aplica un método de integración en el tiempo de paso dual completamente implícito es aplicado: por cada paso de tiempo físico se lleva a cabo un determinado número de iteraciones (con un falso paso de tiempo) para alcanzar la solución convergida.

4.2. Precondicionamiento de las ecuaciones de cantidad de movimiento, y otras ecuaciones de transporte

El esquema utilizado para calcular los términos convectivos de las ecuaciones de transporte influye en el número de condición de la matriz de coeficientes. Como se destacó en el Apartado 2.2, en este algoritmo se emplean esquemas de interpolación diferentes para calcular las velocidades en las caras dependiendo de su papel en las ecuaciones de conservación. Puesto que una interpolación lineal de las velocidades es suficiente para satisfacer el balance de masa integral, las velocidades involucradas en el flujo de masa a través de las caras, calculadas de forma explícita, son interpoladas linealmente (y corregidas por el método de interpolación compacta del momento para evitar oscilaciones no realistas de la presión). En cambio, se hace uso de un esquema convectivo (entre los descritos en el Apartado 2.3) para interpolar las variables transportadas ϕ en el término de convección, que son incógnitas del sistema y se tratan implícitamente.

El esquema convectivo *Upwind*, a pesar de su pobre precisión [56], ha sido aplicado con frecuencia en los algoritmos segregados debido a las buenas propiedades numéricas de la matriz de coeficientes resultante. La molécula computacional engloba únicamente 7 nodos (en una malla rectangular 3D) y la dominancia de la diagonal principal está asegurada. Para poder aplicar esquemas convectivos de mayor orden manteniendo las buenas propiedades numéricas del esquema *Upwind*, se emplea una implementación diferida de tal forma que la parte ‘anti-difusiva’ de la formulación (ver Ecuación (2.12)) se calcula explícitamente usando los valores conocidos de las variables en la iteración anterior y se añaden al vector del lado derecho del sistema (o vector fuente). Se alcanza la solución de mayor orden en la convergencia del método iterativo. A modo de ejemplo, la ecuación discretizada del término convectivo a través de la cara este para una variable transportada ϕ se calcula como:

$$\dot{m}_e \phi_e = \{\rho_e A_e u_e^{CMI}\}^{k-1} \phi_U^k + \{\rho_e A_e u_e^{CMI} \frac{1}{2} \psi(r) (\phi_U - \phi_{UU})\}^{k-1} \quad , \quad (4.1)$$

donde se designa la iteración actual como k , y la anterior como $k - 1$. El primer sumando en la ecuación anterior se trata implícitamente, mientras que el segundo se calcula explícitamente y se introduce en el vector fuente. Cabe destacar asimismo que en las ecuaciones de cantidad de movimiento ϕ corresponde a una de las componentes de la velocidad.

En el sistema acoplado de ecuaciones, sin embargo, la dominancia diagonal de la matriz en las filas correspondientes a las ecuaciones de cantidad de

movimiento está todavía comprometida por los coeficientes adicionales (respecto al método segregado) que provienen de la discretización del gradiente de presión (en general, a^{up} , a^{vp} y $a^{wp} \neq 0$). En este trabajo, se utiliza relajación inercial para compensar estos coeficientes extra fuera de la diagonal principal. En el caso de la ecuación para u en la celda P , el término pseudo-transitorio discreto es:

$$\rho \frac{u_P^{k-1} - u_P}{\Delta\tau} V_P = a_P^\tau (u_P^{k-1} - u_P) \quad , \quad (4.2)$$

donde $k-1$ hace referencia a la iteración anterior. De esta forma, el coeficiente a_P^τ es añadido a la diagonal principal en las filas de la matriz correspondientes a la ecuación de cantidad de movimiento y aumenta su número de condición. Además, en el Apartado 5.2 se deduce un valor apropiado del falso paso temporal ($\Delta\tau$), de tal forma que su elección no es una tarea crítica para la convergencia del método.

A diferencia de las ecuaciones de cantidad de movimiento, otras ecuaciones de convección-difusión puras (como una ecuación de transporte para la temperatura) no requieren precondicionamiento por relajación inercial para asegurar la dominancia de la diagonal puesto que la variable transportada no está directamente acoplada con otras variables primitivas. Los únicos coeficientes fuera de la diagonal principal son debidos a la discretización del término convectivo y difusivo. La implementación diferida de los esquemas convectivos y el uso del esquema CDS para calcular los gradientes del término difusivo aseguran una matriz de coeficientes diagonalmente dominante. No obstante, los resultados presentados en este trabajo han sido obtenidos aplicando relajación también a la ecuación de energía y se ha usado el mismo falso paso temporal para todas las variables dependientes con el objetivo de sincronizar su marcha en el (falso) tiempo.

4.3. Precondicionamiento de la ecuación de continuidad

El precondicionamiento de la ecuación de continuidad es un punto crítico en el intento de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos incompresibles de una forma acoplada puesto que una de las incógnitas, la presión, no tiene ecuación. Una técnica que se usa frecuentemente para adaptar estrategias propias de flujos compresibles es el modelo de compresibilidad artificial. El método estándar, propuesto por Chorin [20], consiste en añadir un término artificial de derivada temporal de la presión (esto es, $(1/\beta)/(\partial p/\partial\tau)$), el cual emula el término transitorio de la ecuación de conservación de masa en un flujo compresible.

4. Precondicionamiento

Aunque el término de compresibilidad artificial elimina los ceros de la diagonal principal de la matriz de coeficientes \mathbf{A} , la necesidad de determinar el parámetro libre β resta robustez al método: el valor, que afecta a la velocidad de convergencia, se elige mediante ‘experimentación numérica’. Se puede mitigar este inconveniente relacionando el parámetro libre β con una velocidad pseudo-acústica, c_τ , a través de la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = \frac{\partial \rho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial \tau} = \frac{1}{c_\tau^2} \frac{\partial p}{\partial \tau} \quad . \quad (4.3)$$

En la literatura hay disponible una variedad de opciones para el cálculo de c_τ (ver, por ejemplo, [107], [114], [66] o [57]), relacionándola con una velocidad global de referencia, la velocidad local en cada celda o una velocidad difusiva (en el caso de flujos dominados por la difusión). A modo de ejemplo, la expresión propuesta por Weiss and Smith [114] para la velocidad pseudo-acústica es:

$$c_\tau = \max(|\mathbf{v}|, \nu/\Delta x) \quad , \quad (4.4)$$

donde el primer elemento es el módulo de la velocidad local y el segundo representa la velocidad difusiva (siendo ν la viscosidad cinemática). Como señalan Venkateswaran *et al.* [109] la robustez de las diferentes variaciones de preconditionamiento, sin embargo, se ve todavía amenazada por la necesidad de definir una velocidad convectiva mínima en zonas de estancamiento, donde la velocidad local tendería a cero.

En este trabajo se propone una estrategia diferente para evitar la aparición de ceros en la diagonal principal de la matriz de coeficientes, basada en una implementación ‘parcialmente implícita’ de una ecuación de tipo Poisson derivada a partir de la ecuación de continuidad. Esta implementación involucra términos implícitos que contribuyen a la estabilización del método iterativo como se detalla a continuación.

En el desarrollo del método se considera, en primer lugar por simplicidad, la resolución de flujo estacionario sin utilizar relajación (más abajo se tratará el caso general con términos transitorios y coeficientes de relajación). La ecuación de continuidad se discretiza calculando las velocidades en las caras de acuerdo con el modelo de Interpolación Compacta del Momento (Capítulo 3):

$$\sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} v_{nb}^{CMI} = 0 \quad . \quad (4.5)$$

Introduciendo los valores de las velocidades corregidas según la interpolación del momento (Ecuación (3.7) o Ecuación (3.50) con $\beta^t = \beta^r = 0$), se obtiene

la siguiente ecuación de Poisson discretizada:

$$\sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} [v]_{nb} + \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \left\{ \left[\frac{1}{a} \right]_{nb} f_{nb} - \left[\frac{f}{a} \right]_{nb} \right\} = 0 \quad , \quad (4.6)$$

donde f_{nb} es la fuerza de presión sobre la celda decalada en la dirección apropiada. Este término incluye valores de presión en los nodos de las celdas ($f_{nb} = -A_P p_P - A_{NB} p_{NB}$) y, en concreto, coeficientes de las incógnitas p que se introducen en la diagonal principal de la matriz eliminando así los elementos nulos. La implementación ‘parcialmente implícita’ propuesta en este trabajo consiste en diferir al lado derecho (o vector fuente) los términos que contienen la interpolación lineal de la fuerza de presión $[f/a]_{nb}$, mientras que los términos responsables del acoplamiento velocidad-presión son incluidos implícitamente en la matriz de coeficientes. La ecuación resultante, escribiendo en el lado izquierdo los términos implícitos (con superíndice k para las incógnitas) y en el derecho los explícitos, es:

$$\begin{aligned} & \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} (1 - \lambda_{nb}) v_P^k + \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \lambda_{nb} v_{NB}^k + \\ & + \underbrace{\sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \left[\frac{1}{a} \right]_{nb} A_P p_P^k + \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \left[\frac{1}{a} \right]_{nb} A_{NB} p_{NB}^k}_{a_P^{pp,MI}} = \\ & = \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \left[\frac{f^{k-1}}{a} \right]_{nb} . \end{aligned} \quad (4.7)$$

El término señalado con una llave es el coeficiente que se introduce en la diagonal principal de la ecuación de continuidad $a_P^{pp,MI}$. Haciendo uso de esta implementación parcialmente diferida de la formulación de la interpolación del momento, se evita el desacoplamiento velocidad-presión típico de las mallas colocalizadas sin incrementar el tamaño de la molécula computacional (únicamente los nodos adyacentes están conectados en la matriz de coeficientes). Además, el acoplamiento se ve favorecido por tener tanto v_P como p_P referidos a la misma iteración (la actual).

De este modo, el procedimiento proporciona una ecuación para la presión en flujos incompresibles. No se consigue, sin embargo, una matriz con dominancia de la diagonal principal debido a los coeficientes que provienen de la interpolación lineal de la velocidad (los dos primeros sumandos de la Ecuación (4.7)) y que acoplan implícitamente las incógnitas presión y velocidad (en la matriz de coeficientes a^{pu} , a^{pv} y $a^{pw} \neq 0$). En el algoritmo propuesto, la técnica de pseudo-compresibilidad (descrita brevemente al principio de este

apartado) se emplea como una relajación inercial, cuya misión es compensar dichos elementos extra fuera de la diagonal principal (de manera análoga a la estrategia seguida para las ecuaciones de cantidad de movimiento en el apartado anterior). El coeficiente implícito introducido en la diagonal principal, $a_P^{pp,\tau}$, viene dado por la discretización del falso término transitorio (Ecuación (4.3)):

$$a_P^{pp,\tau} = \frac{V_P}{U^2 \Delta\tau} \quad (4.8)$$

donde U es una velocidad de referencia y se proporcionará una estimación para el falso paso temporal $\Delta\tau$ en el Apartado 5.2.

Como consecuencia de la combinación del modelo de compresibilidad artificial y de la implementación de una ecuación de Poisson a partir de la formulación CMI, el coeficiente total en la diagonal principal de la ecuación para la presión, a_P^{pp} se compone de dos sumandos:

$$a_P^{pp} = a_P^{pp,\tau} + a_P^{pp,CMI} \quad (4.9)$$

donde $a_P^{pp,\tau}$ viene dado por la Ecuación (4.8) y, de la Ecuación (4.7), $a_P^{pp,CMI}$ es:

$$a_P^{pp,CMI} = \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \left[\frac{1}{a} \right]_{nb} A_P \quad . \quad (4.10)$$

Las pruebas numéricas realizadas durante este trabajo indican que este último coeficiente $a_P^{pp,CMI}$ es crucial para la velocidad de convergencia y robustez del algoritmo acoplado (ver capítulo de resultados, Apartado 6.2). En lo que sigue, se propone una explicación para este comportamiento. Dicho término implícito involucra en esencia una interpolación lineal del (inverso del) coeficiente a_P , que es el coeficiente en la diagonal principal de las ecuaciones de momento (en la matriz acoplada, se escribiría $a_P^{uu} = a_P^{vv} = a_P^{ww}$) y proviene de la discretización de los términos convectivos y difusivos. Este coeficiente, por tanto, involucra la suma sobre las celdas vecinas de las velocidades locales convectivas y difusivas. Además, gracias a la implementación diferida de los esquemas convectivos de alto orden, sólo la parte *upwind* se trata implícitamente, y por tanto a_P es estrictamente positivo. De este modo, el coeficiente en la diagonal principal que se obtiene de la implementación parcialmente implícita de la ecuación de Poisson puede considerarse un coeficiente de precondicionamiento local, automáticamente determinado y que no requiere ningún tratamiento especial en la cercanía de puntos de estancamiento.

En el caso general, cuando se resuelven flujos transitorios y se relaja el método iterativo de resolver las ecuaciones no lineales, la formulación CMI permite seguir un tratamiento análogo de la ecuación de continuidad

resultando en la siguiente expresión para el coeficiente en la diagonal principal (ver Ecuación (3.50):

$$a_P^{pp, CMI} = \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \frac{1}{1 + [\beta^t]_{nb} + [\beta^\tau]_{nb}} \left[\frac{1}{a} \right]_{nb} A_P \quad . \quad (4.11)$$

Es interesante observar que cuando se aplica relajación ($\beta^\tau > 0$) $a_P^{pp, CMI}$ decrece. Así, el precondicionamiento por relajación e interpolación del momento se compensan en cierta manera entre ellos: cuando la relajación crece, el coeficiente MI implícito decrece. Esta tendencia favorece la robustez del algoritmo ya que la influencia del parámetro libre de pseudo-compresibilidad ($\Delta\tau$) sobre la convergencia del procedimiento iterativo no es tan decisiva como en el modelo de compresibilidad artificial habitual. Se ilustrará este razonamiento en el capítulo de resultados, donde se muestra el coeficiente en la diagonal principal de la ecuación de continuidad a_P^{pp} en el problema de la cavidad con pared móvil para varios tamaños del falso paso temporal. Cuando se resuelven flujos transitorios, por su parte, se obtiene un comportamiento similar, puesto que pasos de tiempo (reales) más pequeños conducen a valores más pequeños del coeficiente $a_P^{pp, CMI}$.

Para finalizar este apartado, se remarca que el algoritmo implícito acoplado propuesto en este trabajo combina una técnica empleada típicamente en los métodos basados en la densidad (el modelo de compresibilidad artificial) con una técnica usada en los algoritmos basados en la presión (los métodos de proyección para deducir una ecuación de Poisson) con el objetivo de conseguir una matriz bien condicionada y poder resolver de una manera robusta tanto flujos incompresibles como flujos compresibles a muy baja velocidad.

4.4. Matriz de coeficientes resultante del precondicionamiento

Mediante la implementación parcialmente diferida de la interpolación del momento y del esquema convectivo (ambas descritas en los apartados precedentes de este capítulo) se consigue que las ecuaciones de conservación para una celda P involucren únicamente a las celdas adyacentes; es decir, el tamaño de la molécula computacional es 7 en un problema tridimensional (5 en dos dimensiones). El sistema acoplado se puede así expresar mediante una matriz heptadiagonal de sub-matrices 4×4 , siendo 28 ($= 7 \times 4$) el número de diagonales con coeficientes no nulos de la matriz completa. Se escribe aquí, por simplicidad, la matriz del sistema acoplado para un caso bidimensional, compuesta por sub-matrices 3×3 y con 15 ($= 5 \times 3$) diagonales no nulas:

$$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & & \bullet & & & & & & & \\ \bullet & \bullet & \bullet & & \bullet & & & & & & \\ & \bullet & \bullet & \bullet & & \bullet & & & & & \\ \bullet & & \bullet & \bullet & \bullet & & \bullet & & & & \\ \cdots & \mathbf{A}_S & \cdots & \mathbf{A}_W & \mathbf{A}_P & \mathbf{A}_E & \cdots & \mathbf{A}_N & \cdots & & \\ & & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & & & \bullet & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & & & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & & & & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & & & & & & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & & & & & & & \bullet & \bullet & \\ & & & & & & & & & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \Phi_S \\ \vdots \\ \Phi_W \\ \Phi_P \\ \Phi_E \\ \vdots \\ \Phi_N \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{B}_S \\ \vdots \\ \mathbf{B}_W \\ \mathbf{B}_P \\ \mathbf{B}_E \\ \vdots \\ \mathbf{B}_N \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

La sub-matriz \mathbf{A}_P se escribe

$$\mathbf{A}_P = \begin{pmatrix} a^{uu} & 0 & a^{up} \\ 0 & a^{vv} & a^{vp} \\ a^{pu} & a^{pv} & a^{pp} \end{pmatrix}_P, \quad (4.13)$$

y destaca, respecto al patrón de llenado de la sub-matriz original (ver (2.24)), el coeficiente no nulo a_P^{pp} en la diagonal principal. A continuación, a modo de resumen, se especifica la composición de todos los coeficientes $a_P^{\phi_1\phi_2}$, que resultan tras aplicar el tratamiento de las ecuaciones discretas de Navier-Stokes propuesto en este capítulo para mejorar la condición de la matriz del sistema acoplado.

El coeficiente de la diagonal principal en las ecuaciones de cantidad de movimiento y otras ecuaciones de transporte, (a_P^{uu} , en el caso de la velocidad u) está compuesto por tres términos: uno proviene de la contribución al nodo P de la parte *upwind* del término convectivo ($a_P^{uu,UCS}$; ver Ecuación (4.1)), otro de la discretización del término difusivo ($a_P^{uu,DIF}$, Ecuación (2.7)) y el tercero resulta del término pseudo-temporal ($a_P^{uu,\tau}$, Ecuación (4.2); en caso de flujo transitorio, se debe añadir el coeficiente debido a la discretización del término temporal real). Así,

$$a_P^{uu} = a_P^{uu,UCS} + a_P^{uu,DIF} + a_P^{uu,\tau}, \quad (4.14)$$

con

$$a_P^{uu,UCS} = \sum_{nb} \rho_{nb} A_{nb} v_{nb}^{CMI^{k-1}} \delta_{nb}^{U,P}, \quad (4.15)$$

donde $\delta_{nb}^{U,P} = 1$ si la celda *upwind* a la cara nb coincide con la celda P y es nulo en cualquier otro caso;

$$a_P^{uu,DIF} = \sum_{nb} 2\mu_{nb} A_{nb} / (\Delta x_{1P} + \Delta x_{1E}), \quad (4.16)$$

4. Precondicionamiento

y

$$a_P^{uu,\tau} = \frac{\rho_P V_P}{\Delta\tau} \quad . \quad (4.17)$$

Los coeficientes fuera de la diagonal principal a_P^{up} y a_P^{vp} surgen debido al acoplamiento entre velocidad y presión presente en las ecuaciones de Navier-Stokes. En el caso de la ecuación para u , dicho coeficiente representa la contribución de la fuerza de presión en dirección horizontal sobre la celda P ($f_{xP} = A(p_w - p_e)$, Ecuación (2.8)) ¹:

$$a_P^{up} = A(-\lambda_w + \lambda_e) \quad , \quad (4.18)$$

donde λ es el factor de interpolación lineal, utilizado para el cálculo de los valores de presión en las caras de la celdas.

En cuanto a la ecuación para la presión, el coeficiente de la diagonal principal a_P^{pp} está compuesto por las contribuciones del término pseudo-transitorio y de la implementación parcialmente implícita de la ecuación de Poisson deducida a partir de la Interpolación Compacta del Momento (Ecuaciones (4.11) y (4.8)):

$$a_P^{pp} = a^{pp,CMI} + a^{pp,\tau} \quad , \quad (4.19)$$

con

$$a_P^{pp,CMI} = \sum_{nb(P)} \rho_{nb} A_{nb} \frac{1}{1 + [\beta^t]_{nb} + [\beta^\tau]_{nb}} \left[\frac{1}{a} \right]_{nb} A_P \quad , \quad (4.20)$$

y

$$a_P^{pp,\tau} = \frac{V_P}{U^2 \Delta\tau} \quad . \quad (4.21)$$

Los coeficientes a_P^{pu} y a_P^{pv} , por su parte, provienen del término correspondiente a la interpolación lineal de la velocidad en el cálculo del flujo másico a través de las caras (ver Ecuación (4.7)):

$$a_P^{pu} = A(\rho_e(1 - \lambda_e) - \rho_w(1 - \lambda_w)) \quad (4.22)$$

$$a_P^{pv} = A(\rho_n(1 - \lambda_n) - \rho_s(1 - \lambda_s)) \quad (4.23)$$

¹Es interesante destacar que este término es nulo para las celdas norte y sur (en decir, en la sub-matriz \mathbf{A}_N , $a_N^{up} = 0, a_S^{up} = 0$)

Capítulo 5

Detalles algorítmicos

En este capítulo se describen aspectos concretos, no tratados previamente, del algoritmo empleado para la resolución de los problemas presentados en el capítulo de resultados. Dichos aspectos incluyen la resolución del sistema lineal, las condiciones de contorno y la implementación del algoritmo en un código paralelo desarrollado en el presente trabajo de investigación.

5.1. Resolución del sistema en forma delta

A la hora de resolver el sistema lineal se utiliza la forma de corrección (o delta): $\mathbf{A}\Delta\Phi = \mathbf{R}$, donde el vector incógnita $\Delta\Phi$ contiene la corrección de las variables dependientes entre dos iteraciones (exteriores) consecutivas: $\Delta\Phi = \Phi^k - \Phi^{k-1}$. El término de la derecha de la ecuación es el vector residuo, que proviene de la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes: $\mathbf{R} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\Phi^{k-1}$. Cuando se alcanza la convergencia tanto el vector corrección como el residuo son despreciables y se obtiene la solución del sistema discretizado original. Una ventaja de esta representación en forma delta es que las técnicas de preconditionamiento para acelerar la convergencia se aplican exclusivamente a la matriz del lado izquierdo (que puede ser distinta a la incluida en el lado derecho).

El algoritmo acoplado e implícito propuesto engloba un proceso de sustitución sucesiva y un paso de tiempo dual. Esto implica la resolución de un sistema lineal grande (aunque hueco) en cada iteración (exterior) y, en flujos no estacionarios, en cada paso de tiempo. Así, el comportamiento del algoritmo completo depende en gran medida de la robustez y eficiencia del método iterativo (*solver*) elegido para resolver cada sistema lineal. Estos dos requisitos suelen ser contradictorios de tal manera que un *solver* específica-

mente diseñado para un problema puede ser muy eficiente en la resolución de dicho flujo, pero no converger cuando se intenta aplicar a otro problema.

En este trabajo se ha dado mayor importancia a la robustez del algoritmo con el objetivo de que se pueda aplicar a una amplia variedad de flujos. Por este motivo, los problemas presentados en esta memoria han sido resueltos utilizando el método GMRES [95] para buscar la solución de cada sistema lineal. Aunque existen otros métodos de sub-espacio de Krylov con menor coste computacional (tales como BiCGSTAB y TFQMR), la convergencia del *solver* GMRES tiene la ventaja de minimizar la norma del residuo en cada iteración (interior). La descripción detallada del algoritmo llevado a cabo por el método GMRES se encuentra en bibliografía especializada (ver por ejemplo [95]). No obstante, para limitar su coste en memoria computacional se usa una implementación con 'restart': GMRES(m); es decir, después de m iteraciones el *solver* reinicia su proceso de búsqueda del residuo mínimo (en este trabajo m se ha fijado en $m = 15$). Además, se aplica un preconditionador de Jacobi para acelerar la convergencia. Aunque el método ILU parezca *a priori* más apropiado como preconditionador puesto que trata de una manera global la matriz de coeficientes y, por tanto, tiene en cuenta mejor el acoplamiento entre ecuaciones, se ha mostrado menos robusto en 'experimentos numéricos' que el preconditionador Jacobi (en un mismo caso, el coeficiente de relajación inercial tiene más influencia en la convergencia del método cuando se usa ILU).

5.2. Control de las iteraciones exteriores e interiores

Una vez definido el sistema lineal de ecuaciones y el *solver* empleado para su resolución, la eficiencia del algoritmo acoplado e implícito depende del número de veces que se tiene que aplicar (iteraciones exteriores) y de las iteraciones que necesita para encontrar una solución a cada sistema lineal (iteraciones interiores).

El número de iteraciones exteriores está relacionado con el factor de relajación. Como se mostró en el capítulo anterior, el principal papel de la relajación inercial en el presente algoritmo implícito es asegurar la dominancia diagonal de la matriz de coeficientes. Inspeccionando el sistema acoplado, se puede inferir una estimación del falso paso temporal, favoreciendo así la robustez del método.

En las ecuaciones de cantidad de movimiento, los coeficientes fuera de la diagonal que deben ser compensados por el término de relajación provienen

de la discretización del gradiente de presión (a^{vip} en la sub-matriz (2.21)). Así, el orden de magnitud del falso paso temporal, $\Delta\tau_0$, puede estimarse de la siguiente forma:

$$\frac{\rho V}{\Delta\tau_0} U \approx A(\rho U^2) \therefore \Delta\tau_0 \approx \Delta x/U \quad , \quad (5.1)$$

donde U es una velocidad característica y Δx es el tamaño típico de una celda.

Respecto a la ecuación de la presión, los coeficientes extra por ser el sistema acoplado provienen de los términos de interpolación lineal de las velocidades a las caras:

$$\frac{1}{U^2} \frac{V}{\Delta\tau_0} \rho U^2 \approx \rho A U \therefore \Delta\tau_0 \approx \Delta x/U \quad . \quad (5.2)$$

Por tanto, el orden de magnitud del falso paso temporal estimado para que la matriz sea diagonalmente dominante en las filas correspondientes a las ecuaciones de cantidad de movimiento es el mismo que en las de continuidad: el tiempo de residencia típico en la celda $\Delta\tau_C = \Delta x/U$.

Por otra parte, el criterio de convergencia controla el número total de iteraciones exteriores y se establece en función de la norma L2 de los vectores residuo (\mathbf{R}) y corrección ($\Delta\Phi$), junto con los necesarios valores de referencia. Una normalización apropiada es especialmente importante en flujos no estacionarios ya que el cambio al siguiente paso de tiempo debería ser controlado de una manera automática por el criterio de convergencia. Se considera que valores de referencia tomados de la propia formulación del sistema son más generales que aquellos definidos a partir de magnitudes características (a especificar para cada problema particular). En este trabajo se ha optado por dividir la norma del residuo por la norma del producto de la matriz de coeficientes y el vector incógnita; la norma de la corrección se divide por la norma del propio vector incógnita:

$$C_R = \|R\|/\|A\Phi\| \quad ; \quad C_{\Delta\Phi} = \|\Delta\Phi\|/\|\Phi\| \quad (5.3)$$

En la resolución acoplada del sistema, se considera que la solución ha convergido cuando cada variable tomada por separado satisface el criterio de convergencia.

Aparte del control de las iteraciones (exteriores) del proceso de sustitución sucesiva (Picard), es necesario limitar el número de iteraciones interiores llevadas a cabo por el *solver* lineal GMRES, con el propósito de encontrar un buen balance entre precisión y coste computacional. Si bien no tiene sentido alcanzar soluciones muy precisas del sistema lineal con coeficientes

provisionales, la convergencia del procedimiento de Picard puede verse comprometida debido a una estimación demasiado ruda del vector incógnita. En este algoritmo no se fija un número constante de iteraciones interiores, sino que se determina de manera dinámica en función de la reducción, respecto a la iteración exterior anterior, de los coeficientes que controlan la convergencia (C_R y $C_{\Delta\Phi}$). Este factor de reducción es tomado como 0.5 y, así, el solver lineal itera (en k) mientras $C^k > C^{k-1}/10$. En las historias de la convergencia mostradas en el Capítulo 6, se observa que el número de iteraciones interiores es variable en las primeras etapas y tiende a un valor constante hacia el final del proceso de Picard, cuando el residuo disminuye exponencialmente. Además, el número de iteraciones interiores está relacionado con el factor de relajación de tal manera que su límite asintótico es menor cuanto mayor es la relajación aplicada (como cabía esperar).

5.3. Implementación de las condiciones de contorno

Las condiciones de contorno impuestas en las ecuaciones generales de Navier-Stokes definen el problema particular a resolver. En la discretización de las ecuaciones mediante el método de volúmenes finitos la necesidad de imponer condiciones de contorno surge de una manera natural cuando se intenta aplicar la forma integral de las ecuaciones de conservación a una celda frontera del dominio (Ecuación (2.5)). La ausencia de una celda vecina (ver Figura 5.1) impide el cálculo del flujo convectivo y difusivo a través de la cara frontera siguiendo las aproximaciones generales de interpolación empleadas en las celdas interiores del dominio. Por tanto, es necesario imponer dichos flujos sin incrementar el número de incógnitas del sistema: o son conocidos o deben calcularse usando valores de las variables incógnita, almacenadas en las celdas del dominio. Conviene remarcar que, aunque las condiciones de contorno afectan habitualmente a una pequeña proporción de celdas, la forma de implementarlas influye notablemente tanto en la calidad de la solución obtenida como en la velocidad de convergencia. Así, por ejemplo, condiciones inapropiadas impuestas en la salida de un dominio abierto pueden afectar al flujo aguas arriba. Por otra parte, la resolución acoplada e implícita de las ecuaciones de Navier-Stokes requiere, cuando es posible, una implementación igualmente implícita de las condiciones de contorno para no aumentar innecesariamente el número de iteraciones exteriores ([89]).

En la malla colocalizada usada en este trabajo el límite del dominio computacional coincide con las caras externas de las celdas frontera (ver Figu-

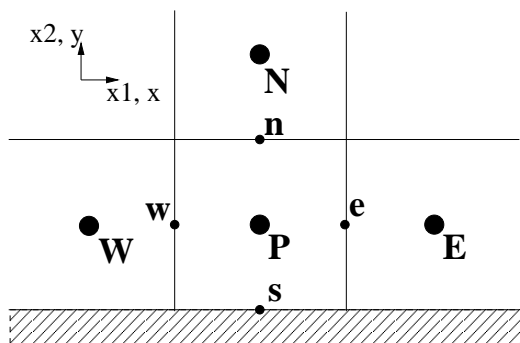


Figura 5.1: Frontera sur del dominio computacional.

ra 5.1) y la estrategia para implementar las condiciones de contorno consiste en representarlas como una fuente añadida a cada ecuación de conservación, linealizada de la siguiente forma para el sistema acoplado:

$$S_P^{\phi_1, \phi_2} = -a_P^{\phi_1 \phi_2} \phi_{2P} - \sum_{NB} a_{NB}^{\phi_1 \phi_2} \phi_{2NB} + b_P \quad , \quad (5.4)$$

donde $S_P^{\phi_1, \phi_2}$ es una condición de contorno para la variable ϕ_2 impuesta en la ecuación de ϕ_1 . En el sistema acoplado, las ecuaciones de momento requieren condiciones de contorno para la presión ($S^{viP} \neq 0$); asimismo la ecuación para la presión incluye flujos máscicos a través de las caras ($S^{pvi} \neq 0$). Los coeficientes (implícitos) $a^{\phi_1 \phi_2}$ son sumados a elementos de la matriz que multiplican a la incógnita ϕ_2 y pueden afectar tanto a la variable almacenada en el propio nodo a_P o en nodos vecinos a_{NB} (este es el caso, por ejemplo, si se emplean extrapolaciones de nodos interiores para calcular valores en la cara frontera). Los coeficientes b_P , por su parte, se calculan explícitamente y se añaden al vector fuente.

En general, las condiciones de contorno para una ecuación diferencial se clasifican en dos grandes grupos: Dirichlet, que fijan el valor de la variable en el contorno; y Neumann, que imponen una condición para la derivada normal. En el caso de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes, sin embargo, surgen algunas particularidades y las condiciones de contorno se clasifican según los límites impuestos al flujo. Así, condiciones habituales son una entrada de flujo, una pared, un plano de simetría, o una salida de flujo. En estos contornos es necesario especificar el flujo convectivo y difusivo para todas las ecuaciones y la fuerza de presión para la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección correspondiente. En esta memoria no se pretende hacer un análisis exhaustivo de las posibles formas de implementar las condiciones de contorno, sino que se especifican los coeficientes implícitos y explícitos insertados en las ecuaciones para las celdas frontera que producen soluciones

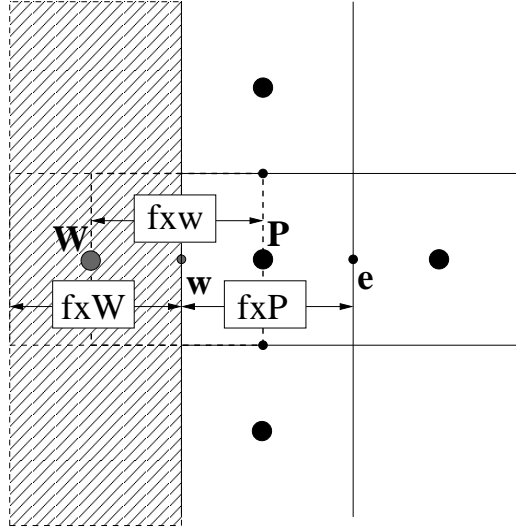


Figura 5.2: Fuerzas de presión (incógnitas) involucradas en el cálculo del flujo másico a través de la frontera oeste.

satisfactorias de los flujos resueltos durante el presente trabajo de investigación.

5.3.1. Tratamiento de la corrección de la interpolación del momento en los contornos

Una mención especial merece el tratamiento en los contornos de las variables adicionales introducidas por la técnica de interpolación del momento aplicada en el presente algoritmo (ver Capítulo 3). Dichas variables son las velocidades de convección, que intervienen en el cálculo del flujo de masa y son almacenadas en las caras de las celdas (en un problema bidimensional son: u_e^{CMI} , u_w^{CMI} , v_n^{CMI} y v_s^{CMI}). En las celdas interiores estas variables se calculan como una interpolación lineal de las velocidades incógnitas (almacenadas en los centros de las celdas) y un término de corrección (por ejemplo, $u_w^{CMI} = [u]_w + u_w^{CMI}$), que incluye fuerzas de presión en la dirección correspondiente (ver Ecuación (3.8)). El tratamiento dado a estas variables en las caras frontera del dominio consiste en descartar el término de corrección y aplicar la condición de contorno directamente a la velocidad incógnita. Así, por ejemplo, si la cara oeste es una entrada de flujo con velocidad U , entonces

$$\rho A u_w^{CMI} = \rho A U \quad (5.5)$$

es el flujo másico en la entrada. La eliminación del término de corrección de la interpolación del momento implica que la fuerza de presión sobre una celda

imaginaria centrada en la cara frontera oeste (ver Figura 5.2) es igual a la interpolación lineal de las fuerzas de presión sobre las celdas adyacentes a la cara (la celda W es también imaginaria puesto que cae fuera del dominio):

$$f_{xw} = (f_{xW} + f_{xP})/2 = f_{xP} \quad \implies \quad p_W - p_P = p_w - p_e \quad . \quad (5.6)$$

Además, es necesario tener en cuenta que esta condición también afecta a la cara interior de la celda frontera (en el ejemplo, la cara este) puesto que el cálculo de la velocidad u_e^{CMI} involucra la interpolación lineal de la fuerza de presión sobre las celdas adyacentes a la cara. En concreto, $f_{xP} = p_w - p_e$ y p_w es un valor incógnita de la presión en la frontera. En este trabajo se ha decidido, para favorecer la consistencia de las condiciones de contorno aplicadas a la presión, imponer un gradiente nulo en todas las caras frontera (es decir, $p_W = p_w = p_P$ en el ejemplo).

El comportamiento de esta aproximación ha sido satisfactorio en los casos resueltos durante este trabajo de investigación, obteniéndose contornos de presión suaves cerca de las paredes, incluso cuando se usan mallas sin refinamiento cerca de las paredes y se consideran fuerzas de volumen como la flotabilidad (algunos autores han descrito la obtención de soluciones no realistas en estos supuestos [19]).

5.3.2. Pared

En el presente trabajo se representa una pared imponiendo una velocidad igual a la de la pared (U) en la cara frontera y calculando las derivadas presentes en los flujos difusivos mediante la diferencia finita entre el valor de la velocidad en la pared y en el propio nodo (en una pared situada al norte de la celda: $\partial u/\partial y = 2(U - u_P)/\Delta y^1$). Respecto a la presión, considerando el razonamiento expuesto en el apartado anterior, se ha impuesto gradiente nulo. La Tabla 5.1 (pág. 59) muestra los coeficientes de la fuente expresada según la Ecuación (5.4) para las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad (ecuación para la presión) suponiendo que la pared se encuentra en la cara norte.

5.3.3. Entrada de flujo

Se define una entrada de flujo especificando la velocidad de entrada (en caso de ρ y μ constantes) y se considera que el gradiente de todas las variables (velocidad horizontal, vertical y presión) es nulo. En el caso de la velocidad,

¹En flujos incompresibles, la ecuación de continuidad implica que el esfuerzo viscoso normal a la pared sea también nulo ($\partial v/\partial y = 0$).

esta condición equivale a aplicar el esquema convectivo *Upwind* en dichas celdas. Los coeficientes implícitos y explícitos que se obtienen a partir de estas premisas se muestran en la Tabla 5.2.

5.3.4. Plano de simetría

La condición de contorno de plano de simetría puede aplicarse tanto en flujos internos (por ejemplo, en el eje axisimétrico de una configuración cilíndrica) como en flujos en dominios abiertos (lejos de la zona de interés principal). En ambos casos, esta condición permite reducir el tamaño del dominio computacional, y por tanto el coste en tiempo de cpu y memoria. Un plano de simetría indica que no hay ni flujo convectivo ni flujo difusivo a través de dicho contorno (velocidad normal nula y gradiente nulo para todas las variables). Cabe destacar que, en el caso de dominios abiertos, el plano de simetría debe estar lo suficientemente alejado de la zona de interés para que el flujo ahí no se vea afectado. En la Tabla 5.3 se especifican los coeficientes en la ecuación discretizada correspondientes a esta condición de contorno.

5.3.5. Salida de flujo

Las condiciones de contorno impuestas en la salida del flujo en un dominio abierto no deben afectar al flujo aguas arriba. En los casos tratados en este trabajo que han requerido imponer condiciones de contorno en la salida (desprendimiento de vórtices tras el paso alrededor de un cilindro cuadrado, escalón en un canal y expansión brusca en una tubería), se ha optado por alejar suficientemente la salida de la zona de interés con el propósito de minimizar el impacto de su tratamiento (tanto en los resultados como en el procedimiento iterativo) y se ha considerado gradiente nulo para todas las componentes de la velocidad (condición equivalente a considerar un esquema convectivo *Upwind* en la salida).

Respecto a la presión, se han utilizado dos tratamientos diferentes en los problemas resueltos en el Capítulo 6. Por un lado, en la salida del flujo al final de una tubería o canal se ha impuesto una presión constante e igual a cero (ver los coeficientes insertados en la Tabla 5.4). El problema del flujo tras un cilindro cuadrado, en cambio, es un caso de flujo no confinado, en el que la necesidad de imponer condiciones de contorno es debida al hecho de tener un dominio computacional finito. En este caso, se ha aplicado gradiente nulo a la presión, al igual que a las componentes de la velocidad. En las simulaciones realizadas se ha observado que esta estrategia, caracterizada por no fijar la presión *a priori* en ningún punto del dominio, favorece la velocidad de convergencia del proceso iterativo puesto que los nodos frontera en la salida

(que inicialmente no se ven afectados por la perturbación de la entrada) tratan de adaptarse a las condiciones con las que llega el flujo.

5.3.6. Condiciones de contorno periódicas

Las condiciones de contorno periódicas son un recurso computacional utilizado en CFD para simular un patrón de flujo que se repite; es el caso del conocido problema con solución analítica de decaimiento de vórtices de Taylor-Green. En aplicaciones más realistas, se usan habitualmente en la simulación de la turbulencia cuando, por ejemplo, el flujo tiene dos direcciones predominantes, mientras que la velocidad media en la tercera dirección es nula. La manera de implementar estas condiciones consiste en considerar adyacentes las celdas frontera de los contornos opuestas (norte-sur y este-oeste), de manera que todas las celdas del dominio tienen todos los vecinos y las reglas de interpolación generales se pueden aplicar sin excepción. Así, no es necesario imponer ninguna condición de contorno.

Tabla 5.1: Condiciones de contorno. Pared en la cara norte moviéndose en dirección horizontal con velocidad U .

ϕ_1	$a^{\phi_1,u}$	$a^{\phi_1,v}$	$a^{\phi_1,p}$	b
u	$2\mu_n A_n / \Delta y$	0	0	$2\mu_n A_n U / \Delta y$
v	0	$2\mu_n A_n / \Delta y$	A_n	0
p	0	0	0	0

Tabla 5.2: Condiciones de contorno. Entrada de flujo en la cara oeste con velocidad U .

ϕ_1	$a^{\phi_1,u}$	$a^{\phi_1,v}$	$a^{\phi_1,p}$	b
u	0	0	$-A_w$	$\rho_w A_w U^2$
v	0	0	0	0
p	0	0	0	$\rho_w A_w U$

Tabla 5.3: Condiciones de contorno. Plano de simetría en la cara sur.

ϕ_1	$a^{\phi_1,u}$	$a^{\phi_1,v}$	$a^{\phi_1,p}$	b
u	0	0	0	0
v	0	0	$-A_s$	0
p	0	0	0	0

Tabla 5.4: Condiciones de contorno. Salida de flujo en la cara este. En el caso del coeficientes $a^{u,p}$ se escribe su valor tanto si se supone presión constante e igual a 0 ($a^{u,p} = 0$) como gradiente nulo ($a^{u,p} = -A_e$) en la salida.

ϕ_1	$a^{\phi_1,u}$	$a^{\phi_1,v}$	$a^{\phi_1,p}$	b
u	$\rho_e A_e u_P$	0	0	0, $-A_e$
v	0	$\rho_e A_e u_P$	0	0
p	$\rho_e A_e$	0	0	0

5.4. Código computacional paralelo

Una fracción significativa del presente trabajo de investigación se ha dedicado al desarrollo de un código de CFD (MICs), en el que se ha implementado el algoritmo acoplado descrito en esta memoria.

Los requisitos (a largo plazo) planteados inicialmente para el código fueron que proporcionase una herramienta flexible y extensible donde probar tanto algoritmos numéricos como modelos físicos de las ecuaciones de Navier-Stokes. Además, puesto que la resolución de flujos turbulentos es un tema de investigación abierto en el campo de CFD y el modelo más prometedor (la Simulación de Grandes Escalas, LES) requiere habitualmente un gasto computacional alto, se optó por hacer un código capaz de dividir la malla y resolver cada sub-dominio en paralelo en varias máquinas. Ambos requisitos podían ser satisfechos utilizando la librería accesible PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific computation) desarrollada en el Argonne National Laboratory (USA) ([6], [4], [5]). PETSc está escrita en lenguaje de programación C y es de bajo nivel referido a la fluidodinámica computacional. Esto quiere decir que aporta estructuras de datos y subrutinas (como vectores y matrices distribuidas o *solvers* lineales) para la solución en paralelo de problemas formulados mediante ecuaciones en derivadas parciales (el núcleo de la fluidodinámica computacional) sin coartar las posibilidades de modelización de las ecuaciones por parte del usuario. PETSc emplea el paquete estándar MPI (Message Passing Interface [41], [42]) para la comunicación entre procesadores.

La paralelización de códigos de CFD se basa habitualmente en la descomposición del dominio. Cada sub-dominio es asignado a un procesador que resuelve el sistema de ecuaciones algebraico correspondiente; lógicamente debe existir un intercambio de datos entre procesadores que comparten frontera de submalla puesto que nodos vecinos están relacionados en las ecuaciones discretizadas. El código desarrollado se ha apoyado en estructuras de datos y subrutinas de la librería PETSc útiles para definir un sistema algebraico, distribuirlo en varias máquinas y resolver cada sub-sistema localmente. De esta forma, se evitan tareas de programación como la comunicación entre procesadores o los algoritmos de los *solvers* lineales. Así, el código debe encargarse principalmente de la evaluación (local) de los coeficientes del sistema acoplado según el algoritmo propuesto en este trabajo y de su inserción en las estructuras correspondientes de PETSc. A continuación, se describe someramente esta interacción.

El objeto PETSc que maneja la paralelización del dominio es el *Array Distribuido* (DA, en sus siglas en inglés). A partir de una serie de datos de entrada, como son el número global de nodos, el número de procesadores,

Tabla 5.5: Ejemplo de partición de malla. Numeración global (izquierda) y local a un procesador (derecha) de las celdas de la malla, según el objeto DA de PETSc.

proc 2			proc 3		proc 2			proc 3	
22	23	24	29	39	x	x	x	x	x
19	20	21	27	28	x	x	x	x	x
16	17	18	25	26	13	14	15	x	x
7	8	9	14	15	9	10	11	12	x
4	5	6	12	13	5	6	7	8	x
1	2	3	10	11	1	2	3	4	x
proc 0			proc 1		proc 0			proc 1	

el tipo y la anchura del halo (conjunto de nodos frontera), y los grados de libertad por nodo (o número de variables resueltas acopladas), el DA distribuye el dominio y proporciona una relación entre la numeración global y local (en cada procesador) de los nodos de la malla. La numeración local tiene en cuenta también las celdas del halo (ver Tabla 5.5). Además, este DA genera una plantilla sobre la que se construyen otros objetos útiles para la resolución en paralelo de un sistema algebraico $\mathbf{A}\Delta\phi = \mathbf{b}$, como son vectores y matrices distribuidos. Estos vectores y matrices de PETSc no son simplemente *arrays* de C, sino estructuras que contienen información adicional útil para su tratamiento en la paralelización. Una vez construido el sistema algebraico, PETSc también proporciona una variedad de métodos iterativos para resolver el sistema en la malla local.

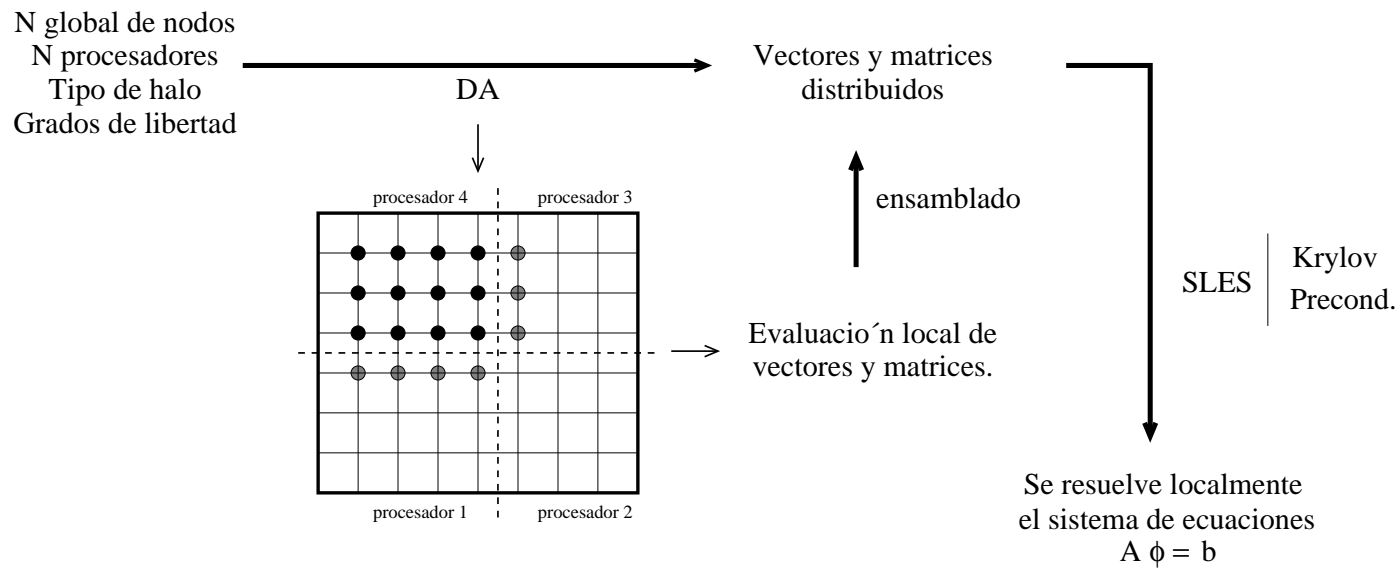


Figura 5.3: Estrategia de paralelización usando PETSc.

Un diagrama básico de la estrategia de paralelización seguida en el desarrollo de este código aparece en la Figura 5.3. En primer lugar, se llama al DA, que se encarga de la distribución del dominio y sobre él se crean las estructuras de PETSc que representan los vectores y la matriz distribuidos del sistema algebraico a resolver. Para evaluar los coeficientes de estos objetos, el código propio define *arrays* de C estándar, que son locales y a los que asigna memoria en función del número de nodos de la porción de malla correspondiente (incluyendo el halo), y recorre la malla local siguiendo la numeración global, que ‘traduce’ al índice local de dichos *arrays* ‘de trabajo’ empleando información proporcionada por el DA. Una vez evaluados, inserta los coeficientes en los objetos matriz y vector correspondientes y llama a la subrutina de PETSc que los ensambla. Por último, encarga al *solver* de PETSc, *SLES*, correspondiente la resolución del sistema lineal en paralelo. El vector solución obtenido sirve para la nueva evaluación de los coeficientes en el bucle del proceso iterativo de Picard.

Se presentan más detalles de las estructuras de datos y diagramas de flujo del código desarrollado en el apéndice A de esta memoria.

Capítulo 6

Resultados. Comportamiento del algoritmo acoplado

La verdad es concreta.

- Bertolt Brecht

En los apartados que componen este capítulo se analizan los nuevos algoritmos propuestos en este trabajo. En primer lugar, se comprueba que la formulación mejorada de la Interpolación del Momento conduce a soluciones independientes tanto de la relajación como del paso temporal. El comportamiento del preconditionamiento, especialmente su robustez, es analizando mediante la utilización de diferentes tamaños de falso paso temporal y diferentes densidades de malla en la resolución de un mismo problema (cavidad movida por pared móvil a $Re = 1000$). Este mismo flujo a números de Reynolds más altos ($Re = 5000$ y $Re = 10000$), y el flujo generado en una cavidad por una variación de temperatura grande sirven como test para evaluar la eficiencia y precisión alcanzada por el algoritmo acoplado cuando se resuelven flujos altamente dominados por la convección (primer caso) y con densidad variable (segundo caso). A continuación, se comprueba que la utilización de un esquema implícito y una linealización tipo Picard en un algoritmo acoplado es factible para resolver un problema no estacionario, mediante la simulación de la estela (laminar) formada por el desprendimiento periódico de vórtices tras un cilindro cuadrado. Por último, se ilustra la ganancia en robustez que implica un algoritmo acoplado (respecto a uno segregado) mediante la comparación de la velocidad de convergencia en la resolución de distinta manera de dos problemas: el flujo tras una expansión brusca en una tubería utilizando coordenadas cilíndrico-polares, con los dos términos adicionales debido al cambio del sistema de coordenadas incluidos implícitamente en la matriz de coeficientes o diferidos al lado derecho de la

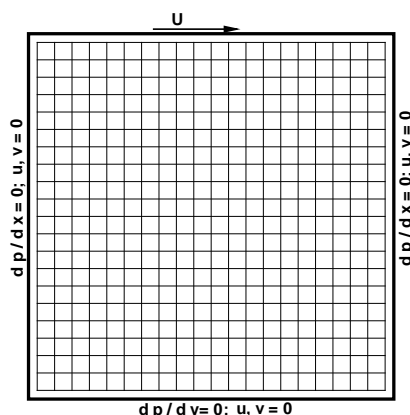


Figura 6.1: Cavidad con pared móvil. Esquema del problema y condiciones de contorno.

ecuación; y la resolución acoplada o segregada (tratando explícitamente los coeficientes de acoplamiento de la matriz: es decir, $a^{\phi_1\phi_2} = 0 \quad \forall \quad \phi_1 \neq \phi_2$) de las ecuaciones de cantidad de movimiento y de continuidad en el flujo en una cavidad cuadrada con una pared móvil a $Re = 1000$.

6.1. Validación de la Interpolación Compacta del Momento (CMI)

En esta sección se estudia el comportamiento del esquema de Interpolación Compacta del Momento propuesto en este trabajo (Apartado 3.4) mediante la resolución de dos problemas típicos de validación. El primero es el flujo en una cavidad cuadrada con una pared móvil y el segundo es el problema de decaimiento de vórtices de Taylor-Green, para el que existe solución analítica.

6.1.1. Flujo en una cavidad con pared móvil. $Re = 100$

El flujo en una cavidad con pared móvil es un problema test empleado con frecuencia para la validación de algoritmos numéricos ya que se manifiestan fenómenos de flujo complejos en una configuración geométrica simple [97]. Aquí es usado para validar el método de Interpolación Compacta del Momento.

Con este propósito, se resuelve el flujo bidimensional a bajo número de Reynolds ($Re = 100$) en una malla uniforme y gruesa (21×21). El esquema de discretización usado para las variables transportadas es el CDS

Tabla 6.1: Cavity con pared móvil. Comparación del efecto del tamaño de paso temporal en la solución convergida usando la OMI y el esquema propuesto CMI.

u/U para $\Delta t/t_D \Rightarrow$	0.1	1.0	10
OMI	$-1.975054e^{-1}$	$-1.976056e^{-1}$	$-1.976187e^{-1}$
CMI	$-1.976542e^{-1}$	$-1.976542e^{-1}$	$-1.976542e^{-1}$

(o interpolación lineal). En las paredes, se imponen condiciones de contorno de no deslizamiento para las velocidades y gradiente nulo para la presión. Un esquema del problema aparece en la Figura 6.1. Se estudia el efecto de la relajación en la solución convergida resolviendo las ecuaciones para flujo estacionario. Asimismo, se resuelve la evolución transitoria del flujo desde un estado inicial en reposo cuando, en $t = 0$, el movimiento de la pared comienza bruscamente hasta que se alcanza el estado estacionario, con el objetivo de analizar el efecto del tamaño del paso temporal en la solución convergida y estacionaria. En ambos casos, se considera que se ha alcanzado la convergencia cuando la norma del residuo (tal y como se definió en el Apartado 5.2) es menor que $1.0e^{-15}$.

La Tabla 6.1 muestra la componente horizontal de velocidad en el centro de la cavity obtenida en la resolución de la evolución transitoria del flujo hacia el estado estacionario. Se emplea el esquema Euler de primer orden y varios tamaños de paso temporal ($t/t_D = 0.1$, $t/t_D = 1.0$ y $t/t_D = 10$, siendo $t_D = L/U$ el tiempo característico del problema; en todos los casos, el falso paso temporal es $\Delta\tau/t_C = 10$). Los resultados obtenidos con el método propuesto (CMI) se comparan con el método de interpolación del momento original. Dicha tabla indica que la OMI proporciona resultados estacionarios y convergidos dependientes del paso de tiempo, mientras que el esquema CMI conduce a un único valor. Como se mencionó en el Apartado 3.3.1, Yu *et al.* [115] demostraron que la propuesta para mejorar el OMI de Choi [18] conduce a resultados que todavía dependen (aunque menos) del paso temporal.

La investigación del nuevo método CMI es ampliada mediante la exploración del efecto de la relajación inercial en la resolución estacionaria del flujo (Ecuación (3.50) con $\beta^t = 0$ y $\beta^r = \beta^\tau$) y de la combinación de varios coeficientes de relajación y tamaños de paso de tiempo en la resolución de la evolución transitoria del flujo usando los diferentes esquemas temporales analizados en el Capítulo 3. Los falsos paso temporales son comparados con un tiempo de residencia en la celda típico $t_C = \Delta x/L/U$. Como se muestra en la Tabla 6.2, el coeficiente de relajación en los casos analizados abarca desde falsos pasos temporales pequeños ($\Delta\tau/t_C = 0.1$) hasta grandes

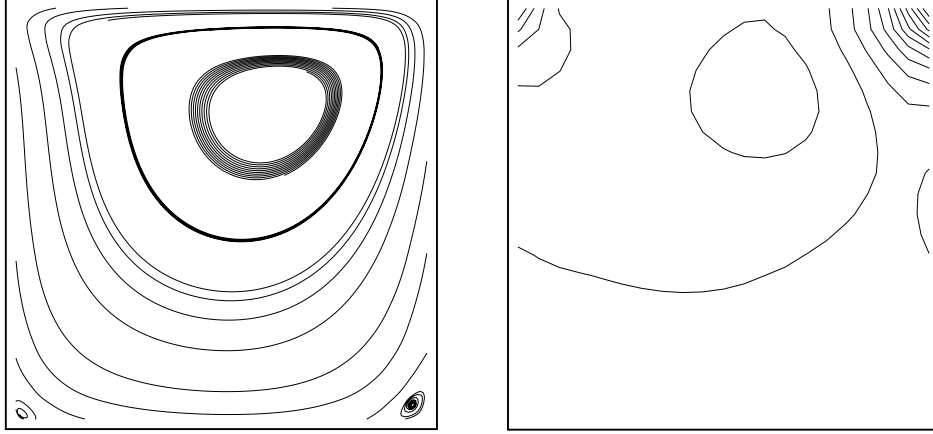


Figura 6.2: Cavidad con pared móvil, $Re = 100$, malla 21×21 . Líneas de corriente (izquierda) y contornos de presión (derecha) en la convergencia.

($\Delta\tau/t_C = 100$). En todos los casos se obtiene la misma solución convergida y estacionaria en el centro de la cavidad hasta las seis primeras cifras significativas ($u/U = -1.976542e^{-1}$ y $v/U = 5.874665e^{-2}$). Esta independencia se deduce (fácilmente) de la inspección de la ecuación para la corrección CMI (ver Apartado 3.4). No se ha validado aquí la formulación para tener en cuenta la relajación lineal porque la formulación CMI con $\beta^r = 0$ y $\beta^t = 0$ coincide con la expresión ya analizada por Majumdar [65] y Miller y Schmidt [74].

En la Figura 6.2 se presentan las líneas de corriente y los contornos de presión de los campos convergidos. La ausencia de oscilaciones en el campo de presión indica que el desacoplamiento velocidad-presión típico de mallas colocalizadas ha sido evitado satisfactoriamente por la CMI.

La Figura 6.3 (izquierda) muestra contornos de presión en el instante de tiempo $t/t_D = 0.5$ obtenidos con la expresión OMI y usando un paso muy pequeño $\Delta t/t_D = 0.001$. El campo presenta el típico patrón en zig-zag de mallas colocalizadas. Tomándolo como punto de partida, la simulación es reiniciada haciendo uso del nuevo método CMI; se obtienen contornos suaves (derecha) ya que el presente modelo, a diferencia del modelo original, retiene el término responsable del acoplamiento velocidad-presión incluso en el límite de pasos de tiempo pequeños (como se explicó en el Apartado 3.3.1).

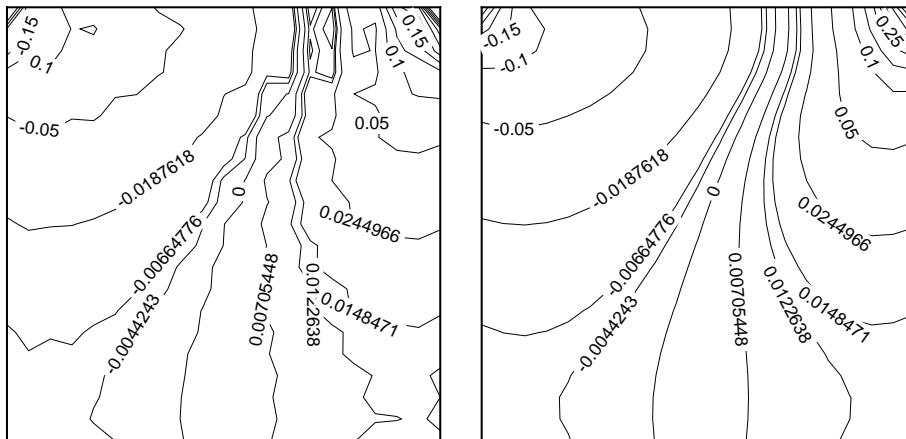


Figura 6.3: Cavity con pared móvil, $Re = 100$, malla 21×21 . Las oscilaciones generadas por el esquema OMI (izquierda) cuando se emplea un paso de tiempo pequeño ($\Delta t/t_D = 0.001$) son eliminadas por el esquema CMI (derecha).

Tabla 6.2: Cavidad con pared móvil. Combinaciones de Δt and $\Delta \tau$ (La solución del estado estacionario y convergido es idéntica para todos los casos).

Resultados \rightarrow		$u/U = -1.976542e^{-1}$ and $v/U = 5.874665e^{-2}$ at $(x/L = 0.5, y/L = 0.5)$									
Esquema temporal \rightarrow		Estacionario	Euler 1st			Euler 2nd			Adams-M. 2nd		
$\Delta t/t_D \rightarrow$			0.1	1.0	10	0.1	1.0	10	0.1	1	10
$\Delta \tau/t_C \downarrow$	0.1	*						*			
	1.0	*		*			*			*	
	10	*	*	*	*		*		*		
	100	*				*			.	*	*

6.1.2. Vórtices de Taylor-Green

En esta sección se comprueba la precisión del método numérico mediante la resolución del decaimiento de los vórtices bidimensionales llamados vórtices de Taylor-Green. Las ecuaciones de Navier-Stokes pueden resolverse analíticamente para este problema transitorio y los errores de discretización, por tanto, pueden calcularse con precisión. El problema se define asumiendo que los campos de las dos componentes de la velocidad y de la presión son periódicos (en el dominio espacial) e imponiendo como condición inicial el siguiente vórtice:

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= -\cos(x) \sin(y) & ; & & (6.1) \\ v(x, y, 0) &= \sin(x) \cos(y) & ; & & \\ p(x, y, 0) &= -[\cos(2x) \cos(2y)]/4 & . & & \end{aligned}$$

Suponiendo viscosidad cinemática $\nu = 1$ (las unidades del problema son irrelevantes mientras se mantengan consistentes), la solución exacta en el espacio y en el tiempo está dada por:

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= -e^{-2t} \cos(x) \sin(y) & ; & & (6.2) \\ v(x, y, t) &= e^{-2t} \sin(x) \cos(y) & ; & & \\ p(x, y, t) &= -e^{-4t} [\cos(2x) \cos(2y)]/4 & . & & \end{aligned}$$

Para la simulación numérica, se emplea un dominio cuadrado que se extiende de 0 a 2π , se imponen condiciones de contorno periódicas (ver Apartado 5.3) y el campo inicial dado por las Ecuaciones (6.2). Se discretiza el dominio con una malla uniforme de 81×81 nodos y se resuelve la evolución transitoria de los vórtices usando los tres esquemas implícitos considerados en este trabajo (ver Apartado 2.4).

Como una ilustración del flujo, la Figura 6.4 presenta los contornos de u , v y p obtenidos en el instante de tiempo $t = 0.5$ usando el esquema Adams-Moulton de segundo orden y un paso de tiempo $\Delta t/t_D = 0.02$. El tiempo de referencia t_D se calcula usando la longitud del lado del dominio computacional y el máximo valor de la componente de la velocidad. En la Figura 6.5 se muestra una comparación de los resultados numéricos con la solución analítica; se presentan perfiles de las tres variables dependientes (u , v y p) a lo largo de la línea horizontal $y = \pi/2$. Estos perfiles han sido obtenidos usando el esquema Euler de segundo orden con un paso de tiempo $\Delta t/t_D = 0.01$. El acuerdo entre la solución computacional y la analítica a lo largo del tiempo, desde el campo inicial hasta la disipación de los vórtices, es excelente.

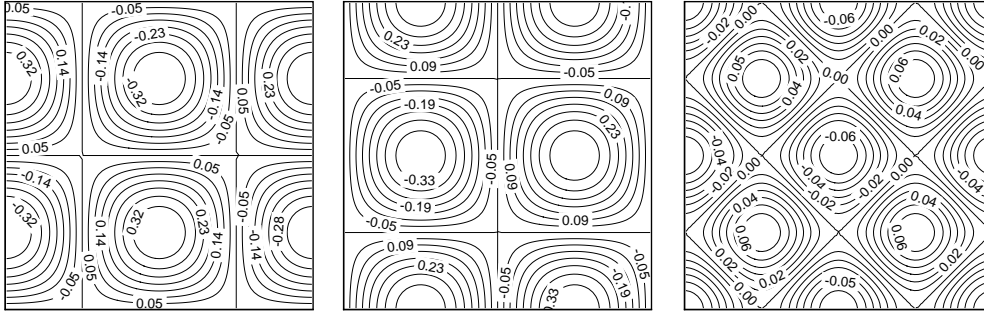


Figura 6.4: Vórtices de Taylor-Green. Contornos de u (izquierda), v (centro) y p (derecha) en $t = 0.50$ obtenidos usando el esquema temporal Adams-Moulton de segundo orden con $\Delta t/t_D = 0.02$.

Finalmente, la precisión real del esquema temporal es establecida mediante el cálculo del error exacto como una función del tamaño del paso temporal. La Figura 6.6 muestra el error relativo de la componente de velocidad u en $x = \pi$, $y = \pi/2$, $t = 0.5$ para los tres esquemas temporales (Euler de primer y segundo orden, y Adams-Moulton de segundo orden). Este ‘ejercicio’ numérico indica que el esquema CMI propuesto para flujos no estacionarios no afecta negativamente a la precisión de los esquemas temporales puesto que se obtiene el orden esperado de aproximación.

6. Resultados. Comportamiento del algoritmo acoplado

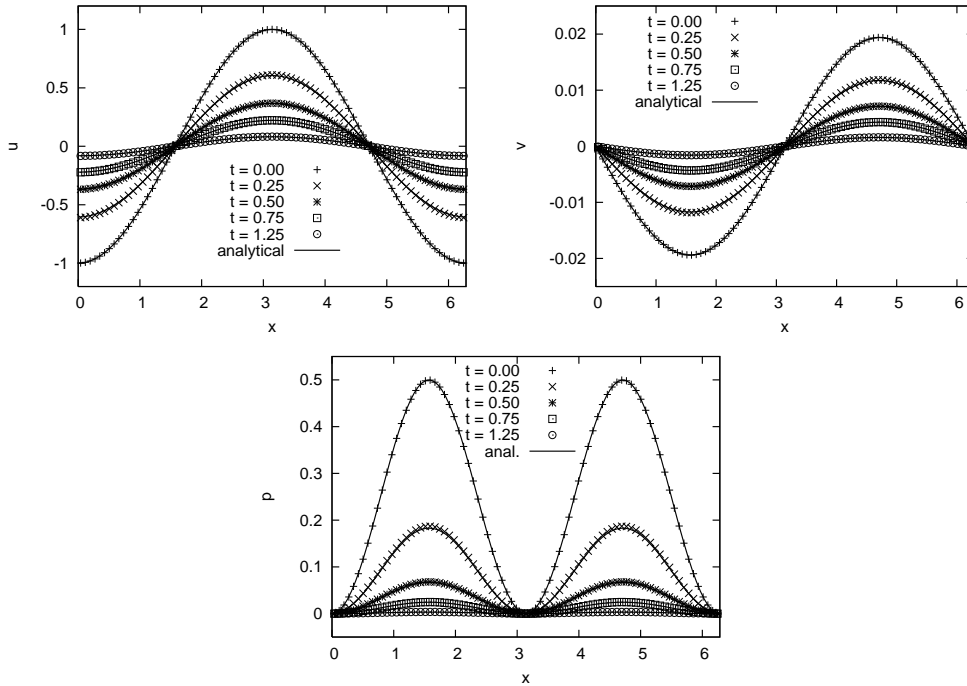


Figura 6.5: Vórtices de Taylor-Green. Evolución de los perfiles de u (izquierda), v (derecha) y p (abajo) en $y = \pi/2$ usando el esquema Euler de segundo orden con $\Delta t/t_D = 0.01$. Comparación con las curvas teóricas.

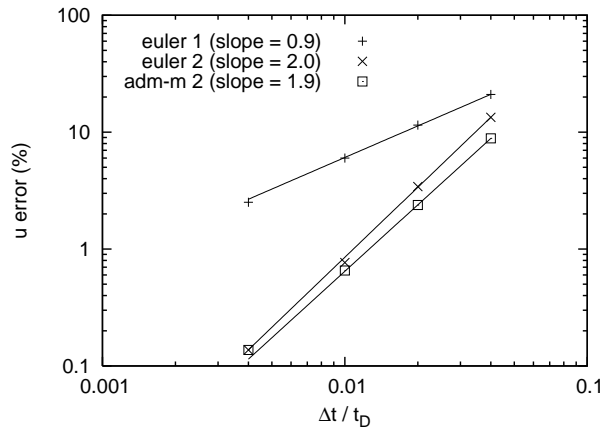


Figura 6.6: Vórtices de Taylor-Green. Error en u en el punto $(x, y, t) = (\pi, \pi/2, 0.5)$ como una función del tamaño de paso temporal Δt para los tres esquemas considerados en este trabajo.

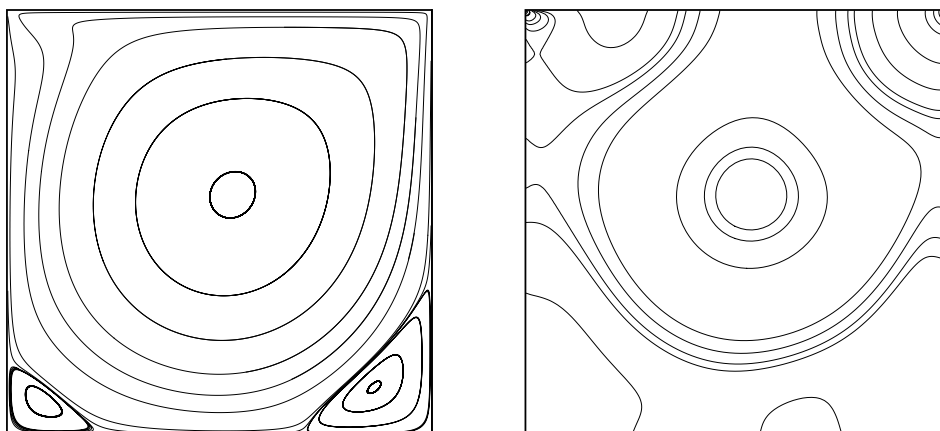


Figura 6.7: Cavity con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Líneas de corriente (izquierda) y contornos de presión (derecha) en la convergencia.

6.2. Flujo en una cavity cuadrada con una pared móvil a $Re = 1000$

En este apartado se estudia el comportamiento del algoritmo mediante la resolución del flujo en una cavity cuadrada con pared móvil a $Re = 1000$. Se analiza tanto la precisión de la solución como la velocidad de convergencia y la robustez del método.

Las condiciones de contorno utilizadas son las mismas que aparecen en el esquema del problema presentado en la Figura 6.1. En las cuatro paredes se aplican condiciones de no deslizamiento para las velocidades y se imponen gradientes nulos en dirección normal para la presión. Se utiliza el esquema convectivo CDS.

Precisión

Para evaluar la precisión del método, los resultados obtenidos con una malla de 128×128 nodos, refinada cerca de las paredes mediante una función tangente hiperbólica, se comparan con la solución de referencia utilizada tradicionalmente (Ghia *et al.* [39]) y con otra más reciente proporcionada por Botella y Peyret [11]. Estos últimos utilizan un método espectral para conseguir una solución de alta precisión y, además del campo de velocidades, proporcionan valores para el campo de presión. La Figura 6.7 muestra las líneas de corriente y los contornos de presión obtenidos en este trabajo. El patrón de flujo es el mismo que el presentado en las soluciones de referencia:

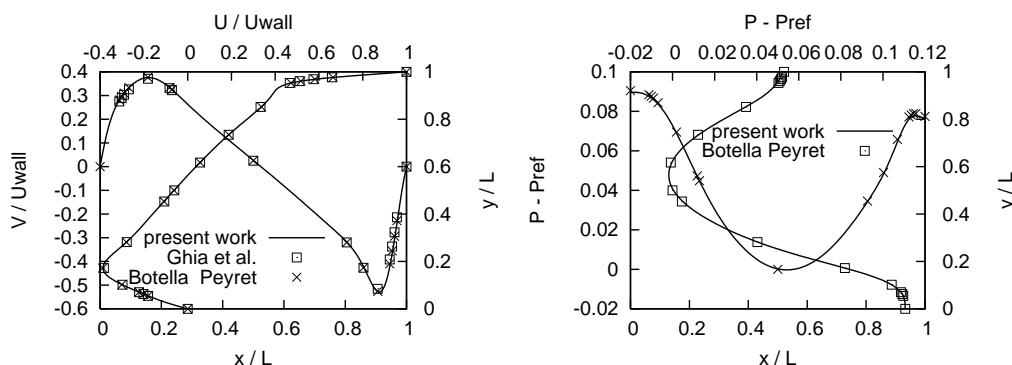


Figura 6.8: Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Comparación de los resultados obtenidos en este trabajo (u , v , $p - p_{ref}$ en las líneas centrales) con las soluciones de referencia de Ghia *et al.* [39] y Botella y Peyret [11].

un vórtice principal con el núcleo próximo al centro de la cavidad y dos vórtices secundarios, generados por la separación del flujo, en las dos esquinas inferiores. Los contornos de presión no presentan oscilaciones, incluso en las cercanías de las esquinas superiores, donde los gradientes son altos (algunos autores como, por ejemplo, Mallan *et al.* en [67] obtienen oscilaciones en estas regiones). Este buen comportamiento se debe probablemente a una implementación cuidadosa de las condiciones de contorno de estos términos de corrección (ver Apartado 5.3.1). La Figura 6.8 presenta perfiles de ambas componentes de velocidad y de la presión en las líneas centrales de la cavidad y muestra que el acuerdo con las dos soluciones de referencia es excelente para las tres variables. Estos resultados indican que ni el tratamiento especial dado a los términos de flujo de masa (respecto a las variables transportadas) ni el acondicionamiento de la ecuación de presión mediante la implementación parcialmente diferida de la interpolación del momento afectan a la precisión de los resultados.

Velocidad de convergencia

A continuación, se presenta un análisis de la velocidad de convergencia para este problema, en función del coeficiente de relajación aplicado. La Figura 6.9 (izquierda) muestra la evolución de la norma del residuo (definida en el Apartado 5.2) para la ecuación de continuidad. Se han utilizado diversos tamaños del falso paso temporal, viz $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 1, 5, 10, 20, 40$, donde $\Delta\tau_C = (D/N)/U_{wall}$ es el tiempo de residencia típico en la celda (siendo D el lado de la cavidad, N el número de celdas en una dirección y U_{wall} la velocidad de la

6. Resultados. Comportamiento del algoritmo acoplado

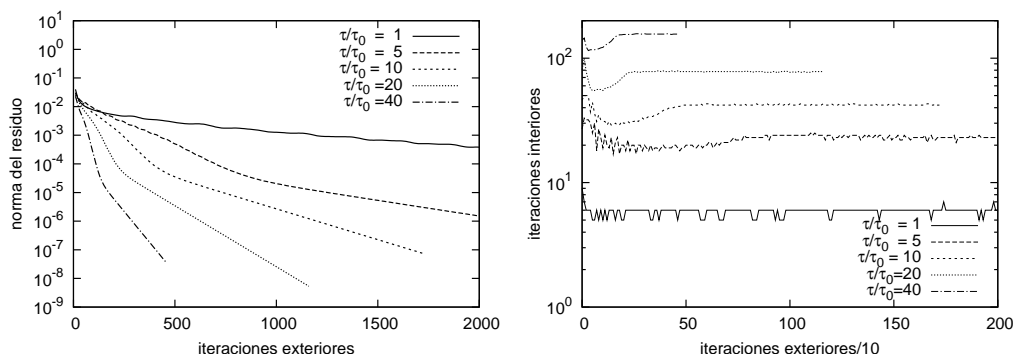


Figura 6.9: Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Historia de la convergencia para varios tamaños de falso paso temporal $\Delta\tau$. Norma del residuo de la ecuación de continuidad (izquierda) y número de iteraciones interiores (derecha) en función de las iteraciones exteriores.

Tabla 6.3: Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$, malla 128×128 . Comparación de la eficiencia del algoritmo para varios tamaños del falso paso temporal.

	$\Delta\tau/\Delta\tau_C$					
	1	5	10	20	40	120
Its. exteriores	1550	910	460	230	115	40
Its. interiores	10843	20930	19320	17940	16380	36000
cpu/cpu(1)	1	0.99	0.72	0.54	0.45	0.83

pared); este paso de tiempo característico corresponde con el valor estimado para asegurar la dominancia de la diagonal principal (ver Apartado 5.2). En todos los casos se alcanza la convergencia y, tras algunas iteraciones iniciales, se observa una tendencia exponencial en la reducción de la norma del residuo hacia la precisión de la máquina. Conforme la relajación disminuye (es decir, aumenta $\Delta\tau$), se necesita un número menor de iteraciones exteriores para alcanzar una misma reducción de la norma del residuo. Sin embargo, el control dinámico del *solver* lineal (GMRES) demanda un mayor número de iteraciones interiores (Figura 6.9, derecha): para los falsos pasos de tiempo indicados arriba, el número de iteraciones interiores tiende a 7, 23, 42, 78 y 156 (respectivamente) por cada iteración exterior. La Tabla 6.3 muestra el número total de iteraciones interiores y exteriores necesarias para reducir en un orden de magnitud la norma del residuo (una vez que la convergencia ha alcanzado el comportamiento asintótico). Se presenta también el tiempo de CPU, referido al caso $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 1$. Si la relajación decrece, el número

Tabla 6.4: Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$. Batería de casos ejecutados con diferente número de celdas y relaciones de aspecto de la malla de discretización. Se indica con un doble asterisco el caso usado como referencia en la Figura 6.10.

id	celdas	tiempo CPU(s)	$\Delta x/\Delta y$ (máx.)	$\Delta\tau/\Delta\tau_C$	its-ext	its-int
0	3721 (61×61)	$2.8e2$	$2.3e3$	10	9290	5
**1	14621 (121×121)	$6.7e2$	1	10	3623	13
2	14621 (121×121)	$5.6e2$	$9.0e3$	10	3142	11
3	16384 (128×128)	$8.4e2$	6.9	10	3807	11
4	58081 (241×241)	$6.8e3$	1	10	5928	28
5	58081 (241×241)	$3.5e3$	1	40	1729	57
6	58081 (241×241)	$5.2e3$	$3.6e4$	10	4536	26
7	231361 (481×481)	$5.2e4$	1	10	11129	28
8	231361 (481×481)	$4.5e4$	1	160	964	960
9	231361 (481×481)	$3.3e4$	1	160	2543	100

de iteraciones exteriores también decrece, pero la convergencia del proceso iterativo puede resultar comprometida. Así, con un falso paso temporal de $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 120$, el *solver* lineal emplea 900 iteraciones interiores por iteración exterior, necesitando un mayor tiempo de CPU que el caso con $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 10$.

Escalabilidad

Otro aspecto que interesa conocer y está relacionado con la eficiencia del algoritmo es su escalabilidad, es decir, la relación entre el aumento de número de celdas de la malla de discretización y el aumento de tiempo de CPU consumido para resolver el problema. La Tabla 6.4 presenta los diferentes casos ejecutados en este trabajo para dicho análisis. La malla más fina empleada tiene $\approx 8^2 = 64$ veces más celdas que la más grosera. Se han utilizado mallas uniformes (en la tabla, $\Delta x/\Delta y|_{max} = 1$) y refinadas cercas de las paredes, aplicando relaciones de aspecto tanto suaves (tal como 6.9) como muy fuertes (hasta $3.6e4$). En la Tabla 6.3 se presenta el tiempo de CPU requerido por el algoritmo en una máquina AMD Athlon (arquitectura de 64 bits) a 2200MHz para resolver el problema. En todos los casos, partiendo de un campo inicial nulo, se ha alcanzado el exigente criterio de convergencia para la norma del residuo $R = 1.0e-10$. En la tabla se indica también el falso paso temporal utilizado en la relajación, el número de iteraciones exteriores y el número medio de iteraciones interiores. Es interesante destacar que el

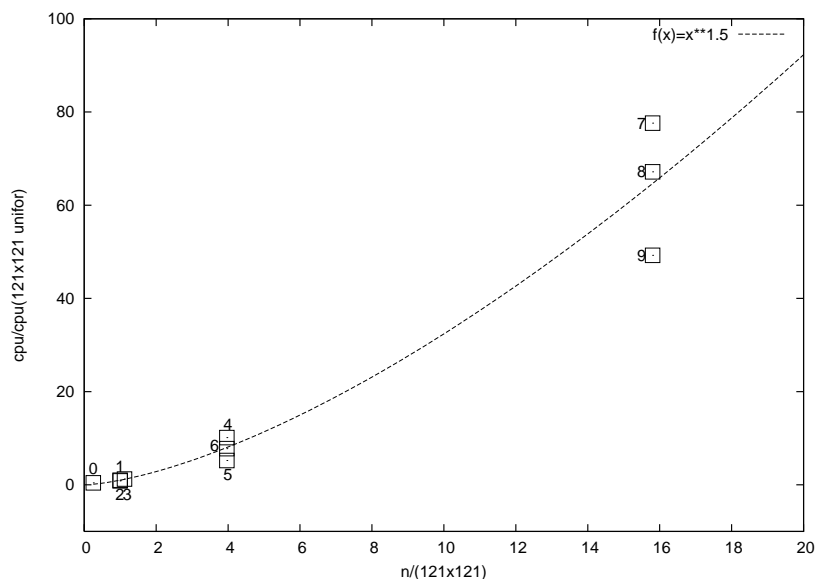


Figura 6.10: Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$. Tiempo de CPU en función del número de celdas de la malla; el caso de referencia está etiquetado con el número 1 (ver Tabla 6.4 para una descripción de los casos). La línea representa el ajuste de una función potencial incluyendo todos los puntos mostrados ($f = n^{1.5}$).

código es más eficiente cuando se utilizan mallas refinadas (a igual número de nodos) debido probablemente a que una mayor densidad de celdas cerca de las paredes implica una mayor resolución de los torbellinos secundarios y, en consecuencia, el amortiguamiento de las oscilaciones entre soluciones consecutivas en el proceso iterativo. En la Figura 6.10 se presenta el tiempo de CPU en función del número de celdas para todos los casos ejecutados, tomando como valores de referencia para la normalización los del caso etiquetado con el número 1 en la Tabla 6.4 (malla uniforme con 121×121 nodos). Se observa que el incremento en el coste computacional con el aumento de grados de libertad no es excesivo: el ajuste de una función potencial (f) considerando todos los puntos resulta en un exponente de 1.5 ($f = n^{1.5}$). En un algoritmo ideal (que no utilice la técnica multimalla para amortiguar los errores de baja frecuencia), el tiempo de CPU aumentaría linealmente con el número de grados de libertad del sistema.

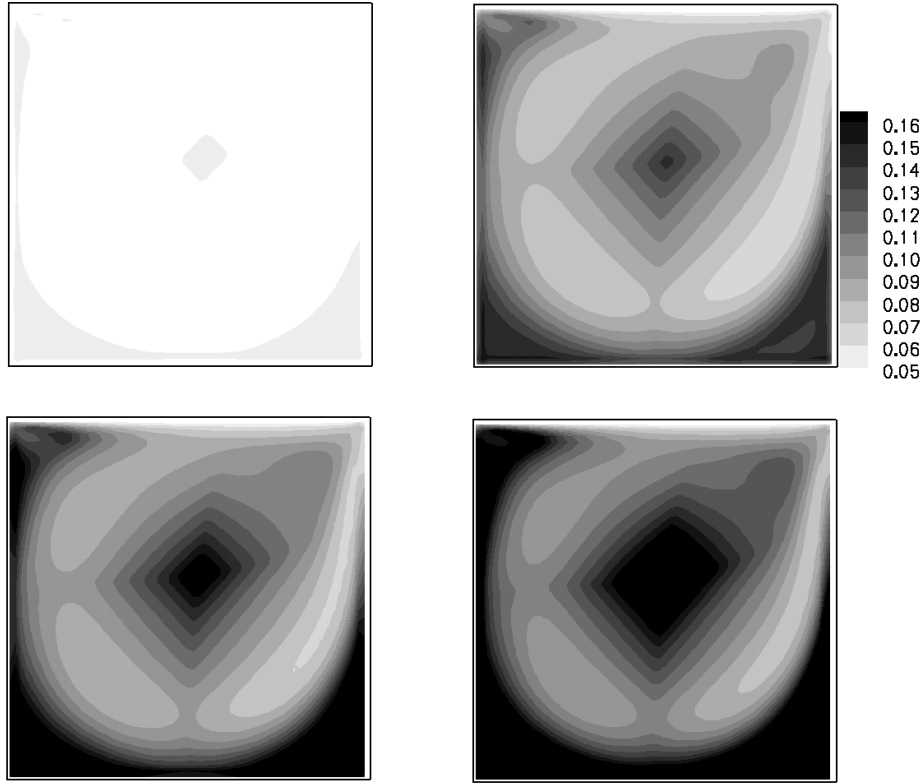


Figura 6.11: Cavity con pared móvil, $Re = 1000$, malla uniforme 41×41 . Coeficiente de preconditionamiento a^{pp} (Ecuación (4.9)) en la solución convergida para cuatro tamaños diferentes del falso paso temporal: $\Delta\tau/\Delta\tau_c = 1, 5, 10, 100$ (de izquierda a derecha y de arriba a abajo).

Coeficientes de preconditionamiento

La distribución del coeficiente de preconditionamiento para la ecuación de continuidad en el campo solución se analiza en la Figura 6.11, donde se muestran contornos del término insertado en la diagonal principal a^{pp} (Ecuación (4.9), ver Apartado 4.3). Para simplificar el análisis de estos coeficientes, se ha utilizado una malla uniforme (41×41), evitando así el efecto de variaciones en las áreas o volúmenes de las celdas. Estos coeficientes a^{pp} están formados por la suma de dos términos: uno proviene del término de relajación inicial ($a^{pp,\tau}$, definido en la Ecuación (4.8)) y otro de la implementación parcialmente implícita de la interpolación del momento ($a^{pp,CMI}$, Ecuación (4.10)). El primer término $a^{pp,\tau}$ tiene un valor constante (en mallas uniformes) inversamente proporcional al tamaño del falso paso

temporal. En la Figura 6.11 se observa que el valor del coeficiente global, debido a la contribución de $a^{pp,CMI}$, es mayor en zonas de estancamiento, tales como el núcleo del vórtice primario y las recirculaciones secundarias en las esquinas inferiores. Asimismo, se muestra el efecto de la relajación sobre este coeficiente de preconditionamiento presentando los mismos contornos para diferentes falsos pasos temporales: $\Delta\tau/\Delta\tau_c = 1, 5, 10, 100$. Al disminuir la relajación, decrece también el coeficiente de preconditionamiento total a^{pp} . No obstante, mientras los falsos pasos temporales aplicados varían en dos órdenes de magnitud, el cambio en el coeficiente a^{pp} se ve amortiguado, siendo 4 el factor de reducción más grande. De esta manera, la robustez del algoritmo no resulta perjudicada por una excesiva influencia del factor de relajación en el preconditionamiento del sistema de ecuaciones.

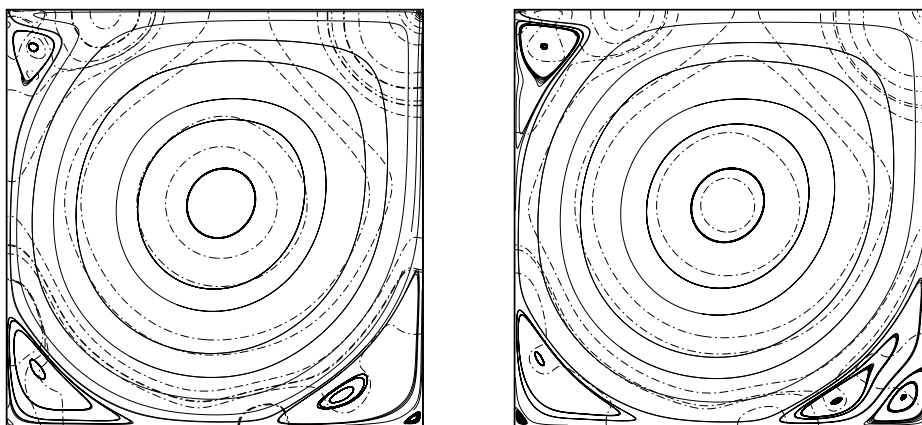


Figura 6.12: Cavity con pared móvil, $Re = 5000$ (izquierda) y $Re = 10000$ (derecha). Líneas de corriente y contornos de presión (líneas discontinuas). Malla no uniforme 128×128 .

6.3. Flujo en una cavity cuadrada con una pared móvil a altos números de Reynolds

En este apartado se analiza el comportamiento del algoritmo acoplado cuando se resuelven flujos fuertemente dominados por la convección, mediante la presentación de los resultados obtenidos para el problema del flujo en una cavity con una pared móvil a altos números de Reynolds ($Re = 5000$ y $Re = 10000$). En estos casos, el algoritmo tiene que ser capaz de resolver un patrón de flujo más complicado (respecto a los casos con números de Reynolds más pequeños mostrado anteriormente) como consecuencia de la fuerte convección.

Hay cierta controversia en la bibliografía sobre métodos numéricos respecto al comportamiento periódico o estacionario del flujo a $Re = 10000$. Así, por ejemplo, Bruneau *et al.* refieren que existe un número de Reynolds crítico, entorno a $Re = 8000$, a partir del cual el flujo presenta un comportamiento periódico [13]; Erturk *et al.* en cambio encuentran que mediante un refinamiento suficiente de la malla se obtienen soluciones estacionarias que eran transitorias con una malla más gruesa [28]. En este trabajo se ha obtenido una solución estacionaria para este problema con dos mallas diferentes (128×128 y 255×255) refinadas con una función seno cerca de las paredes. Las condiciones de contorno impuestas son las mismas esquematizadas en la Figura 6.1 y se usa el esquema convectivo CDS para las variables transportadas.

La Figura 6.12 muestra las líneas de corriente y los contornos de presión obtenidos para $Re = 5000$ (izquierda) y $Re = 10000$ (derecha). Se observan

6. Resultados. Comportamiento del algoritmo acoplado

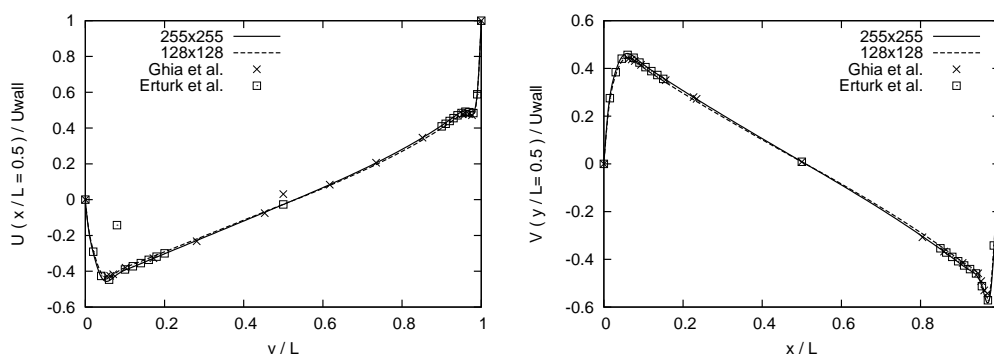


Figura 6.13: Cavity con pared móvil, $Re = 10000$. Comparación de los resultados de este trabajo con dos mallas diferentes (líneas) con las soluciones de referencia de Ghia *et al.* [39] y Erturk *et al.* [28].

torbellinos bien formados y contornos de presión suaves con regiones de baja presión en los puntos de estancamiento. El patrón de flujo alcanzado coincide con el presentado por Erturk *et al.* [28]. Respecto al caso de $Re = 1000$ (ver Figura 6.2), el flujo a $Re = 5000$ se caracteriza por que ha aparecido un nuevo vórtice en la esquina superior izquierda; cuando se aumenta el número de Reynolds hasta $Re = 10000$, se encuentra que el vórtice en la esquina inferior derecha se ha dividido en dos a contracorriente de tamaño comparable y otro torbellino empieza a emerger a contracorriente del de la esquina inferior izquierda. En la Figura 6.13 se comparan los resultados de este trabajo para $Re = 10000$ con las soluciones de referencia proporcionada por Ghia *et al.* [39] y por Erturk *et al.* [28] para ambas componentes de velocidad en las líneas centrales de la cavity. Se observa que el acuerdo con los resultados de Erturk *et al.* es excelente usando la malla de 255×255 ; la solución con la malla 128×128 es prácticamente la misma, lo que indica que se está próximo a la convergencia de malla (concepto que se tratará en el Capítulo 8).

La Figura 6.14 presenta la historia de la convergencia obtenida para el flujo a $Re = 10000$, con la malla 128×128 , y utilizando un falso paso temporal normalizado de $\Delta\tau/t_C = 10$. Se muestra la evolución de la norma del residuo y del vector corrección. Ambas se reducen hacia la precisión de la máquina, aunque la velocidad de reducción es más rápida en las primeras iteraciones, consiguiendo una reducción de tres órdenes de magnitud en la norma del residuo de todas las variables en aproximadamente 1500 iteraciones (detalle a la izquierda y abajo). A partir de ahí, la velocidad de convergencia se ve ralentizada, probablemente debido a la lenta propagación de los errores de baja frecuencia en la malla fina. El uso de métodos de multi-malla aceleraría la convergencia; aunque éstos no han sido todavía implementados en el

6. Resultados. Comportamiento del algoritmo acoplado

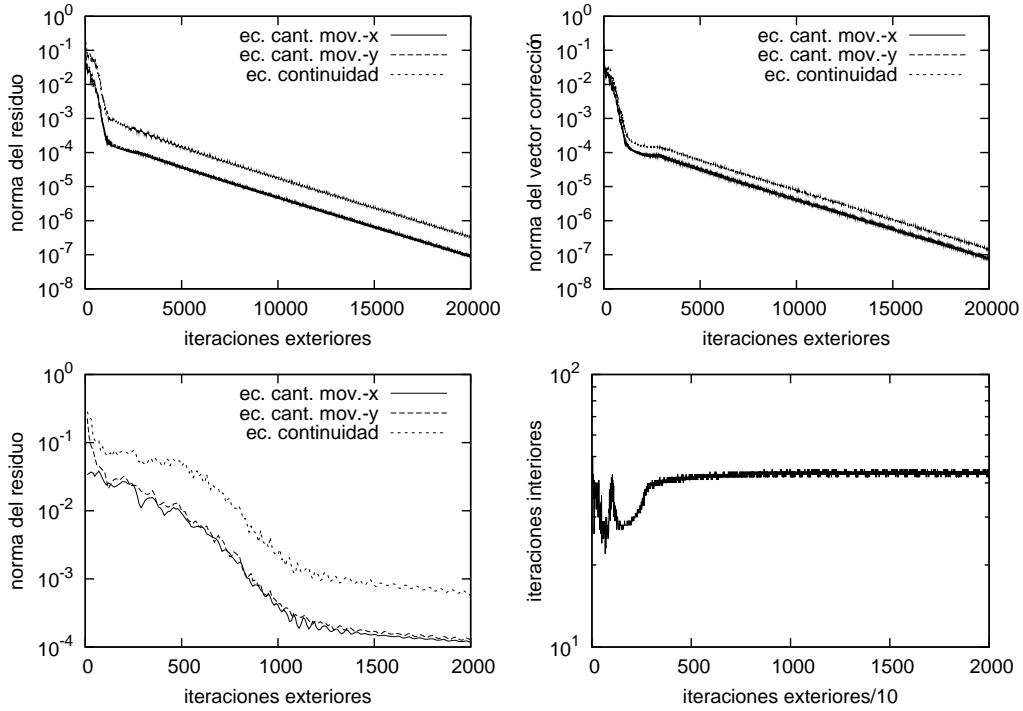


Figura 6.14: Cavity con pared móvil, $Re = 10000$, malla 121×121 . Historia de la convergencia con $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 10$.

código, son compatibles con el algoritmo propuesto. El número promedio de iteraciones interiores es 45 (Figura 6.14, derecha y abajo), que es un número relativamente grande como corresponde a un falso paso temporal también relativamente grande (ver Figura 6.9).

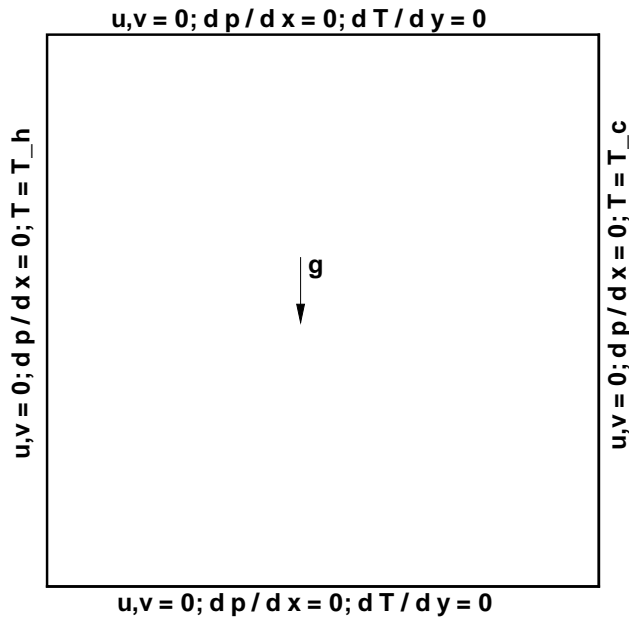


Figura 6.15: Convección natural en cavidad. Esquema de definición del problema.

6.4. Convección natural en una cavidad cuadrada con grandes variaciones de temperatura.

En este apartado se presentan resultados del flujo que se genera en una cavidad cuadrada cuando las paredes verticales se mantienen a una temperatura constante y diferente entre ellas. Este caso sirve para validar el algoritmo propuesto para resolver flujos con densidad variable (y bajo número de Mach) puesto que la diferencia de temperatura (relativa) en la pared no es lo suficientemente pequeña para que la aproximación de Boussinesq sea válida (aproximación que se emplea con frecuencia en los códigos de flujo incompresible para poder resolver la convección natural suponiendo densidad constante). Este tipo de flujos ocurre en la práctica en dispositivos de refrigeración. En la Figura 6.15 se muestra un diagrama del problema. Las paredes verticales son isotermas, siendo la temperatura de la pared izquierda (T_h) más alta que la de la derecha (T_c). Las paredes superior e inferior son adiabáticas y se supone gradiente nulo para la temperatura. En los cuatro lados de la cavidad, se imponen condiciones de contorno de no deslizamiento para la velocidad, y de gradiente nulo para la presión. El problema se caracteriza completamente por un número de Prandtl (Pr), un

número de Rayleigh (Ra), un parámetro de diferencia de temperaturas (ϵ), un estado de referencia (P_0, T_0) y una ecuación de estado. Estos parámetros se definen a continuación.

El número de Rayleigh es:

$$Ra = Pr \frac{g\rho_0^2(T_h - T_c)L_0^3}{T_0\mu_0^2} \quad (6.3)$$

donde g es la aceleración de la gravedad y L_0 es el lado de la cavidad. μ_0 y ρ_0 son la viscosidad dinámica y la densidad, respectivamente, correspondientes al estado de referencia. El parámetro de la diferencia de temperaturas se define como:

$$\epsilon = \frac{T_h - T_c}{2T_0} \quad (6.4)$$

con T_0 la temperatura de referencia, tomada como $(T_h + T_c/2)$.

Para el rango de temperaturas considerado, tanto la densidad como la viscosidad son propiedades variables. Se usa la ley de gases ideales para calcular la densidad ($\rho = p/RT$, con R la constante universal de los gases), y la ley de Sutherland para la viscosidad:

$$\frac{\mu(T)}{\mu^*} = \left(\frac{T}{T^*}\right)^{3/2} \frac{T^* + S}{T + S} \quad (6.5)$$

con $T^* = 273K$, $S = 110.5K$ and $\mu^* = 1.68e - 5kg/m/s$. El coeficiente de difusión térmica se calcula como:

$$\kappa(T) = \mu(T)/Pr \quad (6.6)$$

En el problema particular que se resuelve se considera flujo de aire, $Pr = 0.71$, y una variación de temperatura grande, $\epsilon = 0.6$. El estado de referencia es $T_0 = 600K$, $P_0 = 101325Pa$ y se han simulado dos números de Rayleigh: $Ra = 1.0e6$ y $Ra = 1.0e7$. En estas condiciones, el flujo es laminar y estacionario, aunque cerca de la transición al régimen turbulento¹. A partir de estos datos, se calcula el lado de la cavidad cuadrada, L_0 , mediante la Ecuación (6.3) y para calcular una velocidad de referencia se usa la expresión $U_0 = Ra^{0.5}\mu_0/\rho_0/L_0$. La Tabla 6.5 presenta las magnitudes de referencia para los dos casos simuladas.

Para resolver este problema con el algoritmo propuesto se considera la densidad variable en las ecuaciones de flujo presentadas en el capítulo 2,

¹De hecho, en este trabajo se ha obtenido una solución oscilatoria para $Ra = 1.0e8$; en el CD anexo a esta memoria se presentan vídeos de la evolución transitoria de los campos de temperatura y vorticidad en los casos a $Ra = 1.0e7$ y $Ra = 1.0e8$

Tabla 6.5: Convección natural en cavidad. Magnitudes de referencia en los casos simulados.

Ra	T_0 (K)	L_0 (m)	U_0 (m/s)
1.0e6	600	6.709e-2	7.489e-1
1.0e7	600	1.445e-1	1.099e00

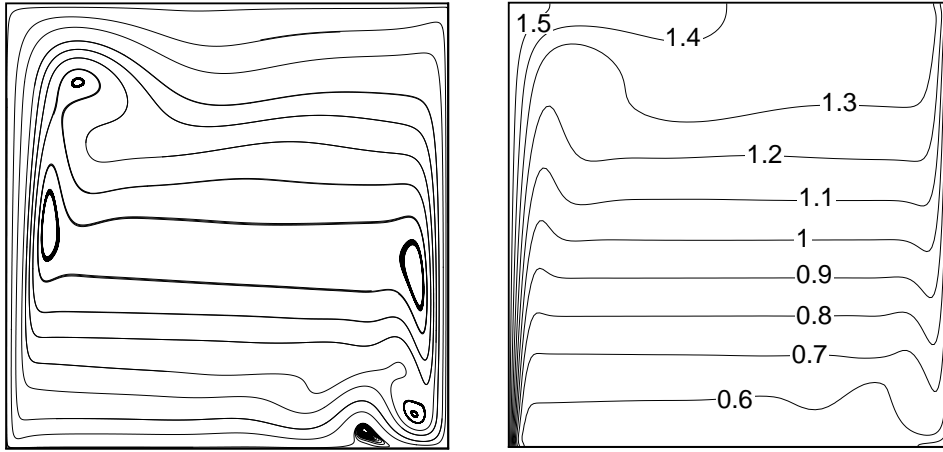


Figura 6.16: Convección natural en cavidad, $Ra = 1e7$ y $\epsilon = 0.6$. Líneas de corriente (izquierda) y contornos de temperatura (derecha).

y se introduce el efecto de la gravedad a través de un término fuente en la ecuación de cantidad de movimiento para la dirección y . Además, para evitar errores de redondeo numérico debidos a que las variaciones de presión son muy pequeñas (respecto al valor de referencia P_0), es habitual tomar como incógnita para la presión, en lugar del valor p correspondiente a la ecuación de estado, la diferencia $p' = p - p_h$, siendo p_h la presión del equilibrio hidrostático ($\nabla p_h + \rho_0 \mathbf{g} = 0$) (ver por ejemplo [69]). Como resultado, el término fuente discreto que se añade en la ecuación de cantidad de movimiento es:

$$S^v = -(\rho - \rho_0)gV \quad (6.7)$$

La Figura 6.16 muestra las líneas de corrientes y los contornos de temperatura para $Ra = 1e7$ obtenidos con una malla no uniforme de 201×201 nodos refinada cerca de las paredes. Las etiquetas de los contornos corresponden con la temperatura adimensional ($\Theta = T/T_0$; $1 - \epsilon \leq \Theta \leq 1 + \epsilon$). Se observa que el flujo no es antisimétrico respecto al centro de la cavidad, a diferencia de lo que ocurriría si se utilizase la aproximación de Boussinesq. Se distinguen tres regiones diferentes dentro de la cavidad: una región central ancha caracterizada por la estratificación térmica y con el flujo prácticamente en reposo;

dos capas límites desarrolladas en las paredes verticales con gradientes de temperatura y velocidad vertical altos; y otras dos capas límites, más anchas, en las paredes horizontales.

Para validar los resultados, se comparan varios parámetros característicos del flujo con la solución proporcionada por Vierendels *et al.* [110]. Estos autores obtuvieron valores de referencia para un amplio rango de números de Rayleigh y del parámetro ϵ de diferencia de temperaturas mediante la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes sin usar ni la hipótesis de Boussinesq ni la aproximación de bajo número de Mach.

En primer lugar en la Tabla 6.6 se comparan los valores calculados para el número de Nusselt medio en la pared:

$$Nu_{h|c} = \int_{h|c} \frac{kL}{k_0(T_h - T_c)} \frac{\partial T}{\partial x} ds \quad , \quad (6.8)$$

donde h y c hacen referencia a la pared caliente y fría, respectivamente. En la misma tabla se comparan también el valor máximo de las componentes de velocidad vertical y horizontal en las líneas centrales, y su posición. Se obtiene un buen acuerdo entre los resultados de este trabajo y los de referencia, siendo las diferencias inferiores en todo caso al 5 %.

Se muestran también en la Tabla 6.6 los valores obtenidos por Chenoweth y Paolucci [16] en un trabajo anterior. Estos autores llevaron a cabo una investigación de las soluciones del flujo para distintos números de Rayleigh, parámetros (ϵ) de diferencia de temperaturas y relación de aspecto de una cavidad rectangular, y dedujeron expresiones aproximadas (correlaciones) para calcular variables del flujo como una función de esos tres parámetros adimensionales. Dado que emplearon mallas relativamente gruesas (por ejemplo, 81×81 nodos para el flujo en una cavidad cuadrada a $Ra = 1.0e6$), sus datos son probablemente menos precisos que los presentados por Vierendeels *et al.* [110].

La evolución de la norma del vector de corrección para cada variable y el número de iteraciones interiores llevadas a cabo por el método iterativo para resolver el sistema lineal acoplado en el caso de $Ra = 1.e7$ se presentan en la Figura 6.17. La norma decrece hacia la precisión de la máquina para las cuatro variables. Se ha obtenido esta historia de la convergencia aplicando una relajación relativamente pequeño ($\Delta\tau/t_C = 1$), y de ahí que el numero medio de iteraciones interiores sea también pequeño (alrededor de 10).

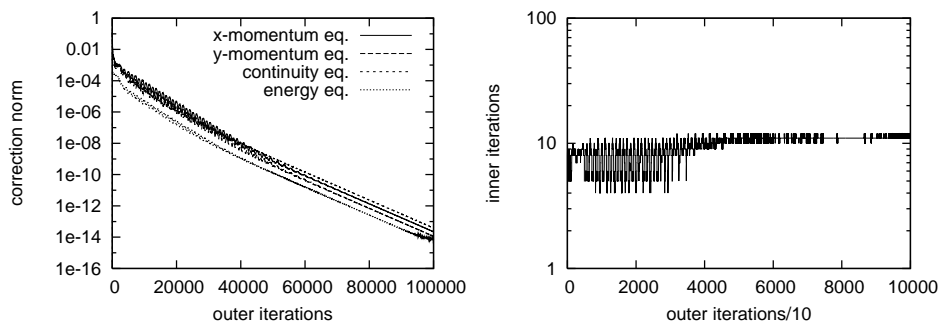


Figura 6.17: Convección natural en cavidad, $Ra = 1.0e7$ y $\epsilon = 0.6$. Historia de la convergencia usando un falso paso temporal de $\Delta\tau/\Delta\tau_0 = 1$. Evolución de la norma del vector de corrección para cada variable (izquierda) y número de iteraciones interiores del método iterativo (GMRES) de resolver el sistema acoplado (derecha).

Tabla 6.6: Convección en cavidad natural, $\epsilon = 0.6$. Comparación de los resultados de este trabajo con la solución de referencia de Vierendeels et al. [110] y, para el caso con $Ra = 1.0e6$, con los valores calculados de las correlaciones proporcionadas por Chenoweth and Paolucci [16]. Se indica el error en los valores de este trabajo respecto a los de Vierendels.

Variable	$Ra = 1.0e6$			$Ra = 1.0e7$	
	[16]	[110]	Este trabajo	[110]	Este trabajo
Nu_h	8.753	8.687	9.076 [4.4 %]	16.240	16.9484 [4.3 %]
Nu_c	8.753	8.687	9.076 [4.4 %]	16.241	16.9477 [4.3 %]
$v_{max}(y = 0.5)$	0.306	0.3203	0.3201 [0.0 %]	0.3229	0.3230 [0.0 %]
en la posición $x =$	0.0566	0.0537	0.0532 [1.0 %]	0.0305	0.0289 [5.2 %]
$v_{min}(y = 0.5)$	-0.279	-0.3001	-0.3002 [0.0 %]	-0.3011	-0.3011 [0.0 %]
en la posición $x =$	0.9790	0.9756	0.9758 [0.0 %]	0.9861	0.9870 [0.1 %]
$u_{max}(x = 0.5)$		0.1193	0.1148 [3.8 %]	0.07490	0.07348 [1.9 %]
en la posición $y =$		0.8541	0.8565 [0.3 %]	0.8260	0.8227 [0.4 %]
$u_{min}(x = 0.5)$		-0.07972	-0.07765 [2.5 %]	-0.05124	-0.04977 [2.9 %]
en la posición $y =$		0.0905	0.0872 [3.6 %]	0.0693	0.0690 [0.4 %]

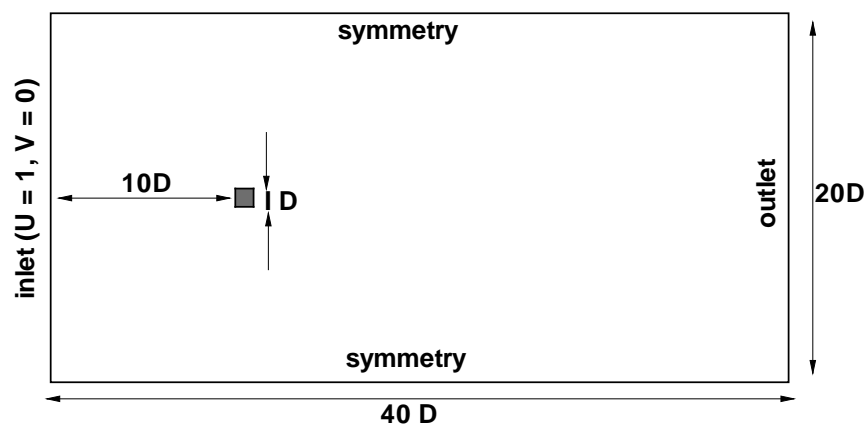


Figura 6.18: Cilindro cuadrado. Diagrama de definición del problema.

6.5. Flujo laminar tras un cilindro cuadrado

En este apartado se estudia el comportamiento del algoritmo acoplado en problemas no estacionarios, aplicándolo a la resolución del flujo laminar de desprendimiento de vórtices tras un cilindro cuadrado.

La Figura 6.18 muestra un diagrama esquemático del problema. Los límites del dominio se sitúan lejos del obstáculo para minimizar el efecto de los contornos sobre el flujo a su alrededor. Se fija una velocidad horizontal constante en la entrada y, en la salida, se extrapolan tanto la velocidad horizontal como transversal desde dos nodos interiores. Los contornos superior e inferior del dominio computacional se tratan como planos de simetría, y se impone una condición de no deslizamiento en las paredes del cilindro. Respecto a las condiciones para la presión, se aplica un gradiente nulo en todos los contornos, excepto en la salida, donde se extrapola desde dos nodos interiores.

El flujo se resuelve a un número de Reynolds moderado ($Re = 100$, basado en el lado del cilindro cuadrado y en la velocidad de entrada). Para este número de Reynolds, el flujo es bidimensional y laminar pero no estacionario, exhibiendo el fenómeno de desprendimiento periódico de torbellinos conocido como 'vórtices de von-Karman'. Otras características del flujo son un punto de estancamiento delante del obstáculo, un flujo altamente convectivo en torno al cilindro y una zona de recirculación detrás del cilindro.

Sohankar *et al.* ([104],[103]) simularon una serie de casos de este problema (a un número de Reynolds también moderado) con el objetivo de investigar la influencia en los resultados de varios parámetros numéricos, tales como el refinamiento de la malla cerca del cilindro, el tamaño del paso temporal,

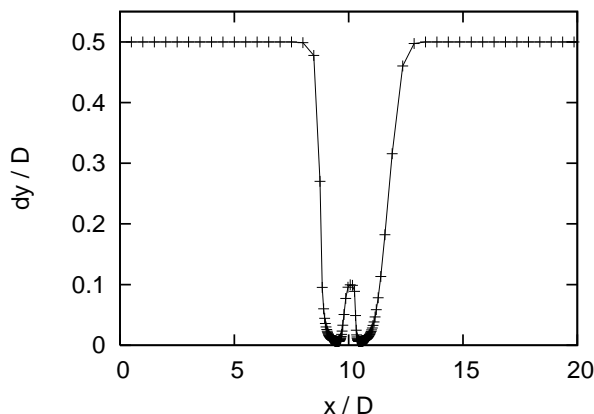


Figura 6.19: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Lado de la celda en dirección y como función de la posición de la cara sur de la celda.

la condición de contorno en la salida, la relación de bloqueo (D/H , con H la longitud transversal del dominio y D la longitud del lado del cilindro cuadrado), la extensión del dominio aguas abajo y arriba del cilindro o el esquema convectivo usado en la discretización. Siguiendo las recomendaciones de dichos autores, en la presente simulación se ha elegido un paso de tiempo físico $\Delta t/t_D = 0.03$ (siendo $t_D = D/U$ el tiempo característico, con D el lado del cilindro cuadrado y U la velocidad de entrada). La malla de discretización es no uniforme, refinada cerca del cilindro mediante una función tangente hiperbólica, puesto que un tamaño demasiado grande de las celdas adyacentes al obstáculo afecta negativamente a la precisión de los resultados. La forma de la función utilizada para determinar el lado de la celda en la dirección y aparece dibujada en la Figura 6.19 (una forma similar es empleada para la dirección x , desplazada para ajustarse a la posición del cuadrado en esta dirección). La malla de discretización resultante aparece en la Figura 6.20. El número total de celdas es 241×201 . Las celdas entorno a las esquinas del cilindro son cuadradas, siendo la anchura del lado $\delta/D = 6.3e^{-3}$ y cerca de las líneas centrales del cuadrado, en cambio, son rectangulares con una máxima relación de aspecto de $\delta x/\delta y|_{max} = \delta y/\delta x|_{max} = 10.75$. Aunque debido a que la malla es estructurada, la mayor relación de aspecto ocurre en las celdas lejos del obstáculo, pero localizadas en la misma línea que las esquinas del cuadrado y es $\Delta/\delta = 79.4$, siendo $\Delta = 0.5$ la longitud máxima del lado de las celdas. Puesto que se manifiestan gradientes de velocidad altos en celdas que tienen una relación de aspecto grande, se ha preferido usar el esquema convectivo de alta resolución SMART (en lugar del esquema CDS) para las variables transportadas.

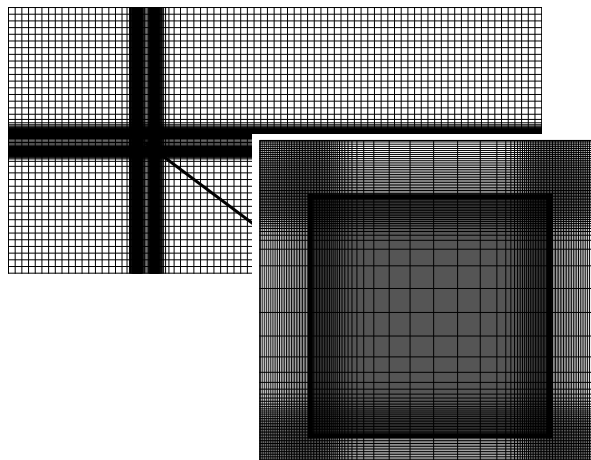


Figura 6.20: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Malla de discretización del dominio completo y detalle entorno al obstáculo.

Tabla 6.7: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Parámetros numéricos relevantes en los casos comparados en la Tabla 6.8

	δ/D	Δ/D	L_u/D	L_d/D	H/D	$\Delta t/(L/U)$
QUICK ([104])	0.004	0.5	10	26	0.05	0.025
Van-Leer ([103])	0.004	0.7	18.3	22.65	0.05	0.025
SMART (presente)	0.0036	0.5	10	39	0.05	0.025

Se muestra una instantánea de las líneas de corriente y de los contornos de presión y vorticidad ($\omega_z = \partial v/\partial x - \partial u/\partial y$) obtenidos en la Figura 6.21.

En la Figura 6.22 se presenta el comportamiento periódico del coeficiente de sustentación del cilindro. El valor medio en el tiempo es cero (como se espera para un flujo simétrico) y su frecuencia de oscilación indica un número de Strouhal de 0.136, en buen acuerdo con los resultados experimentales proporcionados por Okajima [80], quien da un valor entre 0.13 y 0.15 para un flujo a $Re = 100$. La Figura 6.23 muestra cómo los contornos del módulo de la velocidad obtenidos promediando en los ciclos presentados en la figura anterior (10) son simétricos respecto a la línea central en la dirección del flujo. Finalmente, el CD anexo a esta memoria incluye dos vídeos que ilustran la evolución periódica del módulo de la velocidad y de la vorticidad.

A fin de extender el estudio de la calidad de la solución, algunos otros parámetros adimensionales se comparan con los resultados obtenidos por Sohankar *et al.* en sus trabajos computacionales ([104],[103]). Entre los tests realizados por dichos autores, se han elegido dos de los casos con parámetros

Tabla 6.8: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Comparación de los resultados obtenidos en este trabajo usando el esquema convectivo SMART con resultados de Sohankar *et al.* usando el esquema QUICK [104] y el esquema de Van-Leer [103].

	QUICK [104]	Van-Leer [103]	SMART Presente
S_t	0.147	0.139	0.136
C_D	1.464	1.423	1.406
C_{D_p}	1.418	1.382	1.363
$-C_{P_b}$	0.663	0.644	0.654
C_{P_s}	1.052	1.028	1.018

numéricos similares a los utilizados en este trabajo. En la Tabla 6.7 se presentan, para los tres casos comparados, los siguientes parámetros numéricos: los valores de la anchura mínima de celda adyacente al obstáculo (δ/D), la anchura de celda lejos de la zona de interés (Δ/D), la longitud del dominio aguas arriba y abajo del obstáculo (L_u/D y L_d/D , respectivamente), el bloqueo del dominio H/D , el paso de tiempo temporal $\Delta t/(L/U)$. La Tabla 6.8 muestra los valores obtenidos para los siguientes magnitudes físicas adimensionales: el número de Strouhal (S_t), el coeficiente de arrastre (C_D), el coeficiente de arrastre debido exclusivamente a la presión (C_{D_p}), los coeficientes de presión en el punto de estancamiento (C_{p_s}) y en la base de succión (C_{p_b}). En todos los casos se observa un buen acuerdo entre los resultados obtenido en este trabajo y los valores proporcionados por Sohankar *et al.* .

A continuación, se compara el comportamiento del esquema convectivo de alto orden SMART, respecto a la interpolación lineal. Los contornos de velocidad longitudinal presentados en la Figura 6.24 permiten apreciar el buen comportamiento del esquema SMART en este problema. El esquema CDS , en cambio, produce contornos abruptos y el número de Strouhal obtenido es $S_t = 0.250$, un 80% (aproximadamente) más grande que los valores experimentales de Okajima [80].

Para terminar, se muestra un análisis de la eficiencia del método dual de paso de tiempo en combinación con el procedimiento de linealización de Picard. La solución se considera convergida en las iteraciones exteriores (es decir, en el falso paso temporal) cuando las normas tanto del residuo como del vector corregido son más pequeñas que $1.0e - 4$ (aunque se impone tanto un límite superior como inferior en el número de iteraciones exteriores para evitar, por ejemplo, un excesivo trabajo en el caso de condiciones iniciales pobres). La Figura 6.25 muestra la historia de la norma del vector corregido

así como la evolución del número de iteraciones exteriores. Una vez alcanzado el comportamiento periódico, solamente se requiere resolver un sistema lineal 11 veces (que coincide con el límite inferior impuesto) para alcanzar la convergencia en cada paso de tiempo físico. El algoritmo para flujos viscosos no estacionarios y cualquier número de Mach propuesto por Mary et al. [68] usa un método de Newton aproximado y hace una media de seis iteraciones por paso de tiempo para capturar el comportamiento periódico del desprendimiento de vórtices. Una rápida comparación por tanto indica que el procedimiento Picard es competitivo con los métodos de linealización de tipo Newton, los cuales exigen generalmente un mayor tiempo computacional para formar cada sistema lineal.

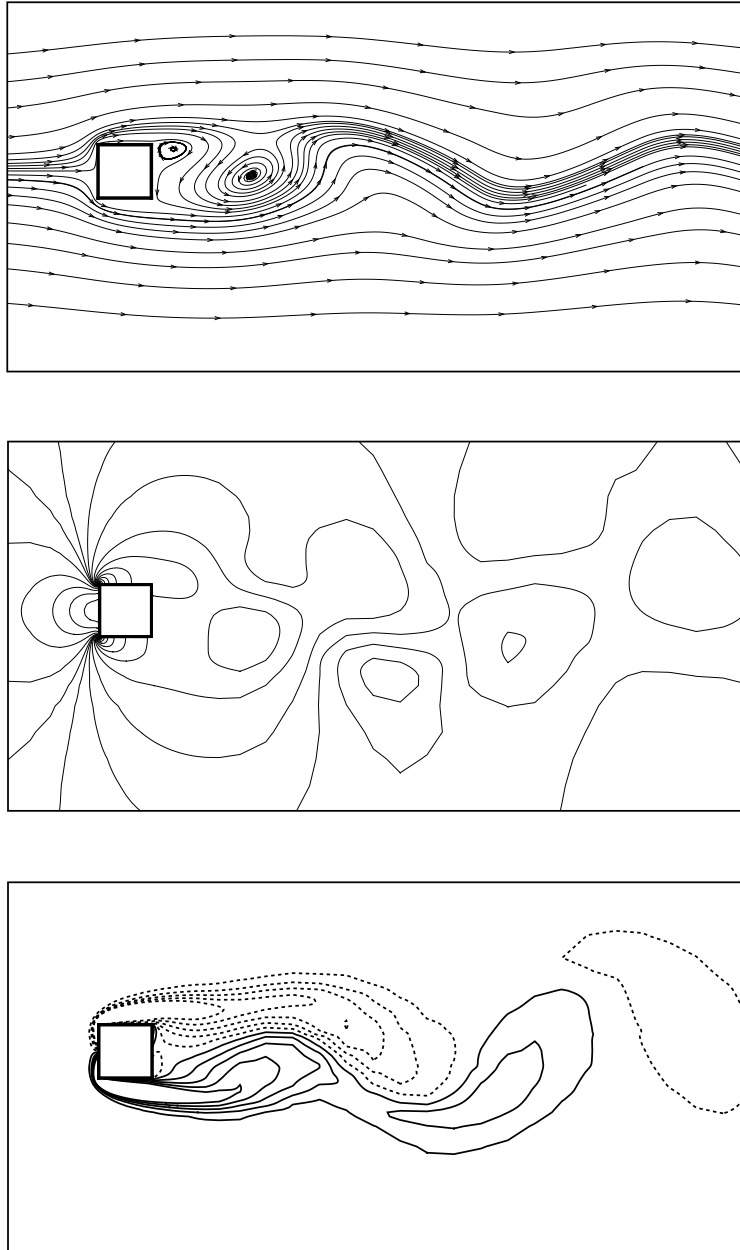


Figura 6.21: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Vista detallada de las líneas de corriente (arriba), de los contornos de presión (medio) y de contornos de vorticidad ω_z (líneas discontinuas para valores negativos, abajo) cerca del cilindro en un instante dado.

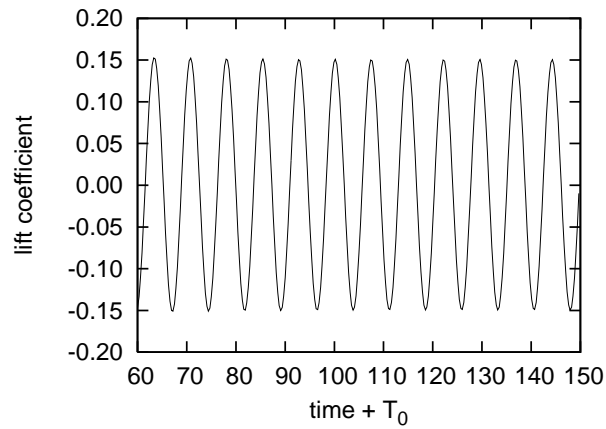


Figura 6.22: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Evolución del coeficiente de sustentación del cilindro con el tiempo.

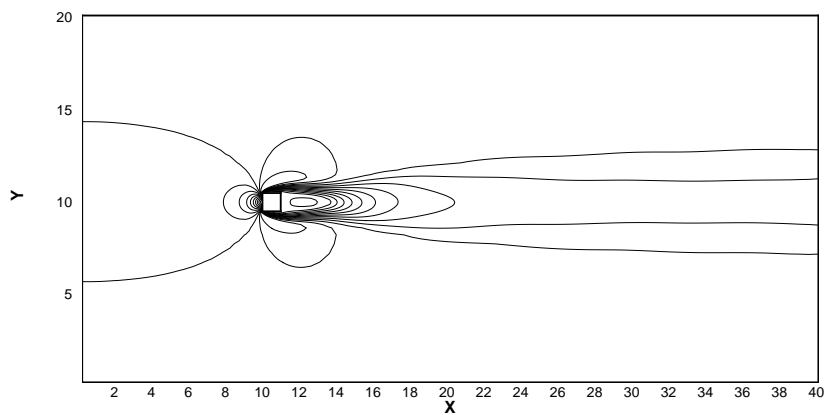


Figura 6.23: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Promedio del módulo de la velocidad.

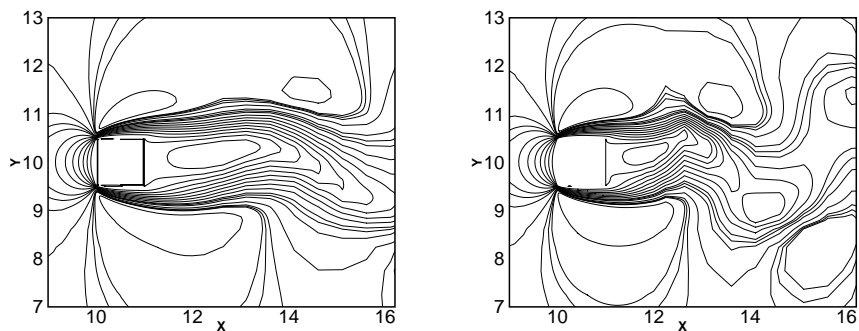


Figura 6.24: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Comparación de los contornos de la velocidad horizontal obtenidos con el esquema SMART (izquierda) y CDS (derecha). Vista detallada en torno al obstáculo.

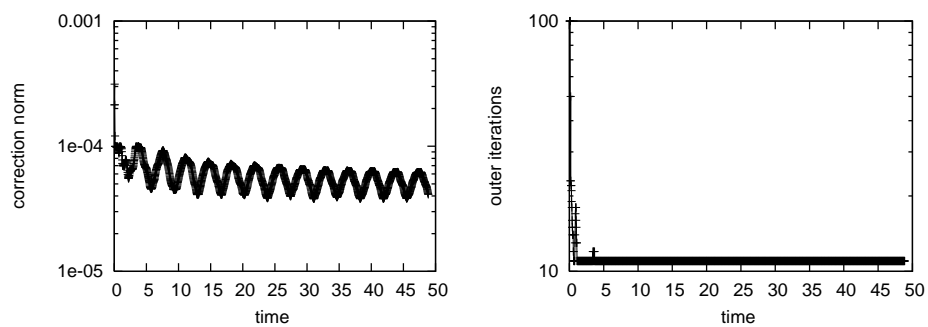


Figura 6.25: Cilindro cuadrado, $Re = 100$. Historia de la convergencia. Norma del vector de actualización (izquierda) y número de iteraciones exteriores (derecha) al final de cada paso temporal.

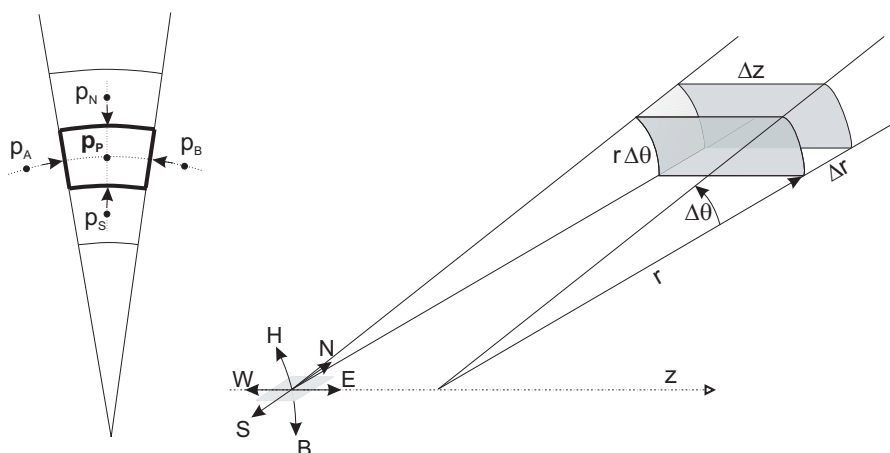


Figura 6.26: Volumen de control en coordenadas cilíndrico-polares (derecha) y fuerzas de presión sobre una celda en el plano $r - \theta$ (izquierda).

6.6. Expansión brusca en una tubería cilíndrica

Cuando se estudian flujos axisimétricos, la utilización de coordenadas cilíndrico-polares (en lugar de cartesianas) es conveniente puesto que permite resolver el problema teniendo en cuenta únicamente dos dimensiones (radial y axial). En este apartado se ilustra el comportamiento del algoritmo acoplado en este tipo de coordenadas mediante la resolución del flujo generado en una tubería cilíndrica tras una expansión brusca (Figura 6.27). Las motivaciones para estudiar este problema son dos principalmente. Por un lado, tiene interés práctico ya que esta geometría aparece en muchas aplicaciones de ingeniería. Por otro lado, la resolución de las ecuaciones de una manera acoplada tiene la ventaja, respecto a los métodos segregados, de permitir implementar implícitamente los términos adicionales que aparecen en las ecuaciones cuando se utilizan coordenadas cilíndrico-polares (como se mostrará más abajo). En el caso resuelto, laminar y sin introducción de *swirl*, la velocidad azimutal (v_θ) es nula y encontrar la solución numérica al problema consiste, por tanto, en especificar el valor de dos componentes de la velocidad v_r y v_z en cada celda (r_P, z_P) de una malla bidimensional.

Cuando se aplica el método de discretización de volúmenes finitos (descrito en el Capítulo 2 para coordenadas cartesianas) en coordenadas cilíndrico-polares surgen algunas particularidades. Aunque la expresión general de una ecuación de conservación en su forma integral para un volumen de control es

la misma (Ecuación (2.5)),

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \oint_A \rho \phi \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA - \oint_A \Gamma^\phi \nabla \phi \cdot \hat{\mathbf{n}} dA = \int_V S^\phi dV \quad , \quad (6.9)$$

la nueva forma de los volúmenes de control (ver Figura 6.26) debe ser tenida en cuenta a la hora de calcular las componentes del vector área ($d\mathbf{A} = \hat{\mathbf{n}}dA = (dA_r, dA_\theta, dA_z)$) y del gradiente de un escalar ($\nabla\phi = (\nabla\phi|_r, \nabla\phi|_\theta, \nabla\phi|_z)$). Éstas son:

$$\begin{aligned} dA_r &= rd\theta dz & ; & & \nabla\phi|_r &= \partial\phi/\partial r & & (6.10) \\ dA_\theta &= dr dz & ; & & \nabla\phi|_\theta &= (1/r)(\partial\phi/\partial\theta) \\ dA_z &= rd\theta dr & ; & & \nabla\phi|_z &= \partial\phi/\partial z & . \end{aligned}$$

El diferencial de volumen se calcula como $dV = rd_\theta dr dz$. En el problema que se resuelve aquí, sin variaciones en la dirección acimutal, la malla tiene una sola celda en la dirección θ , de tamaño fijo $\Delta\theta$. Los cambios descritos pueden ser implementados en un código inicialmente desarrollado para coordenadas cartesianas sin más que asociar las coordenadas cartesianas (x_c, y_c, z_c) con las cilíndrico-polares (z, r, θ , por ejemplo) y definir el lado de una celda en dirección acimutal como $r_P\Delta\theta$.

Además, es necesario introducir dos términos adicionales en la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento debido al cambio del sistema de coordenadas [8]. Uno de estos términos proviene del tensor de esfuerzos y su expresión, cuando se añade al lado derecho de la ecuación, es:

$$b_r^{\tau\theta\theta} = -2\mu V_P v_{rP} / r_P^2 \quad , \quad (6.11)$$

siendo V_P y r_P el volumen y la posición radial (respectivamente) de la celda. El otro término adicional se introduce para tener en cuenta que a la componente radial de las fuerzas de presión no sólo contribuye la presión sobre las caras norte y sur de la celda (dirección radial), sino también sobre las caras alta y baja (dirección acimutal) (ver Figura 6.26, izquierda). Este nuevo término b_r^p se escribe

$$b_r^p = p_P A_{\theta P} \Delta\theta \quad , \quad (6.12)$$

donde $A_{\theta P} = \Delta r_P \Delta z$ es el área de la cara alta (o baja) de la celda P .

A la hora de resolver el sistema, es interesante destacar que los dos nuevos términos añadidos a la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en dirección radial contienen variables incógnitas (v_r y p localizadas en la propia celda P). El algoritmo acoplado desarrollado en este trabajo permite incluir ambos implícitamente en la matriz de coeficientes.

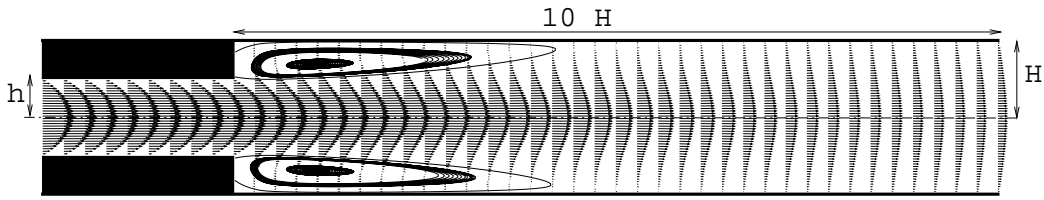


Figura 6.27: Expansión brusca en una tubería, $Re = 100$. Vectores de velocidad y líneas de corriente en la zona de recirculación.

La configuración del problema resuelto aparece en la Figura 6.27. La relación de radios entre las dos tuberías es $H/h = 2$. Respecto a las condiciones de contorno para la velocidad, se impone el perfil de velocidad correspondiente al flujo completamente desarrollado en la entrada, en la salida se aplica gradiente nulo y en las paredes la condición de no deslizamiento. Se resuelve únicamente la mitad norte del dominio del problema axisimétrico, siendo la frontera sur del dominio un eje de simetría. Para la presión, se supone gradiente nulo en todos los contornos del dominio salvo en la salida, donde se fija su valor a cero.

La Figura 6.27 muestra también los vectores de velocidad y las líneas de corriente en la zona de recirculación obtenidos para un flujo con número de Reynolds $Re = 100$, basado en el radio de la tubería ancha H y la velocidad media de entrada U (la imagen simétrica del dominio resuelto es incluida también en la figura). La característica más destacada de este flujo, la longitud de la zona de recirculación (L_r) tras la expansión, es comparada con el trabajo experimental de Macagno y Hung [64] y los resultados computacionales de Fletcher *et al.* [30] y de Nag y Datta [75] en la Tabla 6.9. Se han utilizado dos mallas uniformes diferentes, con un número de celdas de 46×31 y 92×62 . L_r/H se calcula como la distancia que separa la expansión del lugar en el que la velocidad horizontal cambia de signo, siguiendo la línea horizontal de nodos adyacentes a la pared norte. Para localizar dicha posición en la que la velocidad se hace nula, se ha usado una interpolación lineal entre el nodo con velocidad negativa y su vecino este, con velocidad positiva. En la tabla se observa que, como era de esperar, la solución en la malla fina es más precisa que en la gruesa; y el acuerdo de aquella con los resultados tanto experimentales como computacionales obtenidos por los autores referidos arriba es muy bueno.

En cuanto a la eficiencia del algoritmo, en la Figura 6.28 se presenta la velocidad de convergencia para las dos mallas empleadas. En la malla gruesa se ha aplicado un falso paso temporal, proporcional al tiempo de residencia típico de la celda, $\Delta\tau = 5\Delta\tau_C = 5\Delta y_g/U$, con Δy_g la anchura de celda de la

Tabla 6.9: Comparación de la longitud de recirculación (L_r/H) obtenida en este trabajo con otros resultados experimentales ([64]) y computacionales ([30], [75]).

Macagno[64]	Fletcher[30]	Nag[75] 250 × 90	Este trabajo 46 × 31 92 × 62	
4.50	4.53	4.51	4.75	4.51

mallas (gruesa) en dirección vertical (es decir, radial). En cuanto a la malla fina, se han realizado dos simulaciones con diferente relajación: manteniendo en una la misma proporción de falso paso temporal respecto a su propio tiempo de residencia (es decir, $\Delta\tau = 5\Delta y_f/U$ con Δy_f la anchura de celda de la malla (fina)) y en la otra su valor absoluto (es decir, $10\Delta y_f/U = 5\Delta y_g/U$). Se observa que en los tres casos el residuo se reduce exponencialmente hacia la precisión de la máquina y que la velocidad de convergencia es prácticamente la misma en las dos mallas si se mantiene el valor del falso paso temporal (aproximadamente un orden de magnitud cada 440 iteraciones exteriores), aunque el número de iteraciones interiores es mayor para la malla grande (el número aparece en la leyenda de la misma figura, entre paréntesis).

Se han realizado también simulaciones en la malla fina calculando explícitamente los términos adicionales de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en la dirección radial (Ecuaciones (6.11) y (6.12)) e incluyéndolos en el lado derecho de la ecuación. Se ha encontrado que este tratamiento es menos robusto que el implícito puesto que es necesario introducir más relajación (el caso no converge para los falsos pasos temporales relativos de $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 5, 10$). La historia de la convergencia para los dos tratamientos es comparada en la Figura 6.29 con una misma relajación de $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 1$. La velocidad de convergencia es prácticamente la misma, probablemente debido a que la aplicación de una relajación grande hace que el número medio de iteraciones interiores sea pequeño (5 para el implícito y 7 para el explícito) y el acoplamiento entre las ecuaciones sea tenido en cuenta de una manera débil por el *solver* lineal. Aún así, la eficiencia del tratamiento implícito es algo mayor ya que, a igual número de iteraciones exteriores, el número de iteraciones interiores es algo menor.

Los resultados mostrados indican que el algoritmo acoplado propuesto en este trabajo es capaz de resolver de una manera precisa y robusta problemas descritos en coordenadas cilíndrico-polares.

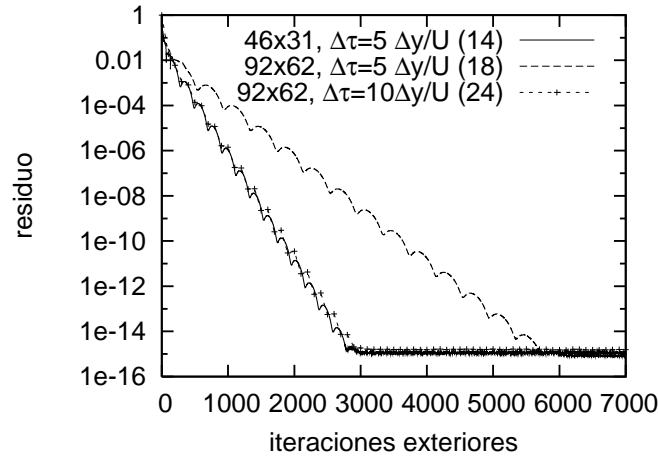


Figura 6.28: Expansión brusca en una tubería, $Re = 100$. Historia del residuo de la ecuación de continuidad para dos mallas diferentes y distinta relajación. En la leyenda, entre paréntesis, se indica el número medio de iteraciones interiores.

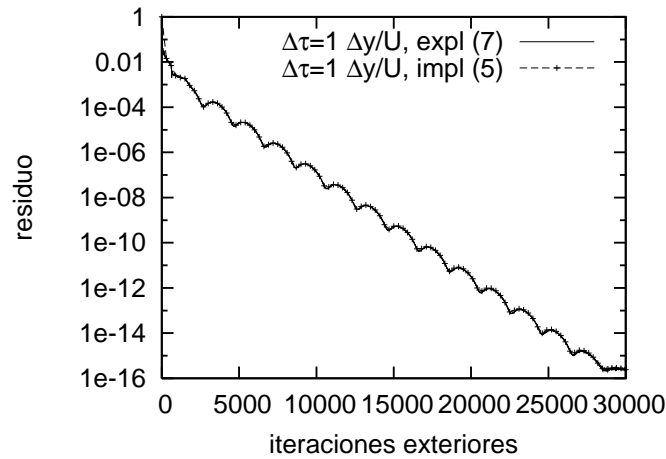


Figura 6.29: Expansión brusca en una tubería, $Re = 100$, malla 92×62 . Comparación de la historia del residuo de la ecuación de continuidad con un tratamiento implícito y explícito de los términos adicionales de la ecuación para v_r . Se indica entre paréntesis el número medio de iteraciones interiores.

Resolución segregada de las ecuaciones

En el algoritmo acoplado desarrollado en este trabajo se dispone de una ecuación para la presión (deducida a partir de la ecuación de continuidad, incluyendo los términos de corrección según la CMI: Ecuación (4.7)). Con el propósito de estudiar el comportamiento del método cuando se resuelve esta ecuación de Poisson y las ecuaciones de cantidad de movimiento de manera segregada, se ha realizado la implementación explícita de los términos que las acoplan: es decir, se parte de las mismas ecuaciones discretizadas que se describen en los capítulos anteriores, pero los términos correspondientes a los gradientes de presión en las ecuaciones de cantidad de movimiento y a la interpolación lineal de las velocidades convectivas en la ecuación de continuidad se calculan usando los valores obtenidos para las incógnitas en la iteración (exterior) anterior, y se diferencian al lado derecho del sistema. De esta manera, los coeficientes a^{up} , a^{vp} , a^{wp} , a^{pu} , a^{pv} , a^{pw} de la matriz del sistema (Ecuación (4.13)) son nulos, se consigue desacoplar las ecuaciones de Navier-Stokes y el sistema se puede resolver mediante un ciclo similar al llevado a cabo por los métodos segregados tipo SIMPLE, si bien en este trabajo se hace uso de una ecuación para la presión en lugar de una ecuación para la corrección de la presión (ver, por ejemplo, [85]). Dicho ciclo consta de los siguientes pasos:

1. Se supone un campo inicial de velocidad y de presión.
2. Se calculan los coeficientes de la matriz y el vector del lado derecho de las ecuaciones de cantidad de movimiento.
3. Se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento, y se actualizan los valores de las componentes del vector velocidad.
4. Se calculan los coeficientes de la matriz y del vector del lado derecho de la ecuación de Poisson, utilizando los nuevos valores del campo de velocidad.
5. Se resuelve la ecuación de Poisson, y se actualiza el campo de presión.
6. Si no se ha alcanzado el valor tolerado para los residuos, se vuelve al punto 2.

La diferente historia de la convergencia cuando se resuelven las ecuaciones de manera segregada o acoplada se muestra en la Figura 6.30 para el flujo tratado en este apartado: cavidad bidimensional con una pared móvil a $Re=1000$, y utilizando una malla no uniforme de 128×128 nodos. Se ha

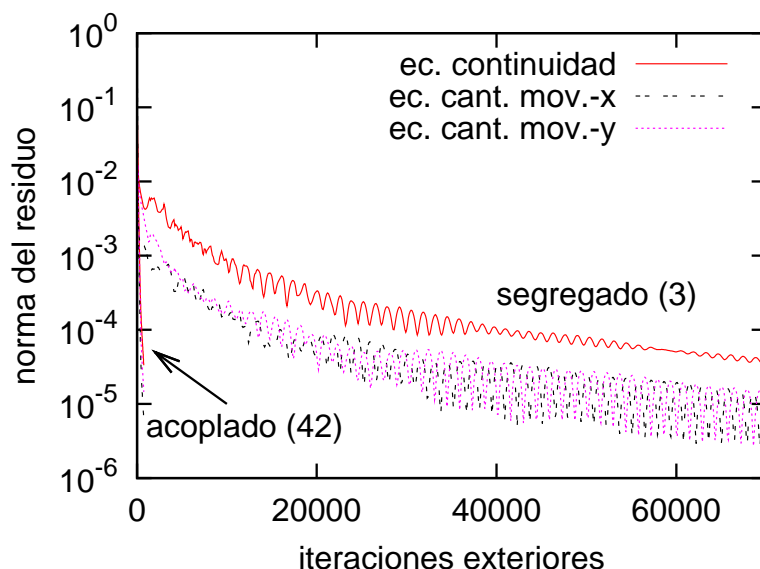


Figura 6.30: Cavidad con pared móvil, $Re=1000$, malla 128×128 . Historia de la convergencia. Comparación de la resolución segregada ($\Delta\tau/\Delta\tau_C = 0.1$) y acoplada ($\Delta\tau/\Delta\tau_C = 10$) de las ecuaciones de Navier-Stokes (se indica entre paréntesis el número medio de iteraciones interiores).

aplicado relajación inercial en ambos casos y se ha encontrado que, para alcanzar la convergencia, el primer método (segregado) necesita utilizar un falso paso temporal mucho menor ($\Delta\tau/\Delta\tau_C = 0.1$) que el segundo (donde la eficiencia está próxima a la óptima para $\Delta\tau/\Delta\tau_C = 40$; ver Tabla 6.3). Es interesante destacar que el principal propósito de la relajación en el algoritmo segregado es amortiguar la variación de las incógnitas en el proceso de resolución secuencial (la dominancia de la diagonal se consigue mediante la implementación diferida de los términos convectivos de alto orden). En el algoritmo acoplado, en cambio, los términos de relajación deben compensar los términos implícitos ‘extra’ provenientes del acoplamiento entre velocidad y presión, que debilitan la dominancia de la diagonal (ver Capítulo 4). Por otro lado, el patrón de la matriz de coeficientes para cada ecuación segregada permite utilizar *solvers* lineales menos sofisticados y costosos que el GMRES(30), aplicado en el algoritmo acoplado; en concreto, para resolver este problema se ha utilizado el *solver* CGS (Gradiente Conjugado al Cuadrado).

En la Figura 6.30 se observa que la evolución de los residuos en el algoritmo segregado es marcadamente oscilatoria; además, como corresponde a una fuerte relajación, el número de iteraciones exteriores necesario para alcanzar la convergencia es elevado y el de iteraciones interiores pequeño (≈ 3 por

cada una de las exteriores, del control dinámico descrito en el Apartado 5.2). Respecto a la eficiencia de ambos métodos, el tiempo de CPU consumido por el algoritmo segregado para reducir el residuo normalizado hasta el valor tolerado ($\|Re_\phi\| < 1.0e - 5$) es unas 40 veces mayor que el del algoritmo acoplado, aún cuando el tiempo medio por iteración exterior es un 40% (aproximadamente) menor.

Por último, se quiere señalar que en este apartado se ha pretendido presentar una comparación directa entre la forma acoplada y segregada de resolver las mismas ecuaciones discretas, sin dedicar grandes esfuerzos a la optimización del algoritmo segregado. En este caso, el elevado número de iteraciones podría ser reducido utilizando una ecuación para la corrección de la presión o implementando implícitamente todos los términos de presión en la ecuación de Poisson. De la misma forma que se describe en el Apartado 4.3 para el algoritmo acoplado, los términos correspondientes a la interpolación lineal de fuerzas de presión (término en el lado derecho de la Ecuación (4.7)), que involucran valores de dicha variable en celdas fuera de la molécula computacional, se calculan explícitamente y se diferencian a lado derecho de la ecuación.

Capítulo 7

Simulación de las Grandes Escalas (LES) de un flujo turbulento.

En este capítulo se muestran resultados de aplicar el algoritmo propuesto en este trabajo a la resolución de la estela turbulenta tras un cilindro cuadrado (prisma) mediante el modelo de Simulación de las Grandes Escalas (LES). Previamente, se discute la motivación para utilizar este modelo y una breve exposición de sus fundamentos teóricos.

7.1. Motivación

Tanto la modelización como la simulación de flujos turbulentos constituyen temas de investigación abiertos con gran interés práctico ya que habitualmente ocurren fenómenos turbulentos en sistemas ingenieriles y en procesos naturales. A pesar de que las ecuaciones de Navier-Stokes son válidas tanto para flujos laminares como turbulentos, el mecanismo conocido como ‘cascada de energía’ dificulta el tratamiento de la turbulencia. La ecuación de transporte para la vorticidad incluye, en tres dimensiones, un término responsable del fenómeno conocido como ‘estiramiento de vórtices’ (*vortex stretching*). Este término es el responsable de la deformación de torbellinos (estructuras coherentes), que se ‘estiran’ a lo largo de su eje aumentando su velocidad angular; si la difusión molecular no compensa este término (como ocurre en la turbulencia) se ‘fragmentan’ en estructuras cada vez más pequeñas. De esta manera, se genera un mecanismo de transferencia de energía desde las escalas más grandes (del tamaño de la longitud característica del problema) hacia las más pequeñas (para las que la disipación viscosa

es efectiva)¹. Tennekes y Lumley [106] ofrece un primer acercamiento a la comprensión de los fenómenos físicos que caracterizan la turbulencia; se puede encontrar una orientación más matemática y detallada en Pope [88].

En la actualidad se emplean mayoritariamente tres enfoques, ninguno de ellos completamente satisfactorio, para simular flujos turbulentos ([29], [88], [87]). La aproximación más precisa es la Simulación Numérica Directa (DNS) que discretiza directamente las ecuaciones de Navier-Stokes (es decir, sin ninguna aproximación adicional) usando un tamaño de paso (espacial y temporal) lo suficientemente pequeño como para capturar todas las escalas presentes en un flujo turbulento. Esta opción permite resolver problemas básicos y obtener una gran cantidad de información sobre los fenómenos físicos que caracterizan la turbulencia (algunos de ellos difíciles de medir experimentalmente), y es por tanto una herramienta poderosa para comprender dichos fenómenos y desarrollar modelos teóricos. Sin embargo, su alto coste computacional (la hipótesis de Kolgomorov para el tamaño de las escalas más pequeñas conduce a un coste del orden $O(Re^{11/4})$) hace completamente inviable su aplicación para resolver configuraciones realistas a números de Reynolds moderadamente altos.

La Simulación Numérica del Promediado de Reynolds (RANS) se basa en promediar en el tiempo las ecuaciones de Navier-Stokes y aplicar modelos para ‘cerrar’ las ecuaciones, es decir, para obtener los términos que no se pueden calcular directamente desde las variables promediadas (son los términos conocidos como ‘esfuerzos de Reynolds’). Aunque estos modelos presentan la desventaja de depender necesariamente del problema particular que se quiere resolver, ha sido prácticamente la única utilizada hasta la fecha en aplicaciones industriales ya que permite conocer la tendencia de magnitudes globales (como por ejemplo fuerzas sobre una superficie) útiles para la mejora de diseños de ingeniería (es decir, con un coste computacional asequible).

La Simulación de las Grandes Escalas (LES) se presenta como la técnica más prometedora para resolver numéricamente flujos turbulentos, puesto que tiene un mayor potencial predictivo (proporciona campos instantáneos) y su coste computacional es menor que el de la DNS. Este modelo se basa en la idea resolver únicamente las estructuras grandes (las que contribuyen principalmente a la transferencia de energía y cantidad de movimiento). Aunque el efecto de las escalas inferiores debe ser modelado, se considera que su carácter es universal (es decir, independiente del problema particular), en el supuesto de que pertenezcan al rango inercial de la cascada de energía. La LES ha sido

¹El fenómeno inverso (es decir, la transferencia de energía de las escalas más pequeñas a las grandes) puede ocurrir localmente en algunas situaciones; este fenómeno se conoce con el nombre en inglés de *backscattering*.

incorporada en la última década en códigos de CFD comerciales (*FluentTM*, uno de los códigos de CFD comerciales más utilizados, implementó el modelo Smagorinsky de LES [100] en 1999, en la versión 5.0), pero todavía se necesita progresar en ciertos aspectos de la técnica para que sea usada extensivamente en aplicaciones industriales. Por un lado, el coste computacional sigue siendo alto debido a que resolver el rango inercial requiere mallas finas y a que deben ser simulaciones transitorias con un paso temporal suficientemente pequeño para capturar las fluctuaciones del flujo turbulento, y prolongadas lo suficiente en el tiempo para poder obtener valores promedio útiles en ingeniería. Por otro lado, el filtrado de las ecuaciones es realizado habitualmente de manera implícita por la propia malla de discretización y el diseño de ésta suele resultar crítico para obtener soluciones de calidad. Para la aplicación de LES a problemas prácticos, otros temas abiertos son la adecuada descripción de la interacción reacción química-turbulencia en procesos de combustión, la implementación de un flujo turbulento en la entrada o la modelización cerca de las paredes (cuando no es viable refinar la malla lo suficiente para capturar la subcapa viscosa).

Este capítulo pretende mostrar la capacidad del algoritmo propuesto en este trabajo para resolver flujos turbulentos mediante el modelo de Simulación de las Grandes Escalas. El algoritmo propuesto es acoplado y el esquema de discretización es implícito, mientras que la gran mayoría de códigos desarrollados ex profeso para LES incorporan un método explícito (típicamente el paso fraccionado propuesto originariamente por Kim y Moim [53] para flujos incompresibles). El grupo del Profesor Pletcher llevó a cabo las primeras simulaciones de LES con preconditionamiento y paso dual (es decir, acoplado e implícito) para resolver un flujo compresible a bajo número de Mach ([111],[17]). Recientemente, algunos autores (Lessani *et al.* [57], Alkishriwi *et al.* [2] y Daude *et al.* [22]) han retomado el tema con el propósito de estudiar la reducción en el tiempo de CPU que se puede conseguir utilizando un esquema temporal implícito. Aun cuando resolver las escalas temporales más pequeñas de LES requiere un paso de tiempo pequeño, éste puede ser considerablemente mayor que el permitido por la condición de estabilidad numérica de un esquema explícito (algo especialmente cierto en flujos compresibles a bajo número de Mach). Estos autores obtienen una ganancia en eficiencia que varía en un amplio rango (desde factores de 2 hasta 40), y parece depender del problema y del método numérico utilizado para resolver cada nivel de tiempo (es decir, del aumento en el número de iteraciones al aumentar el paso temporal). Tanto Lessani *et al.* [57] como Alkishriwi *et al.* [2] concluyen que el preconditionamiento de la ecuación de continuidad es esencial para ganar en eficiencia y apuntan que la técnica multimalla (un método poderoso para acelerar la convergencia ampliamente

aplicado en métodos implícitos) debe ser utilizada con precaución en LES ².

7.2. Introducción a la teoría de LES

En este apartado se presentan brevemente los aspectos más destacados (en el marco de este trabajo de investigación) de los fundamentos teóricos en los que se basa la simulación de flujos turbulentos mediante LES, y se referencia documentos en los que se puede encontrar información más detallada.

La técnica de Simulación de las Grandes Escalas se basa en la idea de filtrar el campo del flujo para separar las escalas grandes de las pequeñas [55], mediante la descomposición de cada variable en dos componentes ($\phi = \bar{\phi} + \phi'$): la componente filtrada (resuelta, de escala grande) $\bar{\phi}$ y la componente residual (no resuelta, de escala pequeña) ϕ' . A partir de la elección de un operador de filtrado, la primera componente se define como:

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_D \phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad , \quad (7.1)$$

donde D es el dominio completo y la función de filtrado G satisface la condición de normalización:

$$\int_D G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1 \quad , \quad (7.2)$$

Este mismo operador es aplicado a las ecuaciones de Navier-Stokes con el objetivo de obtener las ecuaciones que gobiernan el campo filtrado, que son las que resuelve directamente el algoritmo numérico de discretización. Para un flujo incompresible se obtiene el siguiente sistema ³:

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_i} = 0 \quad ; \quad (7.3)$$

$$\rho \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \rho \frac{\partial (\bar{v}_i \bar{v}_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \rho \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad . \quad (7.4)$$

Las ecuaciones anteriores son formalmente análogas a las ecuaciones de Navier-Stokes para el campo completo ($\phi = \bar{\phi} + \phi'$), excepto por el término en que aparece τ_{ij} . Este tensor ($\tau_{ij} = \overline{v_i v_j} - \bar{v}_i \bar{v}_j$), conocido con el nombre de 'esfuerzos de las escalas sub-malla' (τ_{SGS} ; las siglas provienen del nombre

²La técnica multimalla implica 'proyectar' la solución a mallas más gruesas, lo que puede afectar a la resolución de las escalas pequeñas.

³Se supone que el operador de filtrado y la diferenciación conmutan (es decir, $\partial \bar{\phi} / \partial x = \overline{\partial \phi / \partial x}$).

en inglés ‘Sub-Grid Scale’⁴), representa el efecto de las escalas que no son capturadas por el tamaño del filtro y ha de ser modelado para ‘cerrar’ el sistema de ecuaciones. El principal papel del modelo debe ser disipar energía de las escalas resueltas para tratar de imitar el mecanismo de la cascada de energía, fundamental en la turbulencia.

7.2.1. Modelos para los esfuerzos sub-malla

En la literatura se puede encontrar una amplia gama de modelos para evaluar los esfuerzos sub-malla, tales como los derivados del concepto de viscosidad turbulenta, los que se basan en la teoría de la semejanza de escalas o los métodos que definen una ecuación de transporte para alguna cantidad relacionada con los movimientos sub-malla. Se puede consultar una revisión de modelos para LES en [71], [87] ó [88]. En esta memoria se presenta con cierto detalle el modelo Smagorinsky [100], que es ampliamente utilizado en las aplicaciones industriales porque su implementación supone un (relativo) bajo coste computacional adicional a la ya de por sí costosa simulación.

La mayoría de los modelos propuestos en LES se basan en la definición de una ‘viscosidad turbulenta’ (propuesto originariamente por Smagorinsky en [100]), que relaciona los esfuerzos sub-malla con el tensor de velocidad de deformación de las escalas filtradas (\overline{S}_{ij}):

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk} = -2\nu_T\overline{S}_{ij} \quad , \quad (7.5)$$

siendo

$$\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i}\right) \quad . \quad (7.6)$$

Para estimar la viscosidad turbulenta ν_T , se parte de una suposición de equilibrio para las escalas pequeñas. Se considera que su respuesta a cualquier perturbación es prácticamente instantánea (respecto a los tiempos característicos en las escalas grandes) y se igualan el término de producción ($Pr_{SGS} = \tau_{ij}\overline{S}_{ij}$) y el de disipación viscosa (ϵ_{SGS}) de la energía cinética SGS (q_{SGS}):

$$\tau_{ij}\overline{S}_{ij} = -\epsilon_{SGS} \quad . \quad (7.7)$$

Esta hipótesis asume el rango inercial del mecanismo de la cascada de energía: la energía se genera al nivel de las escalas grandes y es transmitida hacia escalas más y más pequeñas, hasta que la disipación viscosa tiene lugar.

⁴El término ‘sub-malla’ es el utilizado históricamente, aunque puede ser engañoso y ‘sub-filtro’ representaría mejor su significado físico.

El modelo de Smagorinsky, considerado el progenitor de los modelos basados en el concepto de viscosidad turbulenta, hace una estimación de la disipación viscosa ϵ_{SGS} utilizando un análisis dimensional, que involucra la viscosidad turbulenta, la disipación viscosa y la longitud característica de las escalas no resueltas más grandes, l :

$$\epsilon_{SGS} \cong q_{SGS}^3/l \quad ; \quad \nu_T \cong lq_{SGS} \quad ; \quad l \cong \Delta \quad , \quad (7.8)$$

donde Δ es el tamaño del filtro (ver más abajo). Estas aproximaciones insertadas en la Ecuación (7.7), dan lugar a la siguiente expresión para la viscosidad turbulenta:

$$\nu_T = (C_s \Delta)^2 |\bar{S}| = (C_s \Delta)^2 (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2} \quad . \quad (7.9)$$

La constante de Smagorinsky C_S fue evaluada por Lilly [58] en $C_S = 0.18$, asumiendo la conocida ley universal del espectro de energía en el rango inercial ($E(k) = K_0 \epsilon^{2/3} k^{-5/3}$, siendo k el número de onda, K_0 la constante de Kolmogorov y ϵ la viscosidad total (la suma de la debida a las escalas sub-mallas y a las resueltas)). Sin embargo, este valor, idóneo en problemas relacionados con dinámica atmosférica, resulta demasiado alto (es decir, el modelo disipa demasiada energía) en aplicaciones con flujos viscosos (ver por ejemplo el trabajo pionero de Deardorff [23] de resolución de un canal turbulento mediante LES). El rango de valores que se suele tomar entonces es $0.065 < C_S < 0.1$. Además, cerca de las paredes, el crecimiento de las escalas pequeñas se ve reducido y es aconsejable utilizar una función que amortigüe el valor de la constante en función de la distancia a la pared.

Para evitar la necesidad de especificar *a priori* un valor fijo para C_S se han propuesto varias mejoras al modelo de Smagorinsky, a costa de un mayor coste computacional. Uno de los más utilizados es el modelo dinámico, propuesto por Germano *et al.* [36] y que Piomelli [86] aplicó (con la modificación introducida por Lilly [59]) satisfactoriamente por primera vez a un canal turbulento completamente desarrollado y un número de Reynolds alto (hasta $Re = 47100$). El modelo dinámico se basa en la definición de un segundo nivel de filtrado (llamado ‘test’) para las escalas más pequeñas de entre las resueltas. La suposición de que estas escalas resueltas (no tan grandes) ‘siguen’ perteneciendo al rango inercial y, por tanto, tienen un comportamiento semejante al de las escalas sub-malla, permite calcular dinámicamente el valor de la constante de Smagorinsky. Este modelo supuso un avance importante en la simulación de flujos fuera del equilibrio (por ejemplo, en transición hacia la turbulencia), puesto que la cantidad de energía disipada se adapta al estado del flujo en cada punto (así, por ejemplo, se anula donde el flujo es laminar y se amortigua cerca de las paredes). Sin embargo, deben imponerse algunas

restricciones al cálculo dinámico de C_S en cada punto (como promediarla en una dirección homogénea o eliminar los valores negativos) para evitar que cambios demasiado bruscos de C_S produzcan inestabilidades numéricas. Para solucionar estas deficiencias Meneveau *et al.* [72] proponen el uso de un método lagrangiano de forma que en la evaluación de la constante en un punto influyen únicamente puntos que pertenecen a la trayectoria de la partícula fluida (dando más peso a los tiempos pasados cercanos) y, por tanto, forman parte de su historia reciente.

7.2.2. Definición del filtro

En la simulación de grandes escalas, la definición del operador de filtrado ($G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, Ecuación (7.1)) y sus consecuencias numéricas juegan un papel no menos relevante que la modelización de los esfuerzos sub-malla (τ_{SGS}). Entre las formas de las funciones filtro habitualmente aplicadas en LES destacan las de tipo caja, gaussiano o corte espectral (ver el apartado 13.2 del libro de Pope [88] para una explicación detallada de estos y otros filtros). En la mayoría de las aplicaciones prácticas se hace uso por su sencillez del filtro tipo caja. En una dimensión y asumiendo un filtro homogéneo $G(x)$ (las implicaciones en caso de filtros no homogéneos serán presentadas más adelante), este tipo de filtro consiste simplemente en calcular el valor medio de la variable en un intervalo Δ :

$$\bar{\phi}(x) = \int_{-\Delta/2}^{+\Delta/2} \phi(x) dx \quad , \quad (7.10)$$

El intervalo Δ se conoce como tamaño (o anchura) del filtro. La extensión a tres dimensiones es directa.

La práctica tradicional en LES es ‘dejar’ que el campo de flujo sea filtrado implícitamente por la malla de discretización y definir el tamaño del filtro Δ (a incluir en el modelo para las escalas sub-malla) igual al paso de malla (es decir, la operación de filtrado no se programa explícitamente en el modelo Smagorinsky ⁵). Sin embargo, conforme se ha querido aplicar LES a configuraciones más realistas (donde las mallas uniformes pierden su utilidad), dicha práctica ha necesitado ser revisada para estudiar su viabilidad

⁵En el modelo dinámico, aunque el primer nivel de filtrado es también realizado implícitamente por la malla, es necesario aplicar explícitamente el segundo nivel de filtrado (el de ‘test’, $\tilde{\Delta}$). Es interesante destacar que puesto que la integración es discreta, el tamaño efectivo del filtro $\tilde{\Delta}_f$ puede ser diferente al intervalo definido para la integración $\tilde{\Delta}$. Así, por ejemplo, en el caso habitual de usar un valor de $\tilde{\Delta} = 2dx$ (con dx la anchura de celda) y evaluar la integral mediante la regla del trapecoide, el tamaño del filtro efectivo a incluir en el modelo es $\Delta_f = \sqrt{6}dx$

en mallados complejos (como mallas no estructuradas o estructuradas a bloques). Es conocido que en el caso de mallas no uniformes el filtrado y la diferenciación no conmutan (ver, por ejemplo, [40]) provocando la aparición de términos adicionales de cierre (aparte del tensor de esfuerzos sub-malla) en las ecuaciones estándar de LES.

7.2.3. Mallas no uniformes

A continuación se da una explicación intuitiva para las dificultades que pueden surgir en LES cuando la malla cambia abruptamente (ver, por ejemplo, [10]). En la frontera de una región discretizada con celdas finas y otra con celdas gruesas, la viscosidad turbulenta es discontinua y se pueden producir inestabilidades numéricas o comportamientos irreales (ejemplos de aplicaciones donde se observan estas deficiencias son [15], [31], [7]). Cuando el tamaño de la celda aumenta repentinamente la malla gruesa no puede capturar los torbellinos más pequeños que llegan por convección desde la malla fina y aparecen errores por *aliasing*. Aunque el incremento de la viscosidad turbulenta (debido al incremento del tamaño de celda) actúa principalmente sobre las escalas más pequeñas, los errores se distribuyen en todo el espectro; dichos errores se propagan por tanto al flujo resuelto directamente corrompiendo los resultados. En el caso contrario, cuando el flujo se mueve desde la región discretizada con una malla gruesa hacia la región con malla fina, se requiere una cierta distancia para generar los torbellinos pequeños que capturan las celdas de tamaño más pequeño. En esta transición la viscosidad turbulenta decrece, mientras que los esfuerzos de Reynolds que soportan estos torbellinos no han sido todavía generados; el balance de cantidad de movimiento es por tanto incorrecto y se introducen de nuevo errores.

Para evitar este mal comportamiento se ha estudiado la aplicación explícita de un filtrado ([45], [60]). En este caso, el campo de flujo resulta descompuesto en tres componentes: resuelto directamente, resuelto sub-filtro y sub-malla (o no resuelto). Sin embargo, la eficiencia de esta práctica es discutible por su alto coste computacional (Lund [60], por ejemplo, concluyó que refinar la malla sin aplicar un filtrado explícito puede ser computacionalmente menos costoso para reducir los errores numéricos) y su uso no se ha extendido. No obstante, estos trabajos pusieron de manifiesto que debe haber una relación de, al menos, 2 entre el tamaño de celda y el tamaño de filtro para que las escalas más pequeñas sean resueltas con suficiente precisión. En este contexto, además, se llega al concepto de solución de grandes escalas independiente de la malla [44]. Si el tamaño de filtro está directamente conectado a la malla, conforme se refina ésta, también se resuelven directamente más escalas y la solución va cambiando tendiendo a una DNS. Manteniendo, en cambio, el

tamaño de filtro constante y aumentando la relación entre el tamaño del filtro y la celda, las escalas que se resuelven son siempre las mismas pero con mayor resolución y los resultados convergen hacia una única solución.

Varios autores han investigado el efecto en el flujo de los términos adicionales de cierre que surgen en las ecuaciones estándar de LES cuando se usa una anchura de filtro variable, debidos a que las operaciones de diferenciación y filtrado no conmutan [40] [48] [9]. En primer lugar, Ghosal y Moin [40], estudiaron este problema en flujos acotados, donde se debe refinar la malla para capturar las estructuras turbulentas pequeñas generadas cerca de las paredes. Estos autores mostraron que el efecto en el flujo cuando se aplica una tangente hiperbólica (función bastante común en el refinamiento), los errores introducidos no son mayores que los debidos a la discretización en un método de segundo orden. Bos and Geurts [9] extendieron esta investigación y mostraron que si estos términos (de conmutación) no se tienen en cuenta los errores introducidos son de carácter disipativo, escalan con el gradiente del tamaño del filtro, y su valor puede ser incluso comparable a la magnitud de los esfuerzos SGS. Estos autores concluyeron que la modelización explícita de los términos adicionales de cierre es inevitable en LES con filtros asimétricos y variaciones abruptas.

Una alternativa para evitar los problemas descritos arriba fue explorada por la autora de esta memoria durante una estancia de investigación en la Universidad de Maryland, bajo la tutela del Profesor Ugo Piomelli (con el objetivo de adquirir habilidades para la simulación de LES). En principio, el ancho de filtro es totalmente independiente de la malla: Δ representa la longitud de las escalas más pequeñas resueltas directamente y la malla debe ser lo suficientemente fina para resolver estas escalas. La estrategia propuesta consiste en desacoplar el tamaño del filtro del de la celda, en lugar de aplicar un *ratio* uniforme en todo el dominio computacional. Así, si se mantiene la anchura del filtro constante a través de una discontinuidad (asegurando un nivel consistente con las capacidades de resolución de la malla más gruesa), se consigue eliminar la discontinuidad en la velocidad, a costa de una sobre-resolución de las estructuras más pequeños resueltas directamente. La anchura del filtro puede entonces ser reducida suavemente hasta un valor consistente con la malla más fina. Se puede consultar el artículo conjunto publicado como resultado de esa investigación preliminar en [21].

Así pues, en LES intervienen dos fuentes básicas de error en la modelización del efecto de las estructuras sub-malla (o, más apropiadamente, sub-filtro): por un lado, las aproximaciones del propio modelo físico (el modelo Smagorinsky, por ejemplo) y por el otro, los errores numéricos debidos a una limitada resolución de las escalas más pequeñas resueltas. Estas dos fuentes se pueden desacoplar, pero están relacionadas entre sí. Los errores numéricos

pueden ser eliminados (y cuantificados) refinando la malla (y manteniendo el tamaño de filtro constante) hasta conseguir una solución independiente de la misma. Se pueden utilizar los resultados de una simulación numérica directa (DNS), filtrados adecuadamente con el mismo tamaño de filtro, para obtener el error debido al modelo físico. Estos estudios fueron llevados a cabo por Meyers *et al.* [73] y sus conclusiones son un tanto descorazonadoras: hacer una LES utilizando el mejor modelo y la mejor resolución no implica necesariamente obtener la solución más precisa (concretamente, en la energía cinética total) puesto que los errores procedentes de la modelización y de la discretización se compensan (es decir, tienen signos contrarios) y la suma total puede ser más baja que cada contribución por separado. Afortunadamente, se puede construir una base de datos que guíe la elección de los parámetros numéricos (refinamiento de la malla) y físicos (constante de Smagorinsky) para una simulación de grandes escalas ‘cercana a la óptima’ [37].

Esta paradoja propició quizá el desarrollo del método MILES (Monotonically Integrated LES), que evita la modelización explícita de los esfuerzos sub-malla y confía en que el efecto disipativo de las escalas no resueltas sea reproducido implícitamente por el método numérico de discretización; concretamente, a través del carácter difusivo de un esquema convectivo no-lineal de alta resolución (como, por ejemplo, los construidos a partir de una función limitadora de flujo que fueron descritos en el Apartado 2.3 de esta memoria). En [33] se presentan más detalles de esta técnica y se compara con el LES estándar.

Para finalizar con la teoría de LES, se considera interesante mencionar que recientemente se ha revisado el modelo de Smagorinsky con el propósito de buscar una justificación matemática a las ecuaciones resultantes (en su desarrollo se tuvieron en cuenta básicamente principios físicos). Los trabajos presentados por Geurts y Holm [38] y por Guermond *et al.* [43] indican que un modelo de para las escalas sub-malla junto con la técnica de filtrado equivale a *regularizar* las ecuaciones de Navier-Stokes.

7.3. Caso de aplicación: estela turbulenta tras un cilindro cuadrado.

En este apartado se presentan los resultados obtenidos al aplicar el algoritmo acoplado desarrollado en este trabajo a la simulación mediante LES del desprendimiento turbulento de vórtices tras una varilla. Si bien se trata de una configuración básica, las características del problema (tridimensio-

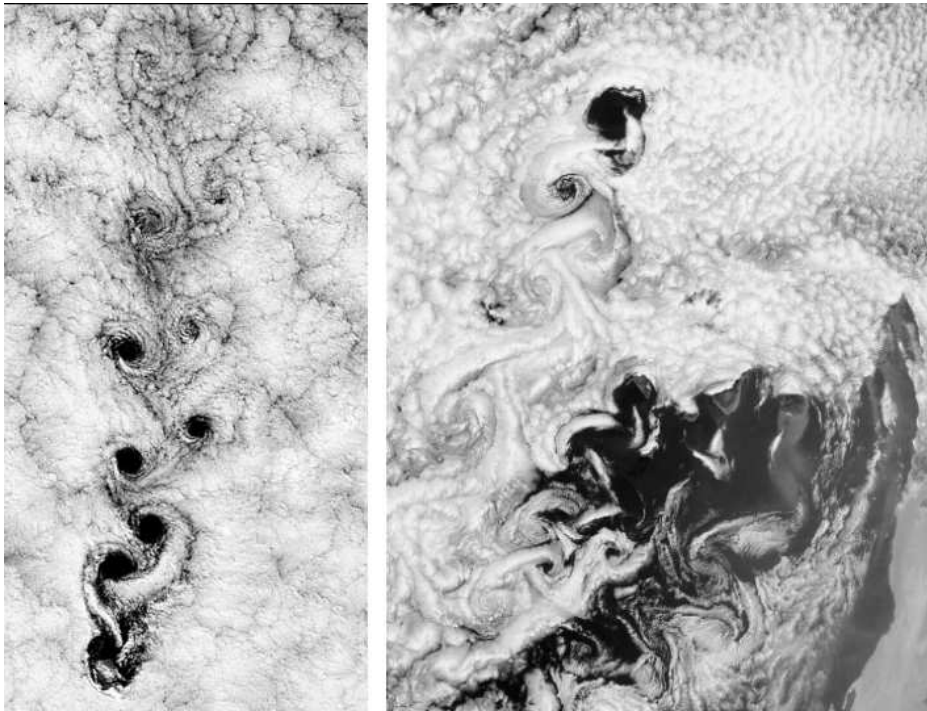


Figura 7.1: Estelas de viento a sotavento de la isla del Pacífico Sur Alexander Selkirk (izquierda) y de las islas Madeira y Canarias (derecha). Imágenes de satélite tomadas por la NASA, orientadas con el Norte hacia arriba. En el primer caso, viento S; en el segundo, NNE.

nal, transitorio, con gradientes altos tanto de presión como de velocidad, viscosidad turbulenta variable, convección de vórtices a la salida del dominio computacional) hacen de él una prueba exigente para el algoritmo propuesto.

La capacidad de predecir (y comprender) el comportamiento del flujo turbulento alrededor de cuerpos rígidos tiene interés práctico porque aparece en muchas configuraciones de Ingeniería como edificios altos y puentes colgantes, anclajes de llama en cámaras de combustión o en la región de refrigeración de dispositivos electrónicos; también en situaciones ambientales como el flujo presentado en la Figura 7.1, donde se observa la aparición de estelas a sotavento de islas con topografía elevada. Este tipo de flujos se caracteriza principalmente por la separación de la capa límite de las paredes del cuerpo rígido y la aparición aguas abajo de una estela turbulenta. Vórtices generados por rozamiento alrededor del obstáculo, se desprenden y fluyen por convección formando una estela muy compleja con capas límite curvas, vorticidad muy intensa en su interior y penetración de estructuras de flujo del entorno. Si el obstáculo presenta cierta simetría respecto a la dirección principal del flujo,

estos vórtices se van desprendiendo alternativamente de sus lados laterales e inducen periodicidad al flujo. Otro efecto del desprendimiento de vórtices es la generación de fuerzas fluctuantes intensas sobre el obstáculo.

En el caso del cilindro cuadrado, el punto de separación es fijo y está localizado en sus esquinas frontales. Mientras que la predicción mediante la técnica RANS de flujos con separación es deficiente ([93], [34]), se han publicado numerosos resultados computacionales basados en modelos de LES que predicen adecuadamente el comportamiento del flujo. Sin embargo, existe cierta disparidad en los valores de algunos parámetros relevantes para la que no existe una explicación clara; ello indica que éste es un problema que presenta retos para los modelos LES. Ejemplos de dichos trabajos computacionales son el *workshop* dirigido por Rodi *et al.* [94], la comparación de varios modelos para los esfuerzos sub-malla llevada a cabo por Sohankar *et al.* [102], la información proporcionada por Srinivas *et al.* [105] sobre el tamaño de las estructuras coherentes de la estela cerca y lejos de la varilla, la aplicación de una malla no estructurada llevada a cabo por Camarri *et al.* [15] o la batería de casos resuelta por Nakayama *et al.* [76] para intentar explicar la disparidad de resultados. Para validar los resultados computacionales se cuenta con el detallado trabajo experimental de Lyn y Rodi [63] y Lyn *et al.* [62] para un número de Reynolds moderadamente alto ($Re = 21400$).

En lo que sigue, ϕ representa el campo resuelto directamente (por simplicidad, se prescinde de la barra superior en $\bar{\phi}$).

7.3.1. Detalles de la simulación numérica

En este trabajo se ha realizado una LES estándar, es decir, la malla es la encargada de filtrar (de manera implícita) las estructuras pequeñas y se modela su efecto en el flujo. Teniendo en cuenta los ‘experimentos numéricos’ llevados a cabo por Fureby *et al.* [33], que muestran una cierta insensibilidad de los resultados al modelo de LES empleado para este problema, se ha utilizado el más sencillo: Smagorinsky con una constante fija $C_S = 0.1$ en todo el campo y tomando $\Delta = V^{1/3}$ (V es el volumen de la celda). Estos dos valores pueden reformularse de una manera más acorde con lo expuesto en el Apartado 7.2, teniendo en cuenta que en el modelo únicamente interviene el producto de ambos: $l = C_S \Delta$ (ver Ecuación para la viscosidad turbulenta (7.9)). Este parámetro l se puede interpretar como el parámetro relevante que define el tamaño de las escalas más pequeñas ya que, para un mismo Δ , valores mayores de C_S hacen que el modelo sea más disipativo (discusiones sobre este tema aparecen en [70] o [73]). Así, por ejemplo, unos valores de $C_S = 0.065$ y $\Delta = 1.5V^{1/3}$ cumplen con los requisitos de que Δ sea mayor que el tamaño de celda (para tener una adecuada resolución de las escalas

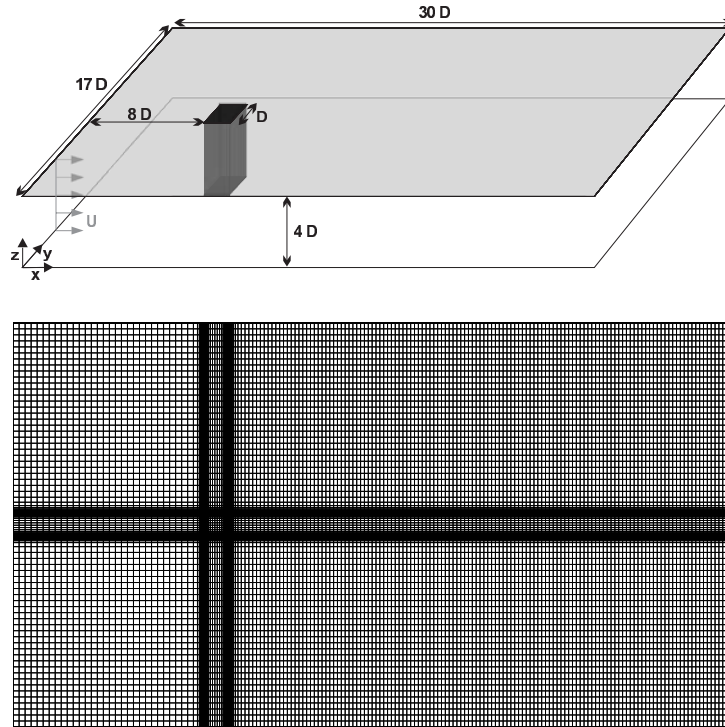


Figura 7.2: LES. Cilindro cuadrado ($Re=21400$). Esquema del problema y malla de discretización.

más pequeñas) y C_S sea menor que 0.1 (como se ha observado en flujos en canales), manteniendo el mismo valor de l .

La configuración del dominio computacional y la malla de discretización se presentan en la Figura 7.2. El área de la superficie transversal ($x = cte$) es $17D \times 4D$ y la longitud total es $30D$, siendo D la altura del prisma, colocado a una distancia $8D$ de la entrada. Como se ha indicado en el Apartado 7.2, la elección de la malla de discretización es importante en los cálculos hechos mediante LES. El número de celdas de la malla es $214 \times 110 \times 25$; se ha decidido refinar la malla en dirección horizontal y vertical (x, y) cerca del obstáculo con el propósito de aplicar una condición de contorno de no deslizamiento en las paredes del prisma. La función elegida para el refinamiento ha sido una tangente hipérbolica (Ghosal y Moin [40] mostraron que los errores introducidos por variar el tamaño del filtro con esta función no son importantes; ver Apartado 7.2.3). El primer nodo adyacente se encuentra a una distancia $\delta/D = 6.7e - 3$ de la pared. Lejos del obstáculo, la malla es uniforme siendo la anchura de la celda $\Delta y/D = 0.25$ en la dirección vertical y aguas arriba del obstáculo. Aguas abajo, en cambio, el tamaño de celda fijado es menor $\Delta y/D = 0.15$ para representar mejor la estela. En la dirección

transversal la malla es uniforme.

En cuanto a las condiciones de contorno, se ha fijado una velocidad uniforme U en la entrada y un valor nulo en las tres componentes de la velocidad en las paredes del prisma (condición de no deslizamiento). En el resto de superficies frontera (tanto en la dirección vertical como transversal) se aplica una condición de plano de simetría: convección normal cero y gradiente nulo. La presión, por su parte, no ha sido fijada en ningún punto y se ha impuesto gradiente nulo en todas las superficies del contorno.

La relación de aspecto de las celdas es grande en las cercanías del obstáculo y la presencia de gradientes altos de velocidad en esta región hacen que el esquema convectivo CDS dé lugar a inestabilidades numéricas. Para evitarlo, se ha utilizado el esquema convectivo SMART.

El problema resuelto es transitorio y requiere por tanto especificar un campo inicial. Sin embargo, es un flujo estadísticamente estacionario en el que las soluciones anteriores al momento en que se alcanza el movimiento periódico de desprendimiento de vórtices son descartadas. Habitualmente, el campo elegido para empezar la simulación es el flujo en reposo y la simulación de esta etapa transitoria puede consumir bastantes recursos computacionales sin ser de interés para los resultados finales. En este trabajo se ha seguido una estrategia diferente para obtener el campo inicial. Se ha realizado una simulación previa en dos dimensiones (el número de grados de libertad es $N_z = 25$ veces menor). Tras alcanzar el comportamiento periódico, se ha tomado el campo obtenido en un tiempo dado para construir la solución inicial de la simulación 3D, proyectando el mismo campo en cada plano transversal y fijando la velocidad en esta tercera dirección en 0 (o un valor muy pequeño). Como se muestra en el siguiente apartado, esta estrategia permite capturar las inestabilidades que inician la transición hacia la estela turbulenta tridimensional.

La integración temporal se realiza mediante un esquema implícito, y por tanto el paso de tiempo puede ser elegido teniendo en cuenta únicamente la resolución temporal que se requiere para capturar las escalas de tiempo de las estructuras más pequeñas resueltas directamente (es decir, no existe un paso de tiempo mínimo para asegurar la estabilidad numérica de un esquema explícito). Los resultados mostrados en esta memoria se han obtenido usando la aproximación Euler de primer orden y un paso temporal $\Delta t = 0.025D/U$. Aunque un esquema temporal de segundo orden es más apropiado en LES, el objetivo de este apartado es estudiar el comportamiento del algoritmo propuesto en la simulación de flujos turbulentos; no obstante, los resultados obtenidos con la aproximación de primer orden son bastante buenos (ver siguientes secciones) y se plantea como trabajo futuro compararlos con el esquema Euler de segundo orden.

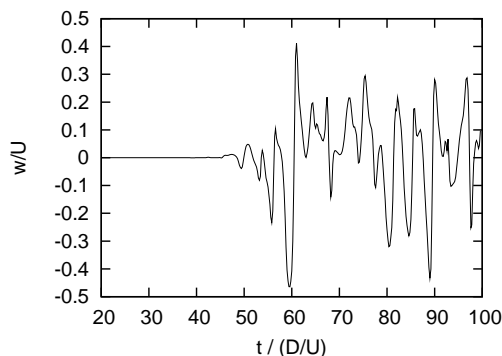


Figura 7.3: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Evolución transitoria de la velocidad transversal, w , en un punto de monitorización $x/D = 9.5, y/D = 8.5, z/D = 2$.

7.3.2. Etapa de transición

La simulación se usa en lugar de experimentos imposibles, o en lugar de teorías no inimaginables, para prolongar así la dialéctica experiencia-teoría que mueve el progreso científico.

- Jorge Wagensberg

Partiendo del campo inicial (obtenido de la manera explicada en el subapartado anterior), se monitoriza la evolución de algunas variables para determinar el momento en el que el flujo alcanza el comportamiento periódico e iniciar el cálculo de los parámetros que lo caracterizan, mediante su promediado durante un número suficiente de ciclos.

La Figura 7.3 presenta la monitorización de la velocidad transversal w/U en un punto situado a una distancia D de la pared del prisma (aguas abajo) y en la línea central del canal (es decir, en el punto $x/D = 9.5, y/D = 8.5, z/D = 2$). Inicialmente esta componente de la velocidad es nula (se parte de un campo bidimensional); en cierto momento se ‘activa’ y empieza a manifestarse el carácter tridimensional de los flujos turbulentos (en torno a $t = 45D/U$). La Figura 7.4 muestran isosuperficies (cerca del obstáculo) de la vorticidad transversal ω_z antes y después de este momento ($t = 40D/U$ y $t = 50D/U$, respectivamente). En el primer caso, se observan superficies cilíndricas, como corresponde a un flujo bidimensional. En el segundo caso, en cambio, se aprecia claramente que dichas superficies empiezan a deformarse.

El fenómeno de transición hacia la turbulencia en la estela de un cilindro cuadrado ha sido investigado recientemente en un trabajo experimental por Luo *et al.* [61] en [61]. Estos autores encontraron dos modos de inestabilidad

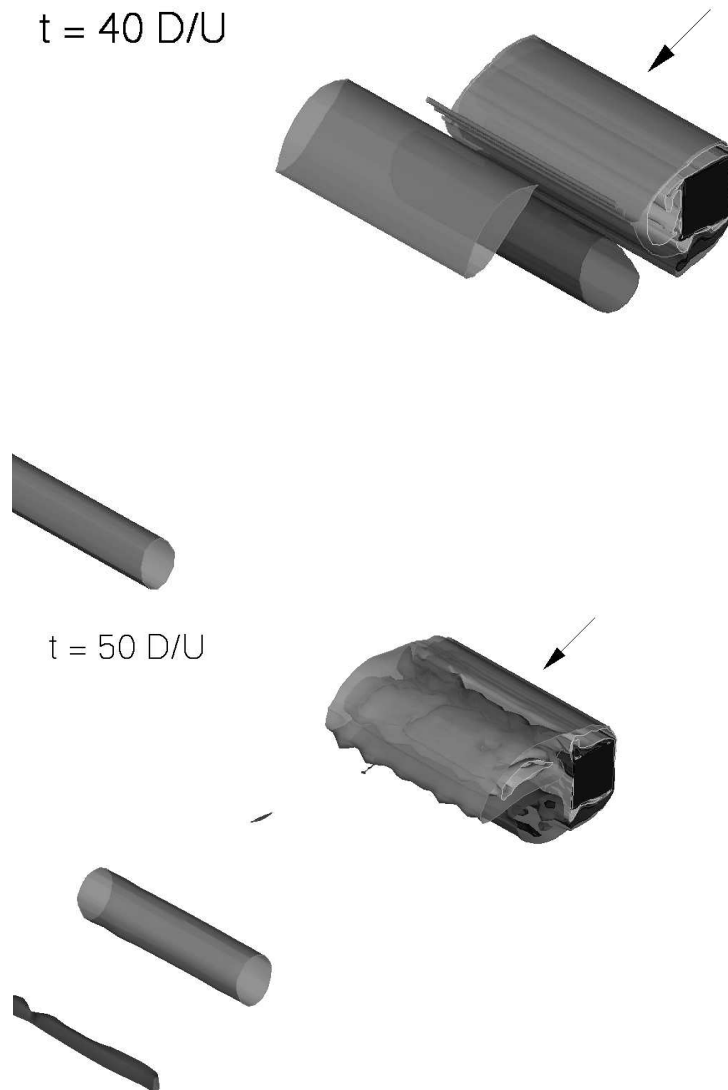


Figura 7.4: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Isosuperficies de vorticidad transversal (w_z) en un tiempo anterior ($t = 40D/U$, izquierda) y posterior ($t = 50D/U$, derecha) al momento en que empieza a manifestarse el carácter tridimensional de la turbulencia. La flecha marca la dirección del flujo.

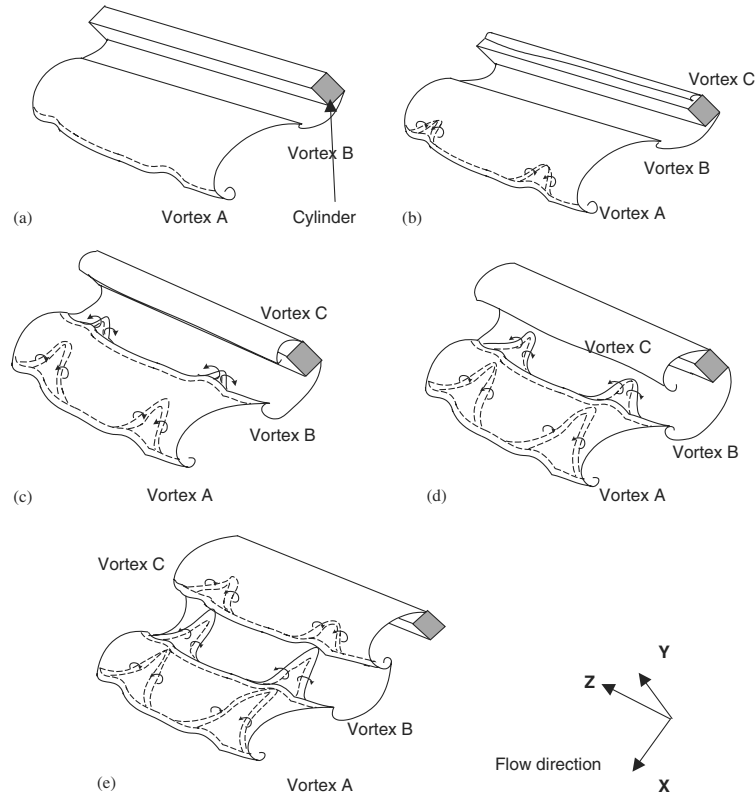


Figura 7.5: LES. Cilindro cuadrado. Esquema ilustrativo del desarrollo de las inestabilidades de modo A, tomado de Luo *et al.* [61].

de los vórtices primarios (ω_z), que marcan la transición de la estela del régimen laminar al turbulento: el modo A (generado a partir de un número de Reynolds crítico $Re = 160$) y el modo B (a partir de $Re = 204$). Sugirieron el mecanismo de desarrollo que se ilustra en los esquemas de las Figuras 7.5 y 7.6, resumido en lo que sigue. El desprendimiento de vórtices alterno de los laterales del obstáculo forman dos filas (o ‘calles’) de vórtices ω_z , llamados vórtices primarios; en la fila de arriba los núcleos giran en sentido negativo $\omega_z < 0$, mientras que en la fila de abajo giran en sentido positivo ($\omega_z > 0$). El modo A tienen su origen en la deformación de uno de estos núcleos, en su dirección transversal. Estas inestabilidades provocan la aparición de vórtices secundarios (ω_x) envolviendo a los primarios, que fluyen por convección solidariamente con el núcleo. El modo B, en cambio, se genera en las proximidades del prisma, en las capas que se desprenden por rozamiento. Aquí se generan inestabilidades debidas, probablemente, a la fuerte penetración de la fila inferior de vórtices primarios sobre la superior

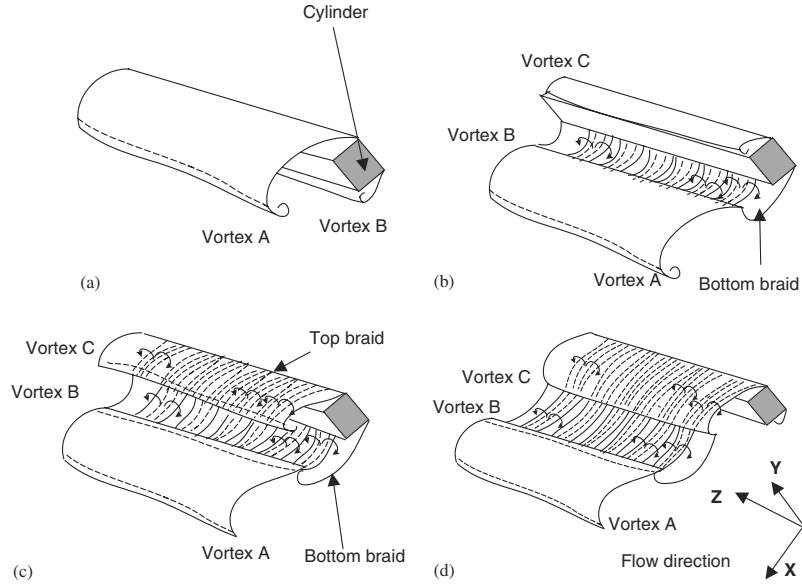


Figura 7.6: LES. Cilindro cuadrado. Esquema ilustrativo del desarrollo de las inestabilidades de modo B, tomado de Luo *et al.* [61].

(o viceversa), que deja ‘huellas’ en las capas inferiores (o superiores). En el seno de estas ‘huellas’ se generan ‘lenguas’ de vorticidad longitudinal ω_x .

La Figura 7.7 muestra iso-superficies de ω_x , en la simulación llevada a cabo en este trabajo, poco después de empezar a manifestarse el carácter tridimensional del flujo (la velocidad en dirección transversal no es nula en torno a $t = 45D/U$). Partiendo del campo inicial bidimensional descrito en el apartado anterior, la presente simulación reproduce el mecanismo de inestabilidad de modo B. En concreto, se aprecian claramente, por un lado, las deformaciones transversales en un núcleo de la calle inferior de vórtices primarios (Figura 7.7, arriba), y los correspondientes vórtices longitudinales ω_x (abajo); por otro lado, cerca del obstáculo, la deformación de una capa de rozamiento desprendida del lateral superior y con penetración en la fila inferior, tiene asociados vórtices longitudinales ‘montados’ sobre dicha capa. Se observa la forma alargada de estas estructuras secundarias; de ahí que se les dé el nombre de ‘lenguas’.

La Figura 7.8 presenta la proyección de ω_z (arriba) y ω_x (abajo) en el plano medio $x-z$. Los vórtices secundarios se agrupan en líneas transversales ($x = cte$), a lo largo de las cuales el sentido de giro de los núcleos se va alternando; la posición de estas líneas coincide con zonas donde los vórtices primarios ω_z se deforman. La Figura 7.9 muestra la proyección de estas dos

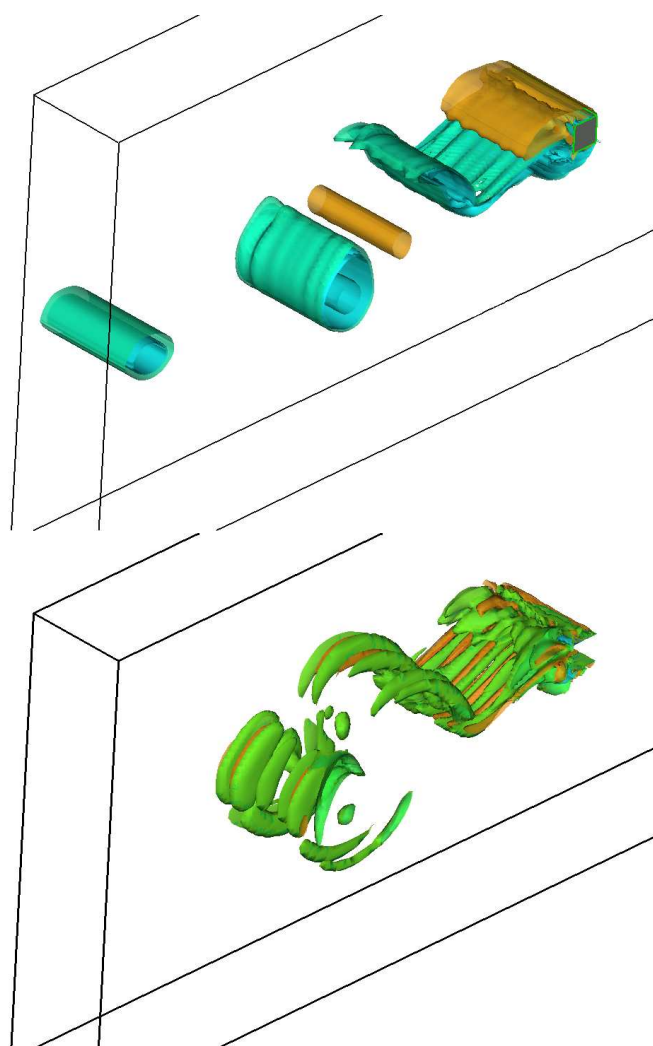


Figura 7.7: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Isosuperficies de vorticidad transversal ω_z (arriba) y longitudinal ω_x (abajo) en $t = 50D/U$. Se observan las inestabilidades correspondientes al modo B (ver Figura 7.6).

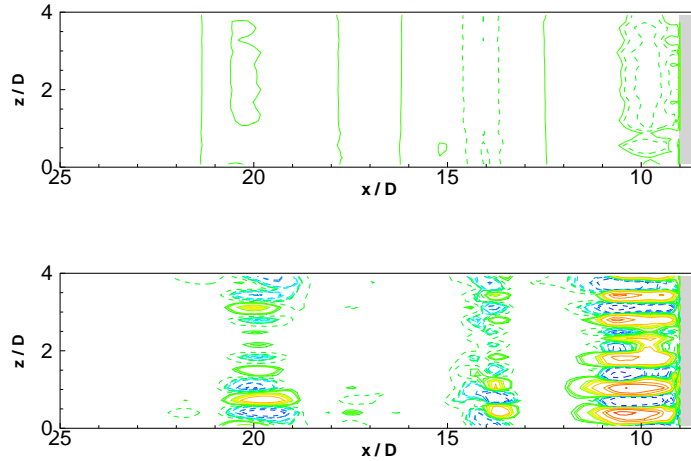


Figura 7.8: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Contornos de ω_z (arriba) y ω_x (abajo) en el plano $x - z$ en $t = 50D/U$. Se observan las inestabilidades modo B (ver Figura 7.6).

componentes de vorticidad en el plano $x - y$. Los isocontornos de vórtices secundarios (w_x) se presentan en escalas de grises y las líneas indican los isocontornos de vórtices primarios (w_z) (continuas para los valores positivos y discontinuas para los negativos). Se observa que en torno a los núcleos primarios se forman gruesas estructuras de vorticidad longitudinal; en las zonas donde la vorticidad transversal forma capas (por ejemplo, entre el obstáculo y el primer núcleo), en cambio, se observan ‘lenguas’ de w_x , que siguen la forma de estas capas.

Por último, el CD adjunto con esta memoria contiene vídeos de isosuperficies de vorticidad y presión, que ilustran el desarrollo de las inestabilidades durante la etapa de transición estudiada en este apartado.

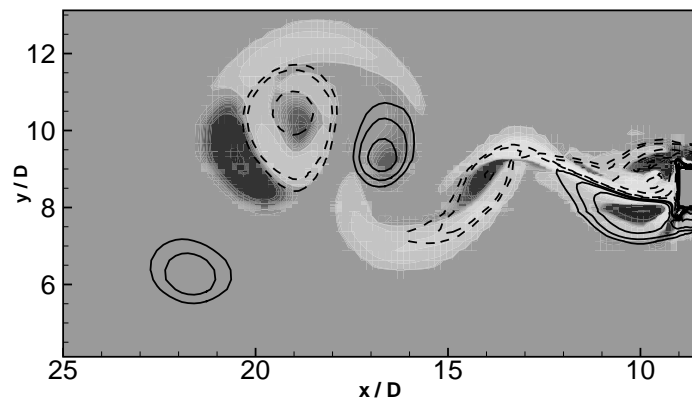


Figura 7.9: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Isocontornos de ω_x (escala de grises) y ω_z (con líneas discontinuas para valores negativos) en $t = 50D/U$.

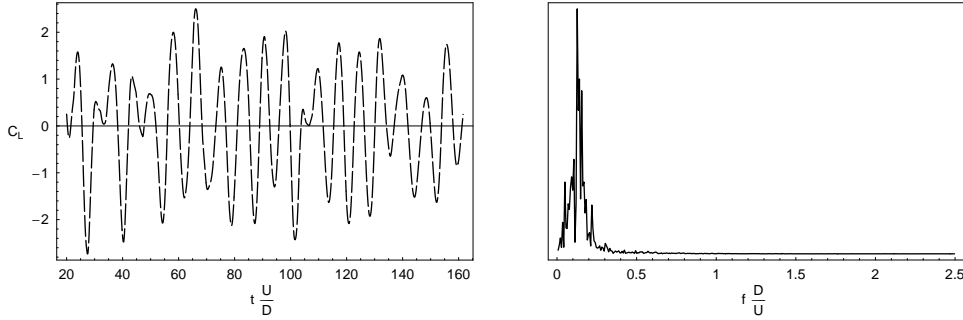


Figura 7.10: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Evolución del coeficiente de sustentación (izquierda) y su análisis espectral (derecha).

7.3.3. Parámetros integrales

En las aplicaciones de ingeniería interesa conocer los parámetros integrales que caracterizan el comportamiento global del flujo (tanto el valor medio como su desviación). La frecuencia de desprendimiento de vórtices se ha evaluado a través del coeficiente de sustentación $C_L = F_L/(\rho AU^2/2)$, con F_L la fuerza de sustentación debida a la diferencia de presiones (la contribución del rozamiento viscoso es despreciable). La Figura 7.10 muestra la evolución temporal de dicho coeficiente (izquierda) y su correspondiente espectro de Fourier (derecha). Se observa que existe una frecuencia principal de oscilación f_0 y, a diferencia de lo que ocurre en el caso laminar (ver Figura 6.22), el movimiento periódico presenta cierta modulación. Esta modulación es obtenida también en los trabajos experimentales y es debida a la interacción de la calle de vórtices principal con los vórtices longitudinales (ver subapartado anterior). La frecuencia principal (adimensional) refleja un número de Strouhal de $St = f_0/(U/D) = 0.133$, que concuerda con el obtenido por Lyn *et al.* [63] en su trabajo experimental ($St = 0.132 \pm 0.004$).

Los parámetros integrales se han obtenido promediando los valores instantáneos en el tiempo durante 15 ciclos (aproximadamente) y también en la dirección transversal. La Tabla 7.1 compara el coeficiente medio de sustentación $\langle C_L \rangle$ y su desviación ($\sqrt{\langle C_L' C_L' \rangle}$, con $C_L' = C_L - \langle C_L \rangle$), el coeficiente de arrastre ($\langle C_D \rangle$, obtenido a partir de la contribución de la presión a la fuerza de arrastre), el coeficiente de presión en la base del cilindro ($\langle C_{Pb} \rangle = \langle p(x/D = 9.0, y/D = 8.5) \rangle / (\rho U^2/2)$) y la longitud de recirculación (L_r calculada como la distancia del punto en el que la velocidad horizontal media se hace cero al centro del obstáculo) con los obtenidos experimentalmente por Lyn *et al.* [62], Norberg *et al.* [78] y Durão *et al.* [26], y con los resultados computacionales de Sohankar *et al.* [102] y Srivinas *et al.* [105]. Se ha elegido, entre los casos presentados por Sohankar *et al.* [102], el que corresponde a la

mallas más finas ($265 \times 161 \times 25$). Los valores presentados en los dos trabajos computacionales y el experimental de Norberg *et al.* [78] están corregidos para tener en cuenta el efecto del bloqueo, es decir, el incremento de la velocidad de la corriente libre (respecto al flujo en la entrada) debido a que el dominio computacional no es infinito y el obstáculo disminuye la sección efectiva del canal. Los resultados presentados en este trabajo están afectados por un factor de bloqueo $\beta = D/H = 5.9\%$ (H es la altura del canal); se han realizado las correcciones propuestas por Sohankar *et al.* [102]:

$$\frac{C_D}{C_{Dc}} = \frac{C'_D}{C'_{Dc}} = \frac{C'_L}{C'_{Lc}} = \alpha \quad ; \quad \frac{1 - C_P}{1 - C_{Pc}} = \alpha \quad , \quad (7.11)$$

donde el subíndice c indica los valores corregidos y $(1/\alpha) = 1 - C_D\beta/(-C_Pb) = 1.085$.

En la tabla se observa un buen acuerdo entre los valores corregidos y los resultados experimentales, comparable a los publicados por Sohankar *et al.* [102] (utilizando un modelo dinámico de una ecuación y una malla fina de $265 \times 161 \times 25$) y más recientemente por Srivinas *et al.* [105] (con el modelo de Smagorinsky dinámico).

Tabla 7.1: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Comparación de los parámetros integrales obtenidos en este trabajo con otros resultados experimentales y computacionales.

	Este trabajo	Este trabajo (bloqueo)	experimental			computacional	
			Lyn ([63],[62])	Norberg [26]	Durão ([78])	Srivinas ([105])	Sohankar ([102])
Re	22000	22000	21400	22000	21400	14000	22000
St	0.133	0.133	0.132 ± 0.004	0.13	0.139	0.135	0.128
$\langle C_L \rangle$	-0.014	-0.014	—	—	—	0.0	—
$\langle C'_L \rangle$	1.17	1.07	—	—	—	1.39	1.12
$\langle C_D \rangle$	2.39	2.20	2.1	2.11	—	2.14	2.09
$-\langle C_{Pb} \rangle$	1.79	1.57	—	1.37	—	1.65	1.38
$\langle L_r \rangle$	1.45	1.33	1.38	—	1.32	1.31	—

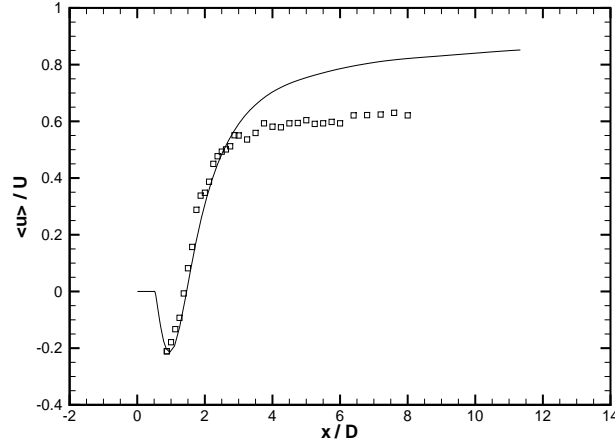


Figura 7.11: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Perfil de velocidad horizontal media en el plano central del cilindro. Comparación de los cálculos en el presente trabajo (línea continua) con los resultados experimentales de Lyn *et al.* [62] (símbolos).

7.3.4. Variables del flujo promediadas en el tiempo

Lyn *et al.* [62] proporcionan una extensa base de datos con medidas experimentales de variables de flujo en líneas verticales localizadas en puntos situados tanto en la estela cercana como en el entorno del cilindro. En este apartado se presentan gráficas que comparan perfiles experimentales con los obtenidos en este trabajo. Como en el caso de los parámetros integrales, las variables medias, $\langle \phi \rangle$, se han obtenido promediando su valor durante 15 ciclos y en la dirección z . En lo que sigue, el eje de coordenadas computacional ha sido desplazado al centro del obstáculo.

La Figura 7.11 muestra el perfil de velocidad horizontal en el eje central del dominio. Se observa que la LES, a diferencia de la técnica del promediado de Reynolds (RANS, ver por ejemplo [34]), es capaz de reproducir adecuadamente la zona de recirculación y su posterior recuperación hacia la región aguas abajo en el que la velocidad alcanza su valor asintótico, que es menor que el de la corriente libre por la pérdida de cantidad de movimiento que sufre la estela tras el obstáculo. El acuerdo de la velocidad mínima con la medida experimental es excelente y también se predice adecuadamente la pendiente de recuperación. Aguas abajo, la velocidad tiende hacia el valor que corresponde a la corriente libre, a diferencia del perfil correspondiente a los resultados de Lyn *et al.* [62], donde parece que la velocidad se estanque

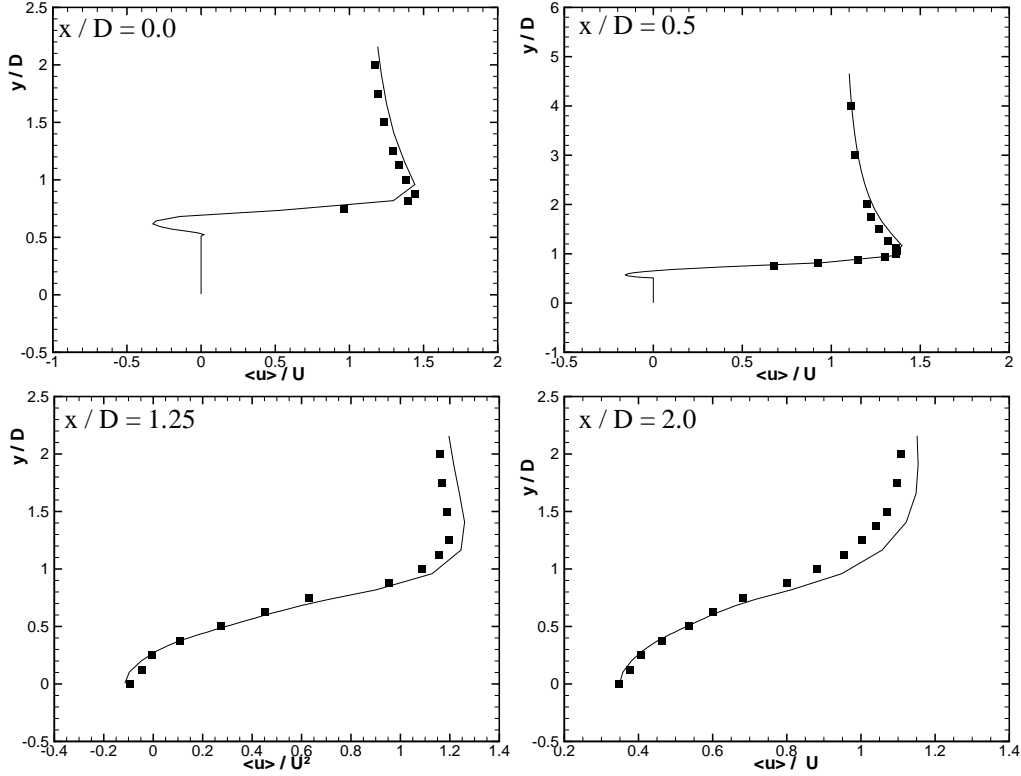


Figura 7.12: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Perfiles verticales de la velocidad horizontal media $\langle u \rangle / U$ (línea continua). Comparación con los resultados experimentales de Lyn *et al.* [62] (símbolos).

entorno a ($\langle u \rangle / U = 0.60$). Esta discrepancia se encuentra también en la mayoría de simulaciones tanto LES como RANS publicadas (ver por ejemplo resultados de un *workshop* en [94]). En cambio, el perfil obtenido experimentalmente por Duraó *et al.* [26] tiende más rápidamente a la corriente libre ($u/U = 0.8$ en $x/D = 5.5$, en acuerdo con el presente trabajo computacional).

Las Figuras 7.12, 7.13 y 7.14 muestran perfiles verticales de las componentes de velocidad media u , v y de los esfuerzos de Reynolds $\langle u'v' \rangle$ (respectivamente) en varias secciones transversales ($x/D = 0., 0.5, 1.25, 2.0$). La primera sección está situada en el centro del obstáculo y captura la región de separación y la segunda coincide con el final del obstáculo. La tercera sección ($x/D = 1.25$) está en la zona de recirculación y la cuarta en la región de recuperación, un poco más aguas abajo del final de la zona de recirculación ($x/D < 1.45$). Se considera que el acuerdo con los datos experimentales es excelente en las tres primeras zonas, mientras que las curvas experimentales son menos pronunciadas que las computacionales en la cuarta sección. Estas

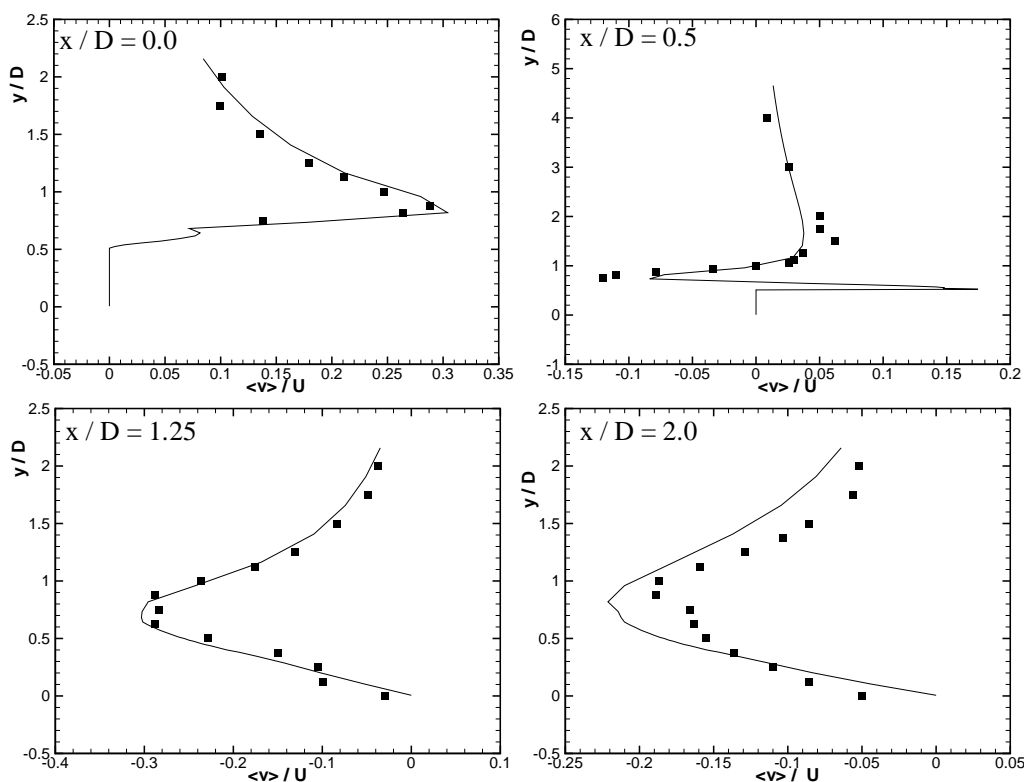


Figura 7.13: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Perfiles verticales de la velocidad horizontal media $\langle v \rangle / U$ (línea continua). Comparación con los resultados experimentales de Lyn *et al.* [62] (símbolos).

diferencias están asociadas probablemente a que la longitud de recirculación en el caso computacional es mayor (ver Tabla 7.1). Por otra parte, en los perfiles computacionales de las tres variables en las secciones que comprenden el obstáculo ($x/D = 0.5$ y $x/D = 1.0$) se observan cambios de signo o picos que no aparecen en las medidas experimentales. El promediado de las líneas de corriente mostrado en la Figura 7.15 (abajo) muestra que estas rápidas variaciones corresponden con zonas de recirculación de pequeño tamaño que se originan muy cerca de las paredes laterales del obstáculo.

Además de las líneas de corriente, la Figura 7.15 presenta contornos, en el plano $x - y$, del promedio del coeficiente de presión $\langle C_p \rangle$ y de los esfuerzos cortantes de Reynolds ($\langle u'v' \rangle / U^2$). Los campos son simétricos respecto a la línea horizontal central y son muy parecidos a los contornos presentados por Sohankar [101] en su estudio del comportamiento del flujo para varios números de Reynolds. En concreto, el desprendimiento de capa límite en el punto de separación (las esquinas anteriores del prisma) genera una zona

7. Simulación de las Grandes Escalas (LES)

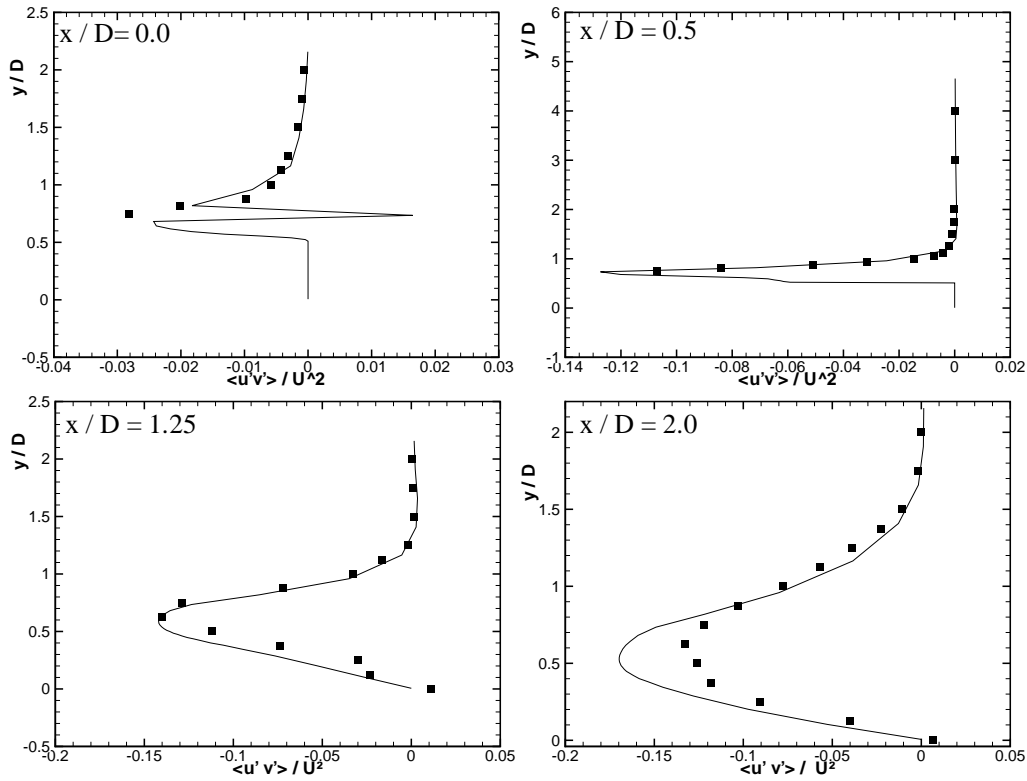


Figura 7.14: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Perfiles verticales de los esfuerzos de Reynolds $\langle u'v' \rangle / U^2$, promediados en el tiempo. Comparación del presente trabajo (línea sólida) con los resultados experimentales de Lyn *et al.* [62] (símbolos).

de recirculación debido al gradiente de presión adverso. Otras dos zonas de recirculación adicionales, a contracorriente de esta primaria, aparecen junto a las paredes laterales (una en la esquina anterior y otra en la posterior).

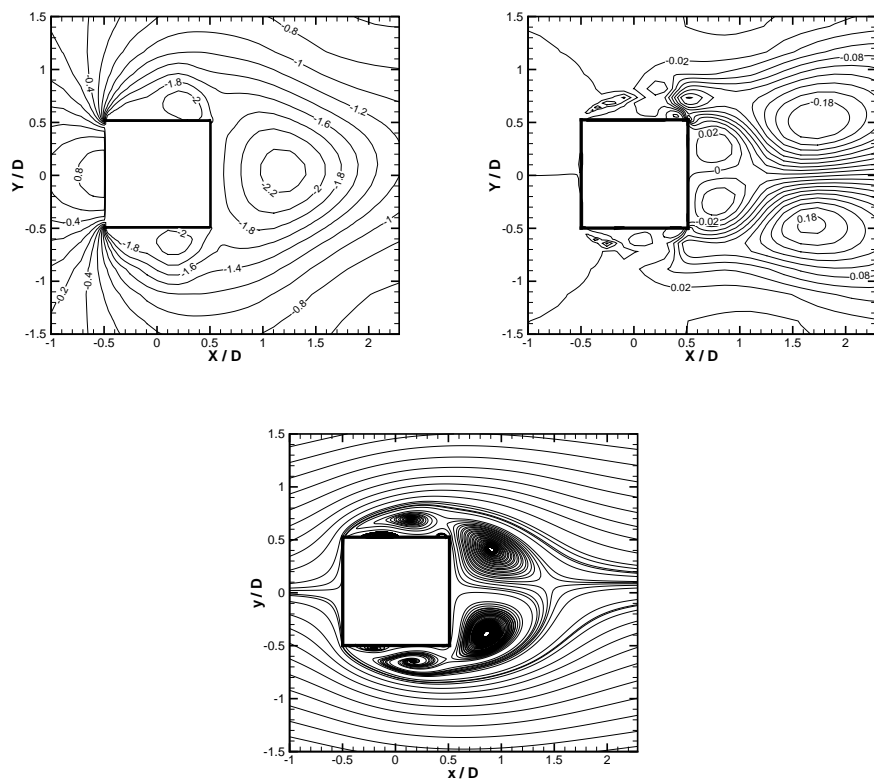


Figura 7.15: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Contornos del coeficiente de presión ($\langle C_p \rangle$, izquierda), de los esfuerzos cortantes de Reynolds ($\langle u'v' \rangle / U^2$, derecha) y líneas de corriente (abajo) en el plano $x - y$.

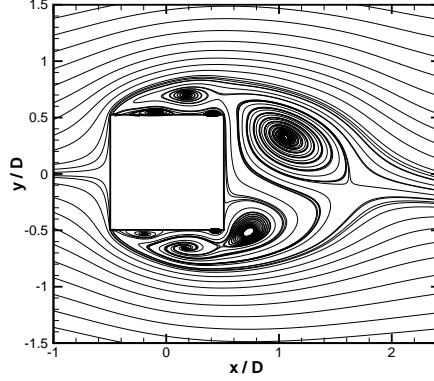


Figura 7.16: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Líneas de corriente promediadas en la fase correspondiente a los valores máximos del periodo del coeficiente de sustentación C_L (Figura 7.10, izquierda).

7.3.5. Promediados de fase

En un flujo periódico el promediado de las variables relevantes en una única fase del ciclo proporciona información adicional respecto a la estadística de las variables medias (en todo el intervalo de tiempo), ya que permite distinguir las fluctuaciones debidas a la turbulencia de aquellas asociadas al movimiento periódico (presentes también en el caso de una estela laminar). En este apartado se ilustran algunas propiedades del flujo observables únicamente desde esta perspectiva, utilizando como referencia básica los trabajos experimentales de Lyn y colaboradores ([63] y [62]).

En el caso de promediar en fase, el campo de una variable resuelta ϕ , se descompone de la siguiente manera:

$$\phi = [\phi] + \phi'' = \langle \phi \rangle + \hat{\phi} + \phi'' \quad , \quad (7.12)$$

donde $[\phi]$ representa el valor de la variable ϕ promediada en una única fase, $\langle \phi \rangle$ es el valor medio de todas las fases, $\hat{\phi} = [\phi] - \langle \phi \rangle$ es la contribución periódica al campo y $\phi'' = \phi - [\phi]$ la fluctuación respecto a la componente periódica.

En este apartado se muestran resultados obtenidos promediando en la fase correspondiente a los valores máximos de la curva periódica del coeficiente de sustentación $\langle C_L \rangle$ (ver Figura 7.10, izquierda). Se ha tomado un sistema de referencia fijo en el obstáculo, y se presenta únicamente el plano medio del cilindro. Las líneas de corriente mostradas en la Figura 7.16 indican que,

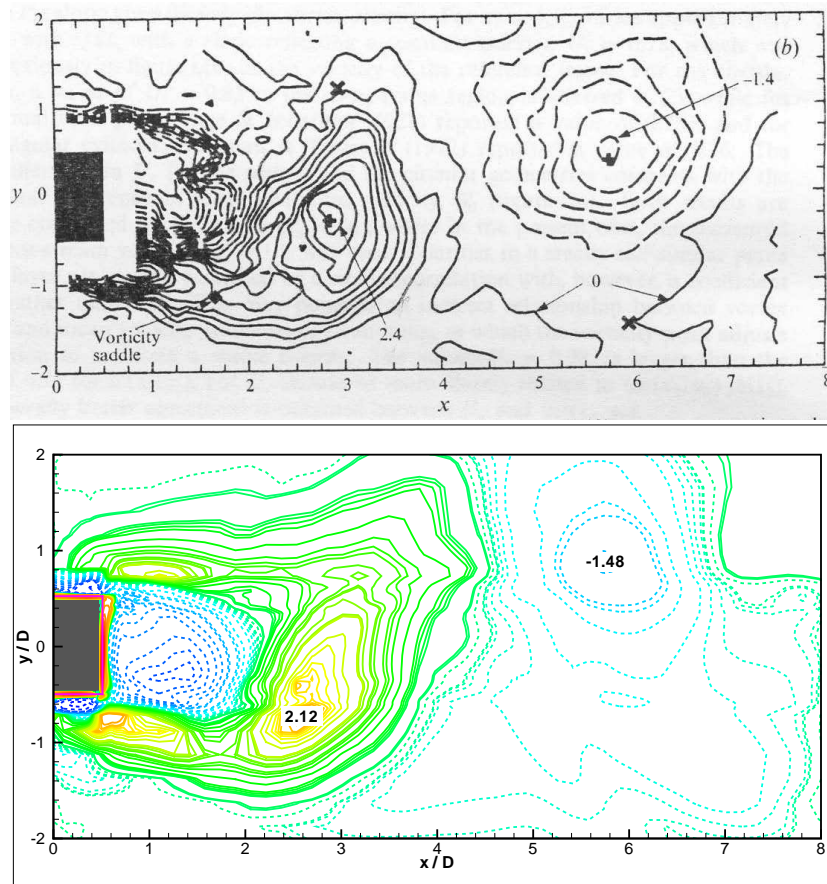


Figura 7.17: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Comparación del campo de vorticidad transversal periódica ($\widehat{w}_z * L/U$) obtenida en este trabajo (abajo) con los resultados experimentales de Lyn *et al.* [62]. Nótese la existencia de una zona sin datos experimentales en torno al cilindro en [62].

como cabía esperar, el promediado en dicha fase captura el momento en el que se desprende un torbellino de la esquina inferior del cilindro cuadrado.

En la Figura 7.17 se compara la componente periódica de vorticidad (\widehat{w}_z) obtenida en este trabajo con la determinada de manera experimental por Lyn *et al.* (figura tomada de su trabajo [62], en la que también se señalan puntos topológicos de interés). El buen acuerdo encontrado, tanto cualitativo como cuantitativo, pone de manifiesto la capacidad de LES para resolver de manera precisa el movimiento periódico (es decir, las escalas grandes) del flujo turbulento.

En la Figura 7.18 se presentan los campos de vorticidad transversal ($[\omega_z]$), los esfuerzos de Reynolds asociados con la producción turbulenta ($[u''v'']$) y

la energía cinética turbulenta ($[k] = [u''u'' + v''v'' + w''w'']^{1/2}$). La distribución de la intensidad turbulenta (o $[k]$) presenta picos en regiones que se corresponden con los centros de los vórtices y crestas de unión entre ellos. En los esfuerzos cortantes de Reynolds ($[u''v'']$), en cambio, se aprecian máximos en las zonas de poca vorticidad o en el punto de silla próximo al obstáculo ($(x/D, y/D) \approx (1.8, -1)$). Por otro lado, se encuentra también un buen acuerdo de estos campos con los resultados experimentales de Lyn *et al.* (ver figuras 12.c y 12.d en [62]). En concreto, se observa lo que Lyn *et al.* denominan una ‘pierna’ con varios picos de $\langle u'v' \rangle$ en torno a $x/D = 6$.

Los resultados presentados en este apartado para variables turbulentas promediadas en una fase concreta (correspondiente a los valores máximos del coeficiente de sustentación) han mostrado un acuerdo muy bueno de la simulación LES con el trabajo experimental de Lyn y colaboradores [62]. Se pretende ampliar este estudio para otras fases del flujo periódico con el fin de profundizar en el modelo conceptual que relaciona puntos topológicos relevantes con la producción y la intensidad turbulenta.

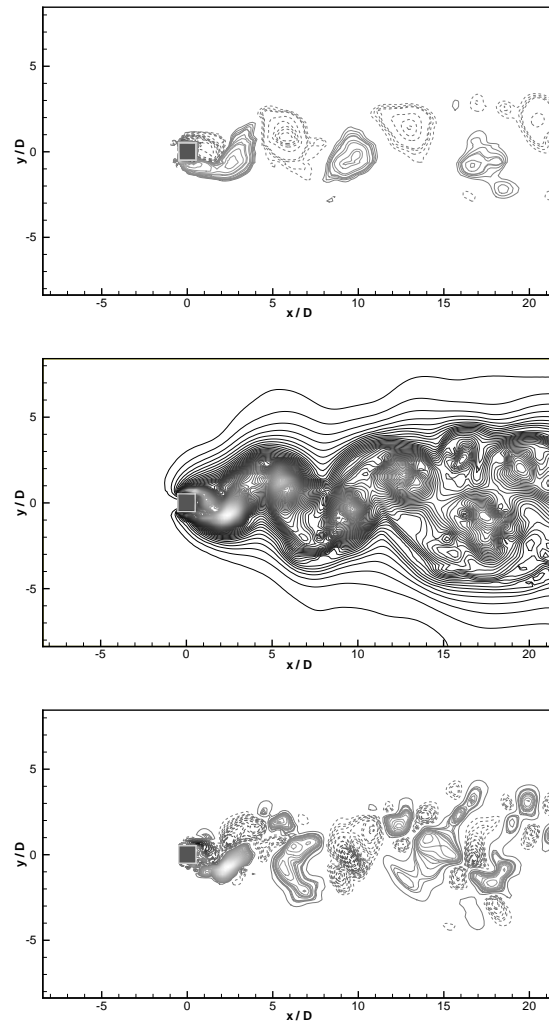


Figura 7.18: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Promediado en fase de vorticidad $[\omega_z] * L/U$ (arriba), energía cinética turbulenta $[k] = [u''u'' + v''v'' + w''w''] / U^2)^{1/2}$ (centro) y esfuerzos cortantes de Reynolds $[u''v''] / U^2$ (abajo).

7.3.6. Campos instantáneos

En este apartado se presentan campos instantáneos del flujo con el objetivo de ilustrar algunas de sus principales características. Se describe la composición típica de la estela completamente desarrollada y también dos situaciones atípicas encontradas en su evolución transitoria: el fenómeno de emparejamiento de vórtices (*pairing*) y la dislocación natural de un vórtice.

Tras la etapa de transición descrita en el Apartado 7.3.2, la estela turbulenta se desarrolla por completo, y las diferencias en comportamiento respecto al flujo laminar presentado en el Apartado 6.5, provienen básicamente de su carácter tridimensional y de una menor difusividad molecular. Como se observa en la Figura 7.19, se desprenden alternativamente del lado superior e inferior del prisma estructuras coherentes predominantemente bidimensionales, vórtices transversales que avanzan aguas abajo formando dos filas que tienden a separarse hacia el flujo libre y en las que el sentido de giro de los vórtices es opuesto. El estiramiento de los vórtices en la capa de separación (del prisma) genera ondulaciones en su dirección transversal. En el cuerpo de estas inestabilidades surgen nuevas estructuras también organizadas, más finas y en dirección longitudinal, ‘lenguas’ de vórtices w_x que avanzan solidariamente con los vórtices transversales. Respecto a la etapa de transición (Figura 7.7), las lenguas de vorticidad longitudinal se han desarrollado formando estructuras más gruesas y presentan en cierta medida una menor organización.

En la estela se detecta de una manera repetitiva el fenómeno conocido como emparejamiento de vórtices (*pairing*), del que se ilustra un ejemplo en la Figura 7.20. Sucede cuando una de las estructuras que se desprende del lado inferior (o superior) del prisma se alinea con la fila superior (o inferior) de vórtices, debido probablemente a que en ese momento existe un fuerte flujo vertical. Esta estructura viaja unida al vórtice desprendido previamente del lado superior (o inferior) del prisma y en la que el sentido del giro es opuesto.

En todo el intervalo de tiempo resuelto en este trabajo se produce en una ocasión el dislocamiento de un vórtice. Este fenómeno, mostrado en la Figura 7.21, se caracteriza por el desprendimiento de una estructura principal (ω_z) ‘rota’ en su dirección transversal, que se traslada aguas abajo por convección. Se produce en torno a $t * U/D = 101$ y corresponde con una irregularidad en la periodicidad del coeficiente de sustentación y con un pico intenso en la fuerza de arrastre (ver Figura 7.22). Además, es interesante remarcar que, tras la dislocación, sucede con menor frecuencia el emparejamiento de vórtices o *pairing*. Braza *et al.* [12] capturaron por primera vez un dislocamiento natural (sin forzar) mediante una simulación DNS en un cilindro (redondo) y más recientemente Saha *et al.* [96] observaron (también computacionalmente) su

ocurrencia en la transición hacia la estela tridimensional en un cilindro cuadrado. Ambos trabajos estudiaron únicamente flujos a números de Reynolds bajos (hasta $Re = 500$).

En el CD adjunto a esta memoria se incluyen distintos vídeos que muestran evoluciones del flujo entre los tiempos 40 y 114 (t^*U/D), correspondientes a la fase de transición hacia la turbulencia tridimensional (aprox. 40-50 en esas mismas unidades temporales) y un intervalo estadísticamente estacionario (el resto). Los vídeos ‘turbo_vortz_40-114.avi’, ‘turbo_vortx_40-114.avi’, ‘turbo_cp_40-114.avi’ muestran la evolución de las iso-superficies de vorticidad transversal (ω_z) y longitudinal ω_x , y del coeficiente de presión c_p , respectivamente. Además se incluyen los videos ‘turbo_vortz_40-114_upwind.avi’ y ‘turbo_vorty_40-114_upwind.avi’ con una vista alternativa, aguas arriba del prisma, de w_z y también de la componente vertical de vorticidad w_y . Se aprecia con claridad, especialmente en la evolución de w_z , la dislocación de un vórtice (en torno a los 42 s de los 46 s de duración total del vídeo).

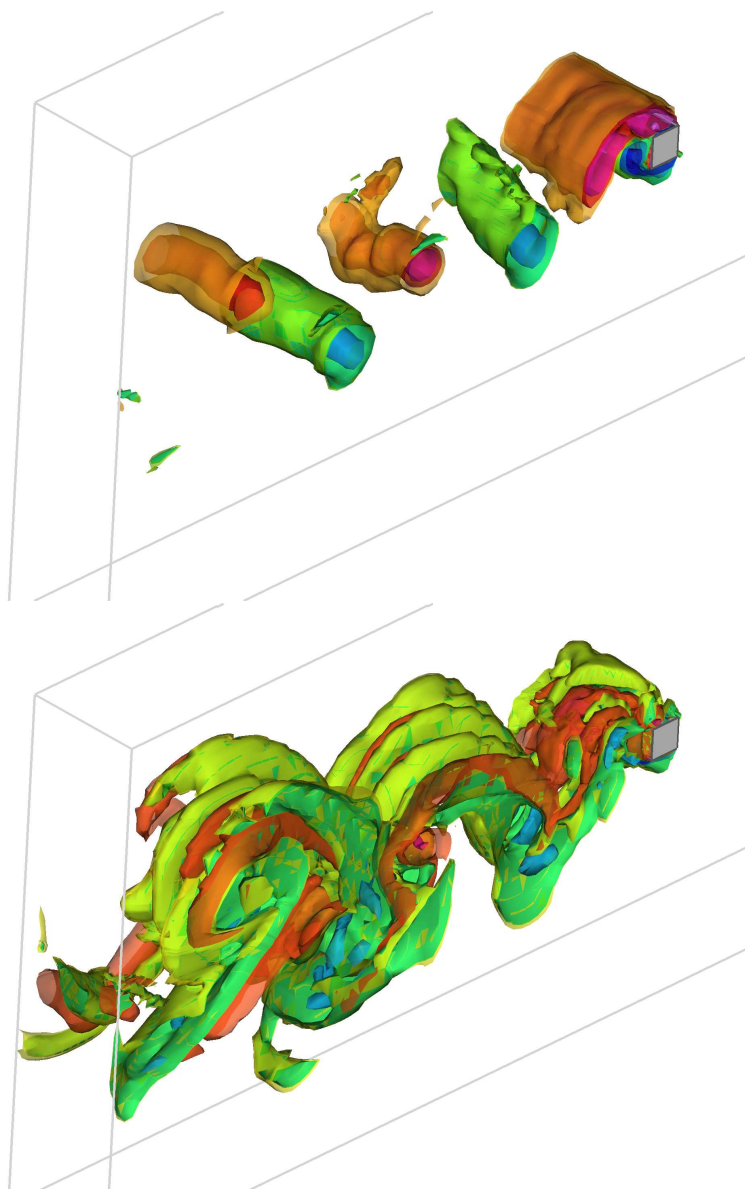


Figura 7.19: LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Isosuperficies de vorticidad transversal (ω_z , arriba) y longitudinal (ω_x , abajo) en $t * U/D = 90$.

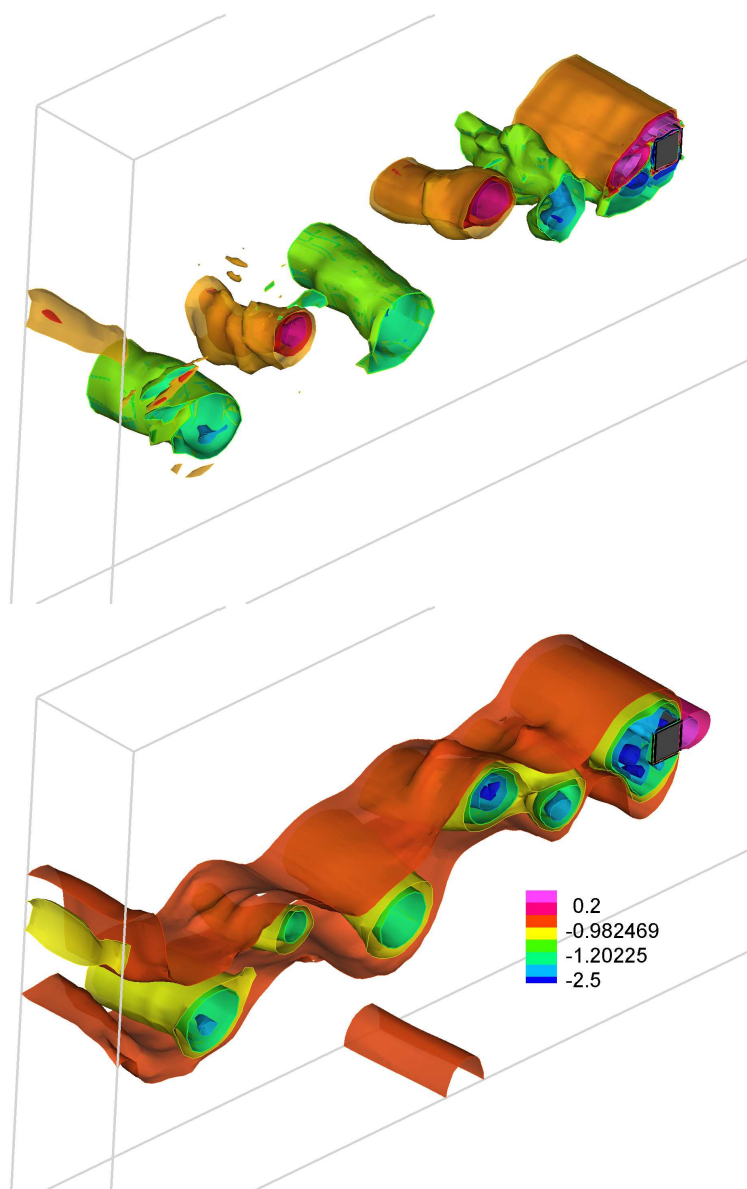


Figura 7.20: LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Isosuperficies de la vorticidad transversal (abajo) y del coeficiente de presión (arriba) en $t * U/D = 95.6$. Ejemplo de *paring*.

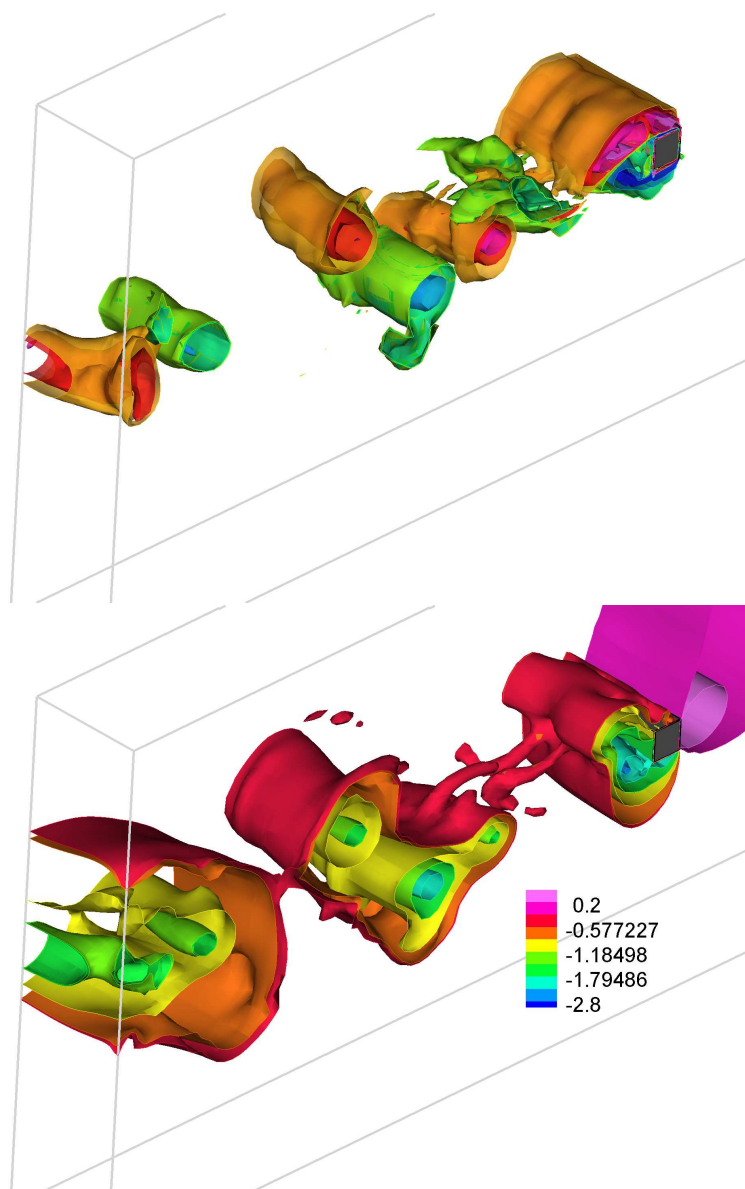


Figura 7.21: LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Isosuperficies del coeficiente de presión (arriba) y de la vorticidad transversal (abajo) en $t * U/D = 109.6$. Se observa la dislocación de un vórtice.

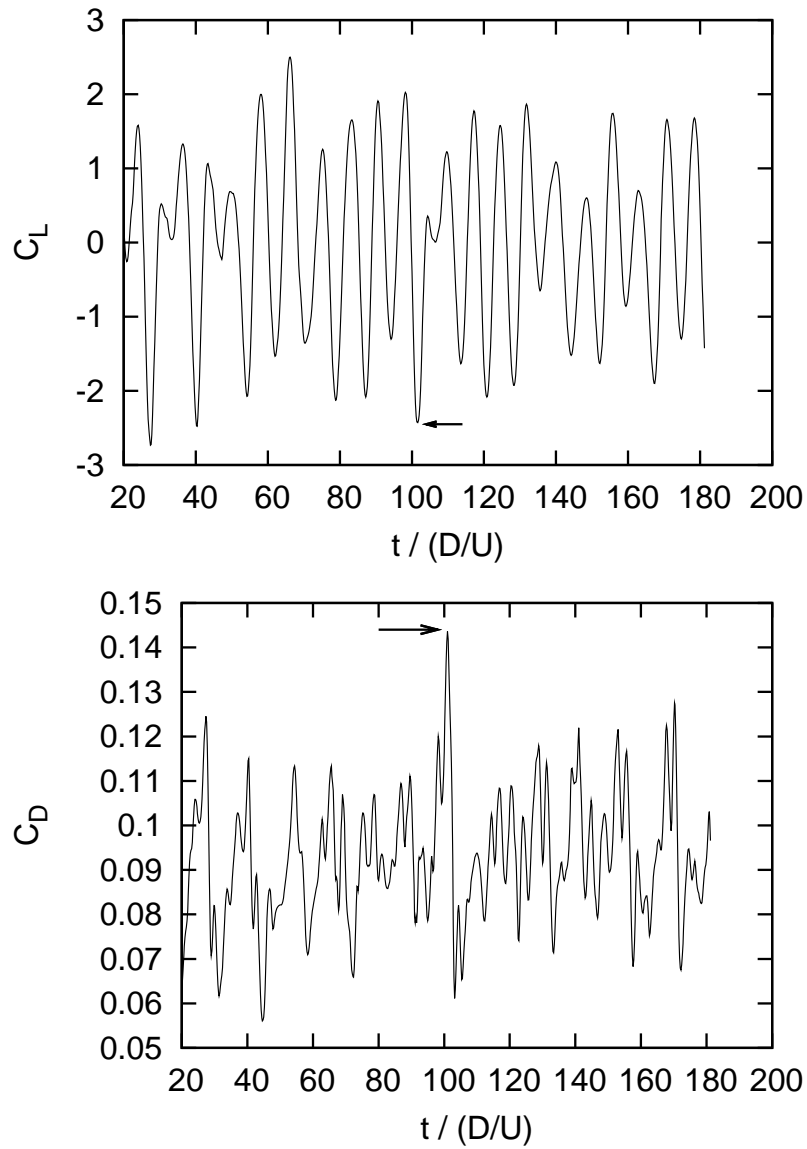


Figura 7.22: LES. Cilindro cuadrado ($Re = 22000$). Evolución de los coeficientes de sustentación (C_L , izquierda) y arrastre (C_D , derecha). Se señala el instante en el que ocurre la dislocación de uno de los vórtices primarios ω_z .

7.3.7. Comportamiento del algoritmo acoplado e implícito en LES

En los sub-apartados anteriores, se ha mostrado que el algoritmo propuesto en este trabajo de investigación es capaz de predecir con precisión el comportamiento de las grandes escalas de un flujo turbulento complejo. En esta sección se estudia la eficiencia de este algoritmo, que es acoplado e implícito, a diferencia de una mayoría de aplicaciones LES, que utilizan algoritmos explícitos (es decir, se avanza en el tiempo a partir de soluciones conocidas en tiempos anteriores). En los algoritmos para flujos incompresibles, la dificultad asociada a la ausencia de un término transitorio para la presión es superada mediante el método conocido como paso fraccionado [53], en el que una ecuación de Poisson se resuelve mediante una inversión directa (sin iteraciones) en cada paso temporal. En caso de resolver flujos compresibles, en cambio, la ecuación de continuidad presenta un término transitorio que permite, en general, avanzar en el tiempo la presión sin dificultad.

Los esquemas de tiempo explícito presentan la desventaja, respecto a los esquemas implícitos, de tener restringido el tamaño del paso de tiempo para asegurar su estabilidad numérica. Este límite viene dado por la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), que establece que el paso temporal no debe superar el tiempo de residencia en la celda: $CFL = \Delta t U / \Delta x \leq 1$. No obstante, los esquemas explícitos han sido utilizados históricamente en LES porque la propia técnica requiere una resolución temporal fina a fin de capturar las escalas temporales de las estructuras más pequeñas resueltas y el coste computacional de obtener la solución en cada nivel de tiempo es menor en los esquemas explícitos que en los implícitos. En la última década, sin embargo, esta tendencia está cambiando y se han publicado algunos trabajos que investigan la eficiencia de algoritmos acoplados e implícitos, con dos objetivos principales: por un lado, disminuir el coste computacional de LES y así hacer viable la simulación extensiva de problemas industriales y, por otro lado, desarrollar códigos de CFD capaces de resolver tanto flujos compresibles como incompresibles.

Como se indicó en el Apartado 7.3.1, los resultados mostrados han sido obtenidos mediante un esquema temporal implícito y un paso de tiempo de $\Delta t_{imp} = 0.025D/U$, lo suficientemente pequeño para capturar las escalas temporales de las estructuras más pequeñas resueltas en LES. En caso de resolver este problema mediante un esquema explícito, el tamaño del paso de tiempo estaría limitado por la condición de CFL:

$$CFL_{incomp} = \frac{\Delta t}{\min(\Delta x/|u|, \Delta y/|v|, \Delta z/|w|)} \quad . \quad (7.13)$$

Con la malla utilizada para resolver el problema en este trabajo y tomando los valores promediados en el tiempo de las componentes de la velocidad, el paso de tiempo máximo permitido en un esquema explícito es $\Delta t_{exp} = 7.2e - 3D/U$, es decir, 3.5 veces más pequeño que el utilizado en el esquema implícito. Por otra parte, en caso de utilizar un algoritmo para flujo compresible (necesario para reproducir las ondas acústicas en una cámara de combustión, por ejemplo), la velocidad del sonido interviene también en el cálculo del número de CFL:

$$CFL_{comp} = \frac{\Delta t}{\Delta x/|u+c|} = \frac{\Delta t}{\Delta x/(M+1)c} \quad . \quad (7.14)$$

Así, cuando el número de Mach es bajo ($M \ll 1$), la reducción en el número de CFL es del orden de $CFL_{comp}/CFL_{incomp} \approx M$. En la LES realizada en este trabajo el número de Mach a la entrada del canal es $M = 0.0033$ y el paso de tiempo máximo que se permitiría con un algoritmo para flujo compresible explícito (calculado a partir de las velocidades promedio en las celdas) sería $\Delta t_{comp|exp} = 3.44e - 5D/U$. Es decir, el número de pasos temporales necesarios para simular el mismo intervalo de tiempo aumentaría en un factor $\Delta t_{imp}/\Delta t_{comp|exp} = 726$.

La diferencia en el número de pasos no es directamente la ganancia efectiva puesto que es necesario tener en cuenta el número de iteraciones realizadas por el *solver* lineal del método implícito para alcanzar la convergencia de cada solución de la evolución transitoria (cuando se aumenta el paso temporal aumenta también, en general, el número de iteraciones). La eficiencia del algoritmo acoplado e implícito, respecto al segregado y explícito, se puede evaluar como [2]:

$$E = \frac{\Delta t_{imp}/n_{its}}{\Delta t_{comp|exp}} \quad , \quad (7.15)$$

donde Δt_{imp} y $\Delta t_{comp|exp}$ son, respectivamente, el paso de tiempo en el esquema implícito (elegido en función de la resolución requerida) y en el algoritmo explícito para flujo compresible (el máximo permitido por el análisis de estabilidad); n_{its} es el número de iteraciones interiores total que tiene que realizar el *solver* lineal.

La Figura 7.23 (izquierda) muestra la evolución de la norma del residuo de la ecuación de continuidad para la simulación LES presentada en esta memoria, una vez que el flujo ha alcanzado el estado periódico. Se ha establecido que la solución para un paso de tiempo dado ha convergido cuando la

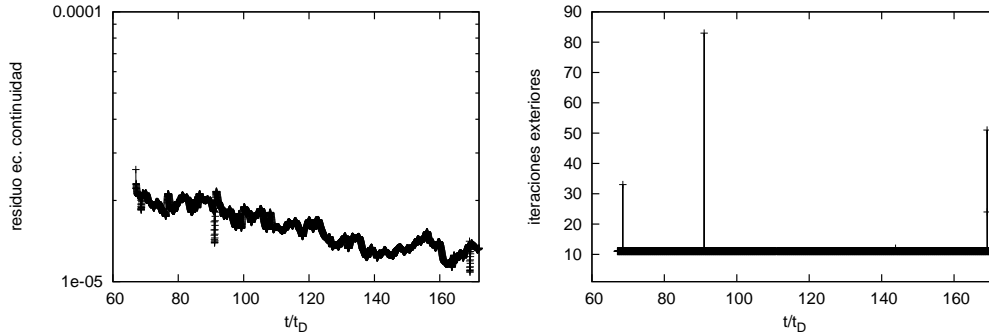


Figura 7.23: LES. Cilindro cuadrado ($Re=22000$). Evolución de la norma del residuo de la ecuación de continuidad (izquierda) y del número de iteraciones exteriores (derecha).

norma es menor que $1.0e - 4$ y este criterio se ha cumplido (sobradamente) en cada paso temporal. En la parte derecha de esta misma figura se observa que el número medio de iteraciones exteriores (debidas al procedimiento de sustitución sucesiva de linealización) por paso de tiempo es 10, justamente el mínimo impuesto para evitar estancamientos de la convergencia (ver Apartado 5.2). El hecho de que este número sea relativamente pequeño (teniendo en cuenta que es una malla fina, como exige LES) puede ser indicativo de que la aportación de los métodos multimalla a la mejora en la eficiencia de resolución de este tipo de flujos es escasa. Por otra parte, el *solver* GMRES necesita una media de 11 iteraciones (interiores) para resolver cada sistema lineal. Por tanto, se estima que la eficiencia ganada por el algoritmo propuesto en este trabajo es $E = (0.025/110)/3.44e - 5 = 6.6$.

Un estudio similar fue llevado a cabo por Alkishriwi *et al.* [2] y Lessani *et al.* [57] con el problema del flujo turbulento generado tras un cilindro (redondo) a un número de Reynolds más bajo ($Re = 3900$). A diferencia del presente algoritmo, ambos autores utilizaron el método de aproximación de Newton para linealizar las ecuaciones. La eficiencia del método implícito presentado por Alkishriwi *et al.*, 7 veces más rápido que un esquema explícito, es similar a la presentada en esta memoria, mientras que la de Lessani *et al.* es algo menor ($E = 4$). Conviene remarcar que esta eficiencia varía dependiendo del problema resuelto, la resolución temporal requerida, o el criterio de convergencia; por ejemplo, los primeros autores obtuvieron ganancias de hasta $E = 60$ en la resolución de un canal turbulento ($Re = 12448$).

Capítulo 8

Comportamiento del código paralelo

*Despacito y buena letra,
que el hacer las cosas bien
importa más que el hacerlas.*
- Antonio Machado

En los capítulos de resultados precedentes se ha mostrado la validez del algoritmo acoplado propuesto para resolver una amplia variedad de problemas; en este capítulo se pretende discutir varios aspectos sobre su implementación relacionados con la verificación, el uso de memoria y tiempo de CPU y la paralelización del código computacional desarrollado.

8.1. Verificación y validación del código computacional

Conforme crece la importancia de las simulaciones computacionales en el diseño y análisis del comportamiento de sistemas de ingeniería, los requerimientos de fiabilidad de los códigos de CFD son más exigentes. De hecho, esta exigencia es indispensable en escenarios donde la experimentación física no es posible (como, por ejemplo, pruebas de fallos en centrales nucleares). Como resultado, instituciones de prestigio en el campo de CFD han desarrollado protocolos para tratar de cuantificar la fiabilidad de las simulaciones computacionales. Aunque todavía no existe una guía universalmente aceptada (Overkampf y Trucano presentan un amplio resumen del estado actual del tema en un artículo reciente [79]), la credibilidad de un código de CFD depende de dos aspectos fundamentales: su verificación y su validación. La

validación trata de evaluar la idoneidad de los modelos físicos utilizados para la representación de los problemas mediante la comparación de los resultados computacionales con medidas experimentales. El proceso de verificación de un código, en cambio, no tiene en cuenta ‘el mundo real’ sino que estudia los errores computacionales y comprende la discretización de las ecuaciones en derivadas parciales, la resolución del sistema algebraico de ecuaciones, el criterio para establecer la convergencia del método iterativo y la precisión del cálculo [14].

Los capítulos precedentes (Capítulos 6 y 7) han mostrado fundamentalmente resultados relacionados con el proceso de validación del algoritmo acoplado propuesto. No obstante, la diferencia entre validación y verificación no es nítida y algunos de los estudios ya presentados tienen también relación con la verificación. Por ejemplo, las historias de convergencia de los problemas estacionarios mostradas presentaban una tendencia de reducción exponencial de la norma del residuo hacia la precisión de la máquina; en el flujo no estacionario generado tras un cilindro cuadrado se mostraba un criterio suficientemente restrictivo ($1.0e - 4$) para la convergencia de cada paso temporal, y ello tanto en el caso de flujo laminar como turbulento; el análisis del comportamiento de la Interpolación Compacta del Momento para flujos transitorios indicaban que el orden de los esquemas de discretización temporal es el esperado.

En este apartado se esbozan algunos otros tests de verificación del código llevados a cabo; concretamente, la correcta implementación de los términos discretizados de las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad y el error introducido por la discretización espacial.

8.1.1. Taylor-Green 3D

Para comprobar que la implementación de las ecuaciones discretizadas es correcta, el problema de decaimiento de vórtices de Taylor-Green es un caso de test apropiado puesto que se trata de un flujo con condiciones de contorno periódicas, que no requiere la implementación de términos excepcionales en las fronteras del dominio computacional para calcular las integrales de superficie (ver Apartado 5.3.6).

Con el propósito de verificar la discretización espacial en las tres direcciones del espacio, se ha resuelto el flujo en tres dimensiones y se han impuesto dos condiciones iniciales distintas: un campo inicial consistente en un vórtice de Taylor-Green en el plano $x - y$ y otro en el plano $z - y$. En el primer caso,

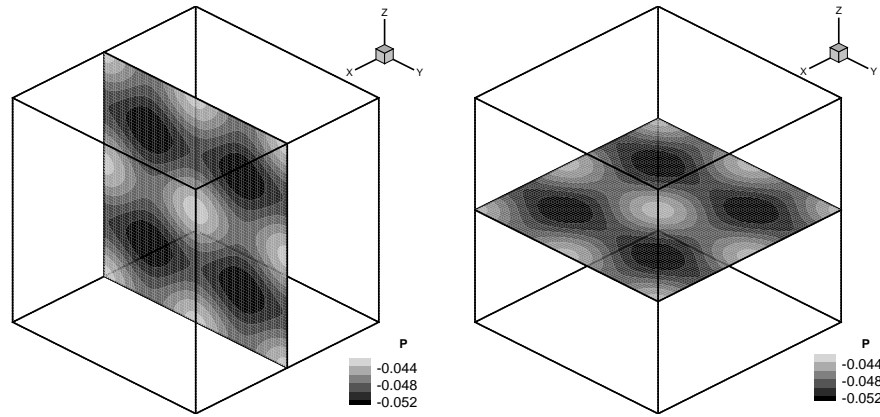


Figura 8.1: Verificación. Vórtices de Taylor-Green. Contornos de presión en dos planos equivalentes localizados en el punto medio del dominio. Casos con $w = 0$ (izquierda) y $u = 0$ (derecha) en el instante inicial.

las componentes de la velocidad y la presión en el instante inicial son:

$$\begin{aligned}
 u(x, y, z, t = 0) &= -\sin(x)\cos(y)\cos(z) & (8.1) \\
 v(x, y, z, t = 0) &= -\cos(x)\sin(y)\cos(z) \\
 w(x, y, z, t = 0) &= 0 \\
 p(x, y, z, t = 0) &= -(\cos(2x) + \cos(2y))(2 + \cos(2z))/16
 \end{aligned}$$

Para inicializar el segundo caso simplemente se intercambian u por w y x por z .

En la Figura 8.1 se presentan los contornos de presión en dos planos equivalentes en uno y otro caso, localizados en el punto medio del dominio computacional y en el instante de tiempo $t = 0.5$. Los contornos en el plano $y-z$ (izquierda) en el primer caso ($w = 0$ en el instante inicial) son los mismos que en el plano $y-x$ (derecha) en el segundo caso ($u = 0$ en el instante inicial), lo cual indica que la discretización está adecuadamente implementada.

Tabla 8.1: Verificación. Cavidad cuadrada con pared móvil. Valores de velocidad y presión obtenidos en tres mallas sucesivamente refinadas.

Tamaño de celda normalizado	u	v	$p - p_0$
4 (121x121)	$-6.1596e^{-2}$	$2.5864e^{-2}$	$-8.8134e^{-2}$
2 (241x241)	$-6.1947e^{-2}$	$2.5813e^{-2}$	$-8.9874e^{-2}$
1 (481x481)	$-6.2030e^{-2}$	$2.5802e^{-2}$	$-9.0325e^{-2}$

8.1.2. Precisión de la discretización espacial

Una vez depurados los errores en la programación del código, se puede proceder a cuantificar el orden de precisión de los esquemas de discretización de las ecuaciones. En este apartado se calcula la precisión espacial, que teóricamente es de orden 2 (la precisión de los esquemas temporales fue estudiada en el Apartado 6.1.2) mediante el procedimiento de refinamiento sucesivo de la malla de discretización.

El problema test elegido es el flujo en el interior de una cavidad cuadrada con una pared móvil a un número de Reynolds moderado ($Re = 1000$). Este problema se ha resuelto en tres mallas uniformes diferentes, que tienen un número de celdas de 121×121 , 241×241 y 481×481 y siendo por tanto aproximadamente constante la relación de paso entre celdas de una malla a la siguiente ($r \cong 2$). Se ha aplicado el esquema convectivo CDS y se ha establecido un criterio de convergencia restrictivo para la norma del vector residuo y del vector de corrección $C_R, C_\Delta \phi = 1.0e^{-10}$ (ver Ecuación (5.3)), con el fin de que los errores debidos al método iterativo no sean significativos. Las variables elegidas para comparar los resultados sobre cada malla son la velocidad horizontal u , la velocidad vertical v y la presión $p - p_0$ en la celda central de la cavidad ($x/L = y/L = 0.5$, lo que justifica el número impar de nodos en cada dirección). La presión de referencia p_0 se toma en el punto medio de la pared vertical oeste: $p_0 = p(x/L = 0, y/L = 0.5)$. Los valores obtenidos para las tres mallas aparecen en la Tabla 8.1.

A partir de dichos datos se calcula el valor de unos parámetros de interés en la determinación del error de discretización espacial (Tabla 8.2): el orden de la aproximación (q), el valor de la variable extrapolada a una malla con tamaño de celda nulo (ϕ_e) y el Índice de Convergencia de la Malla (GCI). Para obtener estos parámetros se ha seguido el procedimiento recomendado por la revista internacional *Journal of Fluids Engineering*, que a su vez se basa en el conocido método de extrapolación de Richardson [29]. Las mallas empleadas son suficientemente finas para que el error de la solución e pueda

8. Comportamiento del código paralelo

Tabla 8.2: Verificación. Cavidad con pared móvil. Parámetros de la precisión espacial obtenidos siguiendo el procedimiento de extrapolación de Richardson. También se presentan, para su comparación, los resultados de alta precisión de Botella y Peyret [11].

	u	v	$p - p_0$
q	2.05	2.21	1.95
$GCI(\%)$	$3.1e^{-3}$	$3.8e^{-4}$	0.02
ϕ_e	$-6.2056e^{-2}$	$2.5799e^{-2}$	$-9.038e^{-2}$
ϕ_{Bot} [11]	$-6.2056e^{-2}$	$2.5799e^{-2}$	$-9.047e^{-2}$

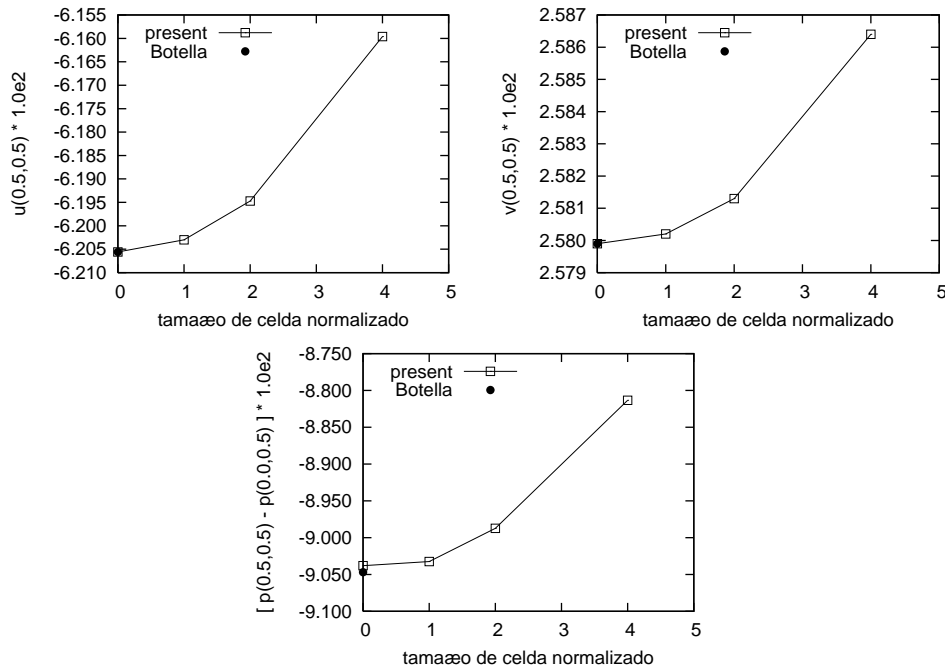


Figura 8.2: Verificación. Cavidad con pared móvil, $Re = 1000$. Valor de las variables de referencia en función del tamaño de celda normalizado.

expresarse de la siguiente manera:

$$e = \phi_n - \phi_{exact} = Ch_n^q \quad , \quad (8.2)$$

done ϕ_n es el valor de la variable para la malla n , ϕ_{exact} es la solución exacta, h_n representa el tamaño de celda y q es el orden de aproximación obtenido. Usando tres mallas diferentes con la misma relación de tamaño de celda (en este caso $r \cong 2$), el orden de la aproximación espacial q se calcula así:

$$q = \frac{\ln((\phi_4 - \phi_2)/(\phi_2 - \phi_1))}{\ln(r)} \quad , \quad (8.3)$$

A partir del valor de q y de la solución en las dos mallas más finas, se puede extrapolar un valor para la solución exacta (que corresponde al límite de tamaño de celda nulo):

$$\phi_e \approx \phi_{h=0} = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{r^q - 1} \quad . \quad (8.4)$$

Por último, el índice de la convergencia de la malla (GCI) es un parámetro que proporciona información acerca del nivel de resolución apropiado e indica el porcentaje en que se aleja la solución numérica en una malla de su valor asintótico. EL GCI correspondiente a la solución más precisa ϕ_1 se calcula como:

$$GCI = F_s \frac{|\phi_1 - \phi_2|}{r^q - 1} \quad , \quad (8.5)$$

donde F_s es un factor de seguridad que se ha tomado 1.25 (valor usual cuando se refina la malla en tres niveles).

En la Tabla 8.2 se observa que el orden de aproximación menos preciso obtenido ($q = 1.94$), correspondiente a la presión, está muy cercano al orden teórico de la discretización espacial ($q = 2$). A partir del parámetro GCI y del valor extrapolado p_e se puede concluir que el valor estimado para la presión en el punto medio de la cavidad es $p_e = 0.09038$ con una banda de error de $\pm 0.020\%$. Es decir, $p_e = 0.09038 \pm 1.82e - 5$. Respecto a las componentes de la velocidad, el orden de aproximación calculado es incluso mayor que el teóricamente esperado y el índice de convergencia de la malla más fina es muy pequeño. En la misma tabla se presenta también la solución de alta precisión obtenida por Botella y Peyret usando un método espectral para resolver las ecuaciones [11]. Los valores de estos autores coinciden con los obtenidos aquí para las componentes de velocidad. La diferencia en la presión puede deberse a la suposición de gradiente nulo en la pared aplicada en este trabajo

Por completitud, en la Figura 8.2 se muestra la tendencia monótona de la solución a su valor asintótico conforme se refina la malla. Los resultados

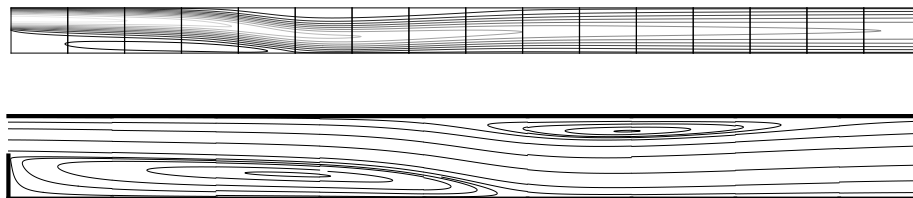


Figura 8.3: Resolución del flujo tras un escalón abrupto en $np = 16$ procesadores. Descomposición de la malla completa (arriba) y detallada de las zonas de recirculación (abajo).

mostrados en este apartado demuestran la capacidad del código para obtener soluciones independientes de la malla y que la aproximación espacial es de segundo orden (al menos para el caso test elegido).

8.2. Comportamiento de la paralelización del código

La capacidad de un código de CFD para resolver problemas computacionalmente exigentes (en el sentido de discretización espacial y/o temporal fina) depende de sus propiedades de escalabilidad. Dos aspectos intervienen en este concepto: la escalabilidad numérica y la paralela. La primera hace referencia al aumento del tiempo computacional necesario para obtener una solución conforme el tamaño del problema numérico aumenta, y la segunda se refiere a la reducción del coste computacional (por procesador) conforme crece el número de procesadores usados para la ejecución.

La escalabilidad numérica del algoritmo acoplado propuesto fue tratada en un capítulo precedente (Apartado 6.2), mediante una tanda de ejecuciones secuenciales variando el número de nodos de la malla, y se obtuvo una dependencia del tiempo de cpu aceptable, del orden de $n^{1.5}$ (donde n es el número de nodos de la malla). El objetivo de este apartado es estudiar el comportamiento del código desarrollado cuando se ejecuta un problema en paralelo sobre varias máquinas. Como se describió en el Apartado 5.4, la estrategia de paralelización llevada a cabo consiste en la descomposición del dominio y su reparto (incluyendo los nodos pertenecientes al halo) entre los procesadores disponibles. En el caso ideal de que la carga de trabajo esté repartida equitativamente y que el tiempo de comunicación entre los procesadores que comparten halo sea despreciable, el tiempo necesario para alcanzar la solución multiplicado por el número de procesadores es constante.

8. Comportamiento del código paralelo

Tabla 8.3: Comportamiento paralelo del código desarrollado. Tiempos de ejecución en la resolución del problema del escalón abrupto con una malla de 128000 celdas.

np	T_{np} (s)	n its exteriores	n its interiores	E_{np} (μs)	RE_{np} (μs)
1	4.231e4	24327	276119	1.197	1.20
2	2.236e4	24329	276158	6.320e-1	1.26
4	1.120e4	24334	276202	3.174e-1	1.27
8	5.783e3	24314	275978	1.632e-1	1.30
12	4.010e3	24327	276126	1.132e-1	1.36
16	3.092e3	24317	276037	8.758e-2	1.40

Tabla 8.4: Comportamiento paralelo del código desarrollado. Tiempos de ejecución en la resolución del problema del escalón abrupto con una malla de 512000 celdas.

np	time T_{np} (s)	n its exteriores	n its interiores	E_{np} (μs)	RE_{np} (μs)
2	1.264e5	6108	565546	4.365e-1	8.73e-1
8	3.090e4	6108	565493	1.067e-1	8.54e-1
16	1.491e4	6108	565575	5.149e-2	8.23e-1

El caso elegido para evaluar el comportamiento paralelo del código es el flujo bidimensional y laminar generado en un canal rectangular tras un escalón abrupto (ver Figura 8.3). En la entrada del canal se impone el perfil de velocidad parabólico correspondiente al flujo completamente desarrollado. El número de Reynolds referido a la velocidad media de entrada y a la altura del escalón D es $Re = 400$. Las dimensiones del canal son $40D \times 2D$. Se ha simulado el problema estacionario partiendo de un campo inicial nulo (tanto para las dos componentes de la velocidad como para la presión) y se ha usado el esquema convectivo CDS. El criterio para considerar la solución convergida ha sido establecido en $C_R, C_{\Delta\phi} < 1.0e - 6$ para las tres variables. Se ha estudiado la escalabilidad para dos mallas diferentes: 128000 (1600×80) y 512000 (3200×160) celdas cuadradas. El falso paso temporal fijado ha sido $\Delta\tau = 1\Delta x = 1D/80$ para el caso con malla gruesa y $\Delta\tau = 1\Delta x = 10D/160$ para la malla fina.

Cada caso es ejecutado varias veces sobre un número de procesadores diferente, dividiendo la malla en np porciones iguales (en la Figura 8.3 se ilustra la partición para el caso $np = 16$). Además, es necesario añadir el halo de las fronteras interiores al dominio de la sub-malla local (que en este ejemplo tiene una anchura de, teniendo en cuenta la interpolación del momento, 2 celdas y contiene 80×2 celdas para la malla gruesa y 160×2

8. Comportamiento del código paralelo

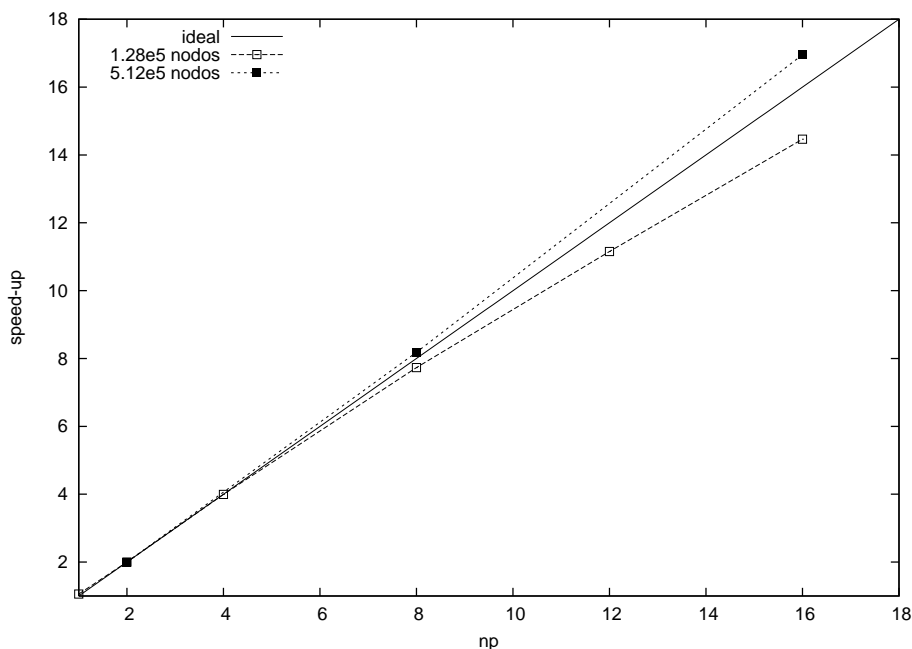


Figura 8.4: Comportamiento del código paralelo. Escalón abrupto. *Speed-up* con una malla de 128000 y 512000 celdas.

para la fina). Las ejecuciones se han realizado en un *cluster* tipo *Beowulf*, de memoria distribuida, del Área de Mecánica de Fluidos (Boadicea05). Está constituido por máquinas con procesadores duales AMD Athlon de 64 bits a 2200 MHz y 3.0 GB de memoria RAM. La comunicación entre procesadores se establece a través de tarjetas de red a 1Gbps.

El tiempo de ejecución (de reloj) necesario para resolver estos casos (T_{np}) sobre np procesadores aparece en las Tablas 8.3 y 8.4. Además, se presentan también el número total de iteraciones exteriores e interiores necesarias para alcanzar la convergencia. Se observa que son prácticamente independientes del número de procesadores, lo que indica una buena escalabilidad del propio algoritmo numérico (y, en concreto, del *solver* lineal).

La Figura 8.4 presenta el *speed-up* obtenido en función del número de procesadores np . Para estos dos problemas de tamaño fijo, el *speed-up* se define como $s = 2T_2/(npT_{np})$ y en una situación ideal es una recta con pendiente 1. En el caso de emplear una malla con 128000 celdas, el código desarrollado presenta un comportamiento prácticamente ideal hasta $np = 8$, mientras que para $np = 16$ empieza a ser significativo el tiempo dedicado a la comunicación entre procesadores. Como se podía esperar, la escalabilidad del caso con malla fina es mejor que con malla gruesa, puesto que disminuye la proporción de celdas en el halo, y por tanto, el porcentaje de tiempo de

CPU dedicado a la comunicación entre procesadores. Quizá sorprenda que la pendiente del *speed-up* para el caso con 512000 celdas sea incluso mayor que 1 (super-linealidad). La super-linealidad puede ser debida a los efectos de la memoria tipo *cache* (ver, por ejemplo, [46]). Este tipo de memoria es una almacén temporal de datos, con menor capacidad que la memoria del sistema (RAM), pero a la que el procesador accede de una forma mucho más rápida. Puesto que el tamaño del problema es dividido y distribuido entre los procesadores del *cluster*, es posible que los datos no encajen en un tipo de memoria de acceso rápida en una o dos máquinas, pero sí cuando se dispone de más máquinas.

Otra medida de la eficiencia de un código paralelo es el cálculo del tiempo ‘virtual’ necesario para realizar una iteración en una malla de un nodo y sobre np procesadores: $E_{np} = T_{np}/(n_{celdas} * n_{its.int})$. En la Tabla 8.3 se muestra este valor y el de la eficiencia reducida ($RE_{np} = E_{np} * np$), una cantidad constante en la hipótesis ideal de *speed-up* con pendiente uno. El valor medio obtenido con 128000 celdas es $\bar{RE} = 1.30\mu s$ y la desviación máxima ($|RE_{16} - \bar{RE}|/\bar{RE}$) es de un 7.7%. En el caso de 512000 celdas, la eficiencia reducida media es $8.50e - 1$ y la desviación máxima ocurre para $np = 16$ y es un 3.2%.

8.3. Optimización: uso de CPU y memoria

En el proceso de desarrollo de un código de CFD es recomendable hacer un análisis de los usos de memoria y tiempo de CPU de las distintas subrutinas implementadas con el objetivo de optimizar la eficiencia del código. Se debe alcanzar un compromiso entre la sencillez de la programación (lo que repercute habitualmente en la extensibilidad y legibilidad del código) y la reducción del coste computacional, siendo en la mayoría de los casos suficiente con detectar y tratar de mejorar los ‘cuellos de botella’. Es decir, las subrutinas a las que se dedica el mayor porcentaje del tiempo de ejecución.

La distribución de los tiempos de ejecución se obtiene mediante un procedimiento conocido como *profiling*, para la que existen una variedad de herramientas informáticas disponibles. En este trabajo se ha usado la combinación de las herramientas Valgrind [77] y KCacheGrind [113] para obtener un diagrama visual de la distribución del tiempo en las subrutinas del programa principal del código.

Dichas herramientas se han aplicado a la ejecución del caso del flujo en un canal tras un escalón abrupto (descrito en el Apartado 8.2) en un ordenador personal AMD Duron a 1.3GHz y con 512M de memoria RAM. La malla tiene 128000 celdas cuadradas y se toma como solución inicial un campo calculado anteriormente con residuo $C_R < 1.0e - 6$ para todas las variables.

A partir de esta solución, se reinicia la ejecución con la herramienta Valgrind y se calculan 12 nuevas iteraciones exteriores, resultando el número total de iteraciones interiores 224.

En el diagrama de la Figura 8.5 aparece el porcentaje de tiempo de CPU dedicado a las subrutinas del programa principal. Para mayor claridad del gráfico, se han descartado las funciones con un consumo menor del 3% y se ha limitado también la máxima profundidad de llamadas encadenadas a subrutinas (empezando desde el programa principal) a 5. En la figura se observa que la mayor parte del tiempo de cálculo (un 60%) se emplea en la resolución del sistema de ecuaciones algebraico (en la función KSPSolve del programa PETSc), aun en este caso donde el número de iteraciones interiores medio es relativamente pequeño (18). Este valor está dentro del rango deseable en un código de CFD, que es entre un 50% y un 90% (notas para un curso impartido por Jasak, desarrollador del código de CFD abierto OpenFoam [49], en el Área de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Zaragoza [32]). Por otra parte, más de un 15% de tiempo de cálculo se emplea en subrutinas encargadas de insertar los coeficientes (ya calculados) en la matriz del sistema algebraico (a través de la subrutina, que es también de PETSc, MatSetValues). Este tiempo depende en gran medida del número de llamadas a MatSetValues, y podría ser reducido programando la inserción de coeficientes de una manera menos compartimentada; actualmente se llena sólo una fila en cada llamada a MatSetValues con el objetivo de hacer sencilla su programación.

Aparte de controlar los tiempos de CPU del código, también es importante conocer la cantidad de memoria RAM que necesita para ejecutar un caso. La herramienta Valgrind proporciona dos tipos de información sobre la memoria. Por un lado, se puede hacer una tarea de depurado de errores (por ejemplo, comprobar que no se intenta acceder a ninguna localización que no haya sido previamente asignada). Por otro lado, es una ayuda para saber la cantidad total de memoria que usa el programa, y en qué subrutinas ha sido asignada. Ambas opciones han sido aplicadas en el código desarrollado. Así, se ha comprobado que no hay errores en la asignación de memoria y se ha obtenido el gráfico presentado en la Figura 8.6 sobre su uso. En dicha figura aparece la evolución del uso de memoria durante la ejecución del caso. En los instantes iniciales se procede a asignar memoria hasta que alcanza un valor aproximadamente constante, que se libera justo antes de terminar el programa. En este caso, el máximo uso de memoria RAM que debe soportar el procesador es aproximadamente 200M bytes (1.56 Kb por celda), de los que aproximadamente 160M bytes (un 80%) corresponden a la matriz y a los vectores del sistema acoplado y a la creación de vectores para resolver el sistema lineal mediante el método GMRES(15). Entre las subrutinas específicamente

8. Comportamiento del código paralelo

programadas para desarrollar el código de CFD, tienen un uso de memoria destacado las subrutinas llamadas CreateProp (10M, un 5%), que son las que asignan memoria para almacenar términos de la matriz de coeficientes que se repiten como, por ejemplo, el término convectivo o la corrección de la interpolación del momento. En la programación del algoritmo, se ha dado prioridad al ahorro en tiempo de cálculo sobre el ahorro en memoria.

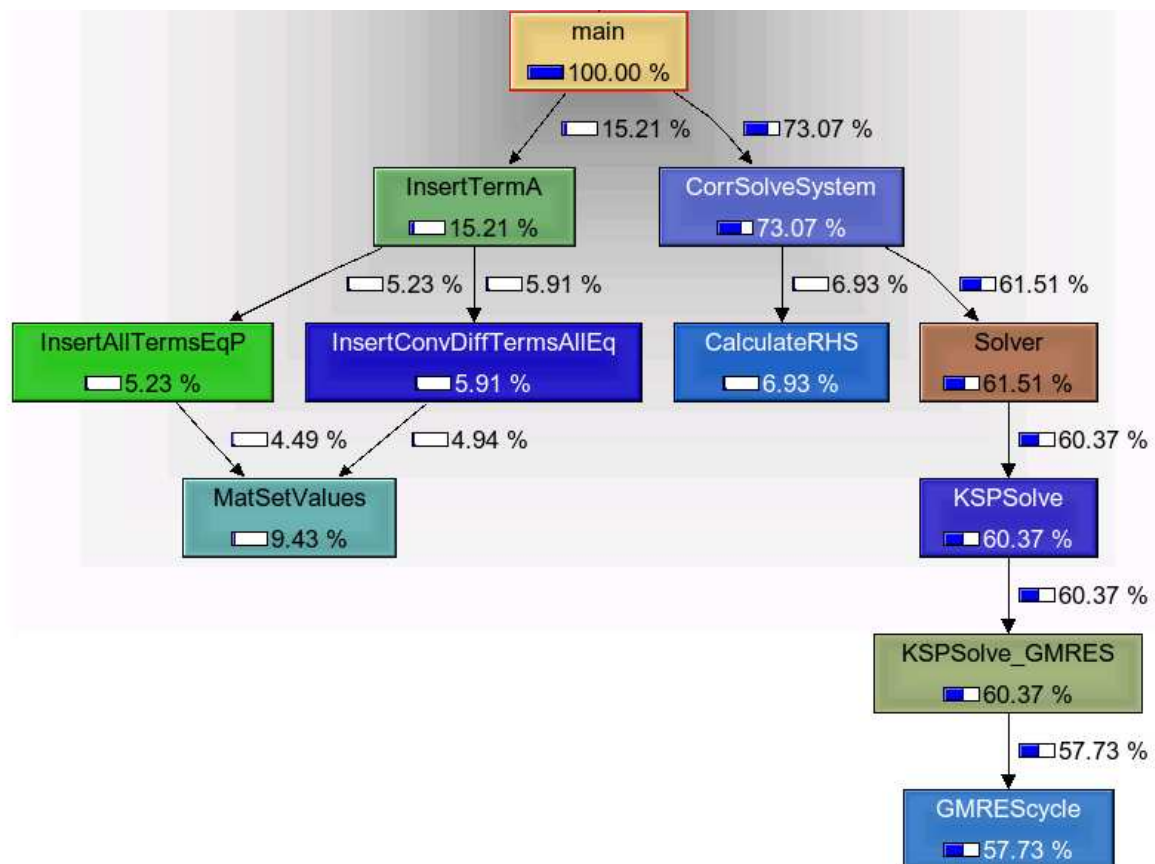


Figura 8.5: Distribución del tiempo de ejecución en el programa principal. Caso del flujo en un canal tras un escalón abrupto (128000 celdas y 224 iteraciones interiores).

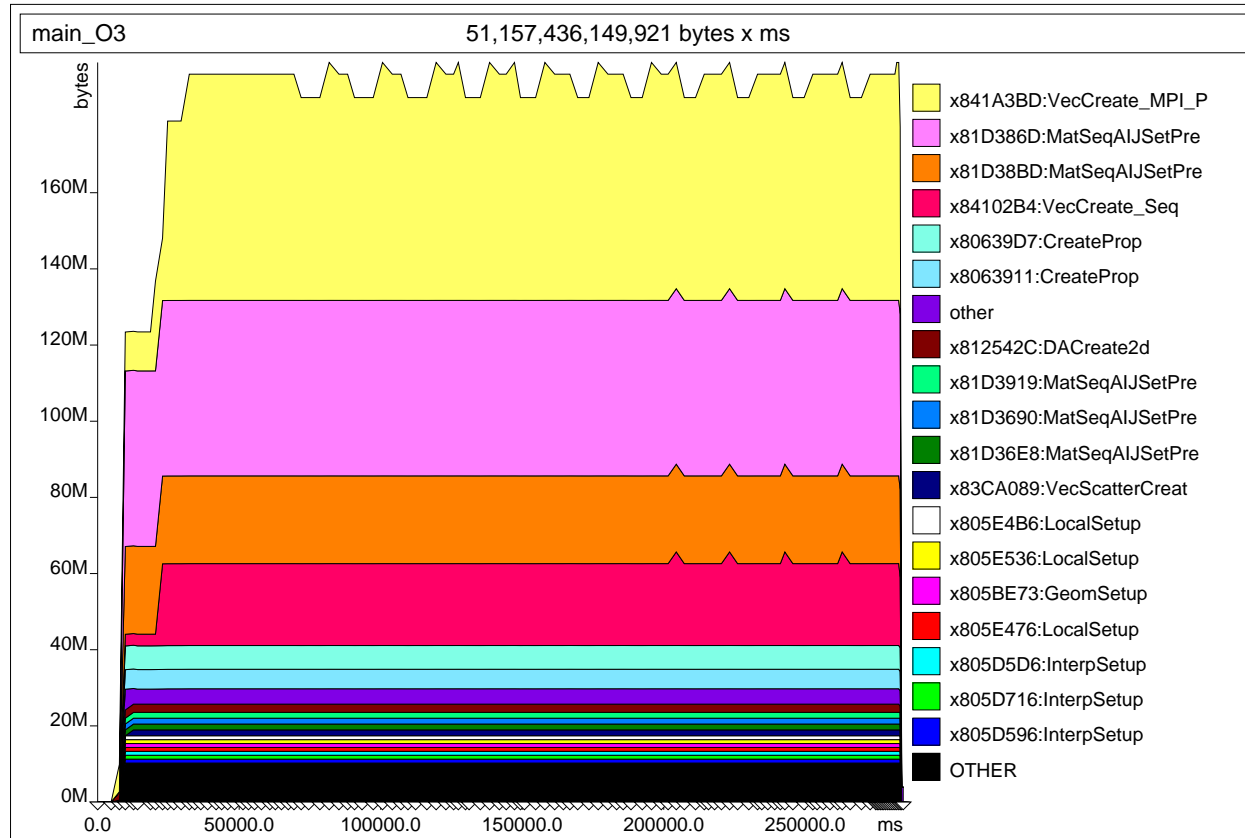


Figura 8.6: Evolución de la memoria usada en una ejecución. Caso del flujo en un canal tras un escalón abrupto (128000 celdas y 224 iteraciones interiores).

Capítulo 9

Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo se ha presentado un nuevo algoritmo, implícito y acoplado, para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Se ha utilizado el método de discretización de volúmenes finitos y una disposición colocalizada de las incógnitas en la malla. Con el fin de solventar el problema tradicional de desacoplamiento velocidad-presión que se encuentra en este tipo de mallas, se ha propuesto una formulación mejorada, compacta y consistente, de la Interpolación del Momento originalmente propuesta por Rhie y Chow (OMI) [92].

Sobre la Interpolación Compacta del Momento

Se ha descrito en detalle el desarrollo de la nueva estrategia, que tiene en cuenta (a diferencia de la OMI) la aparición de términos de relajación y transitorios en las ecuaciones de cantidad de movimiento discretizadas. Respecto a la relajación, se consideran las dos formulaciones utilizadas habitualmente: lineal e inercial (o de falso paso temporal). Se ha aplicado el nuevo procedimiento en tres esquemas de integración temporal: método Euler de primer orden y dos esquemas multi-punto de segundo orden (la aproximación Euler de tres niveles y el método Adams-Moulton de segundo orden o Crank-Nicholson); el procedimiento puede acomodarse a aproximaciones de mayor orden.

Se ha demostrado mediante ‘experimentos numéricos’ y cálculos analíticos que la propuesta de Interpolación Compacta del Momento (CMI) proporciona el comportamiento deseado desde diversos puntos de vista. El principal propósito de una implementación MI es evitar oscilaciones de presión irreales en el campo solución; se consigue aquí de manera efectiva para pasos de tiempo (reales o falsos) grandes y, a diferencia de la OMI, también para pasos pequeños. Además, puesto que cuando se alcanza la solución convergida

y estacionaria se recupera la formulación original, los resultados finales son independientes del factor de relajación y del paso de tiempo utilizado en la discretización. Asimismo, se ha evaluado el orden de aproximación de la integración temporal, obteniéndose que la precisión no se ve afectada negativamente para ninguno de los tres esquemas considerados en este trabajo.

Finalmente, es interesante destacar del modelo CMI propuesto su sencilla implementación en el código, ya que puede expresarse la velocidad en la cara como un término de interpolación lineal más una corrección. Esta corrección comprende a su vez la suma de varios términos: el primero involucra la corrección OMI y el resto representa la propia corrección CMI evaluada en iteraciones o pasos de tiempo anteriores. Cuando se resuelven flujos no estacionarios o se aplica relajación, es necesario interpolar a las caras únicamente un término adicional (respecto a la OMI), y por tanto el nuevo método no es computacionalmente caro.

Sobre el algoritmo acoplado e implícito

El algoritmo acoplado presentado en este trabajo se basa en la deducción de una ecuación de Poisson para la presión a partir de la ecuación de continuidad, utilizando para las velocidades en las caras las expresiones corregidas según la CMI. Se ha propuesto una implementación parcialmente implícita de esta ecuación, con el objetivo de conseguir el acoplamiento velocidad-presión, esencial para resolver las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento de una manera simultánea en un flujo incompresible, sin aumentar el tamaño de la molécula computacional. Este modelo implica la aparición de un término implícito en la diagonal principal de la ecuación de continuidad que incluye la inversa del sumatorio sobre las caras de la celda de coeficientes convectivos y difusivos. Por otra parte, la implementación diferida de los esquemas convectivos de alto orden para las variables transportadas hace que dicho término sea siempre positivo, pudiéndose interpretar como un parámetro de preconditionamiento local (análogo a la definición de una velocidad pseudo-acústica en el modelo de compresibilidad artificial), automáticamente evaluado, que no requiere especificar *a priori* una velocidad mínima en las regiones de estancamiento.

El sistema algebraico se linealiza mediante el procedimiento de sustitución sucesiva (Picard), y la convergencia del *solver* (GMRES con el preconditionador Jacobi) se apoya en la dominancia de la diagonal principal de la matriz de coeficientes. A fin de asegurar ésta, además de utilizar una implementación diferida de los esquemas convectivos de alto orden (sólo se introduce la parte *upwind* en la matriz), se aplica relajación inercial para compensar los coeficientes adicionales, fuera de la diagonal principal, que provienen

de los términos de acoplamiento. Respecto a la ecuación de continuidad, esta relajación inercial puede interpretarse, de nuevo, como un término de compresibilidad artificial relacionando esta vez el parámetro libre con una velocidad global de referencia.

La precisión, eficiencia y escalabilidad del método propuesto han sido comprobadas mediante la resolución del flujo generado en una cavidad con pared móvil ($Re = 1000$). La comparación de los resultados obtenidos con soluciones de referencia de alta precisión ha mostrado un acuerdo excelente de los campos de velocidad y presión; en este caso, además, no aparecen oscilaciones en las cercanías de las esquinas, donde los gradientes de presión son altos. Se ha estudiado la velocidad de convergencia para un amplio rango de falsos pasos temporales, encontrándose, como se esperaba, que el número de iteraciones exteriores decrece conforme aumenta la relajación, al mismo tiempo que aumenta el número de iteraciones interiores del *solver* lineal, controlado dinámicamente. De esta forma, el tiempo de CPU requerido para resolver el problema no varía demasiado entre caso y caso: la relación máxima encontrada en el tiempo de CPU es aproximadamente 0.5, correspondiente a un ratio máximo de falsos pasos temporales de 120. Se ha analizado asimismo el mapa del coeficiente total de preconditionamiento introducido en la ecuación de continuidad encontrándose que, en un rango similar de falsos pasos temporales, el mayor factor de reducción es 4. De esta forma, se ha demostrado que la robustez del método no se ve afectada de una manera significativa por la elección del factor de relajación, ya que su efecto es compensado en cierta medida por el término implícito proveniente de la implementación de la CMI, mitigándose así la variación del coeficiente total de preconditionamiento.

Por otro lado, se ha estudiado la escalabilidad del algoritmo evaluando el tiempo de CPU requerido para alcanzar la convergencia utilizando mallas de diferentes números de celdas y relación de aspecto (también se han utilizado diversos factores de relajación), ajustándose todos los casos a una función potencial de crecimiento del tiempo de CPU con el número de celdas con exponente 1.5. Este escalado es admisible, sobre todo teniendo en cuenta que no se ha aplicado la técnica multimalla para acelerar la convergencia.

El algoritmo acoplado ha resultado también robusto y preciso en la resolución de flujos incompresibles altamente dominados por la convección (se ha encontrado una solución estacionaria para la cavidad con pared móvil a $Re = 10000$) y flujos con grandes variaciones de temperatura (convección natural en una cavidad a $Ra = 1.0e6$ y $Ra = 1.0e7$, con $\epsilon = 0.6$), así como en problemas descritos en coordenadas cilíndrico-polares. Respecto a flujos no estacionarios, se ha utilizado un esquema implícito para el término transitorio; se ha comprobado el comportamiento de este algoritmo, completamente

implícito por tanto, mediante la resolución del flujo laminar, bidimensional, tras un cilindro cuadrado, obteniéndose buenos resultados en cuanto a eficiencia y precisión. De esta forma, se ha ilustrado la competitividad potencial del procedimiento de Picard respecto a los modelos tipo Newton, mayoritariamente utilizados por la comunidad científica para la linealización en algoritmos acoplados.

Sobre la aplicación del algoritmo a LES

Se ha aplicado el método acoplado e implícito al exigente problema computacional de simular mediante LES el desprendimiento de vórtices turbulentos tras un cilindro cuadrado a un número de Reynolds moderadamente alto ($Re = 21400$). Partiendo de un campo inicial bidimensional, se han podido reproducir los mecanismos de transición hacia el carácter tridimensional de la turbulencia descritos experimentalmente; en concreto, la aparición de inestabilidades en los vórtices transversales, y la generación de vórtices longitudinales en el seno de dichas deformaciones. Una vez alcanzado el campo estadísticamente estacionario, se han promediado diversas variables en el tiempo durante un número suficiente de ciclos, encontrándose que los parámetros globales de los flujos obtenidos en este trabajo comparan de manera aceptable con resultados experimentales y computacionales previos. El acuerdo con los resultados experimentales de Lyn *et al.* [62] es especialmente bueno en la región de la estela cercana al obstáculo, tanto para los momentos de primer orden de las variables estadísticas (componentes de velocidad medias) como en lo relativo a sus segundos momentos (esfuerzo viscoso turbulento). En cuanto a la eficiencia, se ha estimado la ganancia que supone el esquema temporal implícito (escasamente utilizado en LES) respecto a un esquema explícito en un factor de aproximadamente 7 para este problema.

Todos los resultados mostrados se han obtenido con un código de CFD paralelo desarrollado en el curso de este trabajo, haciendo uso de la librería PETSc. Se ha evaluado el comportamiento computacional de este código, verificándose el orden de discretización espacial (segundo orden), la escalabilidad paralela (*speedup* incluso mayor que 1 en problemas suficientemente grandes) y el uso de memoria y CPU por las diferentes subrutinas (el *solver* lineal supone más de un 60% del gasto computacional).

Trabajo futuro

Una vez demostrada la capacidad del algoritmo para resolver de manera precisa y robusta una amplia gama de flujos, se pretende llevar a cabo una comparación de la eficiencia de este método, acoplado e implícito, con otros

tipos de algoritmo referenciados en la literatura. Dentro de los métodos basados en la presión, es interesante conocer la eficiencia relativa de los algoritmos tradicionales, totalmente segregados (del tipo SIMPLE), y la de los escasos métodos completamente acoplados, que introducen unas incógnitas adicionales en el sistema, *i.e.* las pseudo-velocidades (como el de Ammara y Masson [3]). También es deseable la comparación con los algoritmos implícitos desarrollados a partir de los métodos basados en la densidad, que añaden un término de compresibilidad artificial en la ecuación de continuidad y definen una velocidad pseudo-acústica para preconditionar el sistema y resolver de una manera eficiente flujos compresibles a bajo número de Mach. Para llevar a cabo este estudio será necesario implementar estos algoritmos en el código desarrollado.

En cuanto a la simulación de flujos turbulentos mediante LES, se prevé la profundización en el análisis del método implícito. En la misma línea de trabajo que realizaron Alkishriwi *et al.* [2] para un método acoplado basado en la densidad, se va a llevar a cabo una batería de casos con diferentes resoluciones temporales para conocer la ganancia máxima en eficiencia (respecto a un esquema explícito) manteniendo la precisión en los resultados.

Desde el punto de vista de la contribución al conocimiento de los fenómenos que intervienen en un flujo turbulento, un análisis más detallado de la etapa de transición desde un campo inicial bidimensional hacia el desarrollo de vorticidad tridimensional puede contribuir a una mejor comprensión de los mecanismos de inestabilidad que intervienen en la turbulencia. Por otro lado, un aspecto de creciente interés en los últimos años y que se puede estudiar con las herramientas desarrolladas en este trabajo es el diseño de estrategias de control de la separación masiva del flujo, con el fin de reducir o aumentar, según la aplicación práctica, la fuerza de arrastre sobre el obstáculo.

Bibliografía

- [1] S. Acharya, B. R. Baliga, K. Karki, J. Y. Murthy, C. Prakash, and S. P. Vanka. Pressure-based finite-volume methods in computational fluid dynamics. *Journal of Heat Transfer-Transactions of the ASME*, 129(4):407–424, 2007.
- [2] N. Alkishriwi, M. Meinke, and W. Schröder. A large-eddy simulation method for low Mach number flows using preconditioning and multi-grid. *Computers & Fluids*, 35:1126–1136, 2006.
- [3] I. Ammara and C. Masson. Development of a fully coupled control-volume finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 44:621–644, 2004.
- [4] S. Balay, K. Buschelman, V. Eijkhout, W.D. Gropp, D. Kaushik, M.G. Knepley, L.C. McInnes, B.F. Smith, and H. Zhang. PETSc users manual. Technical Report ANL-95/11 - Revision 2.1.5, Argonne National Laboratory, 2004.
- [5] S. Balay, K. Buschelman, W.D. Gropp, D. Kaushik, M.G. Knepley, L.C. McInnes, B.F. Smith, and H. Zhang. PETSc Web page, 2001. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [6] Satish Balay, William D. Gropp, Lois Curfman McInnes, and Barry F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In E. Arge, A. M. Bruaset, and H. P. Langtangen, editors, *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.
- [7] S. Benhamadouche, J. Uribe, N. Jarrin, and D. Laurence. Large eddy simulation of a symmetric bump on structured and unstructured grid, comparisons with RANS and T-RANS models. In *Fourth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, 2005.

- [8] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Fenómenos de transporte*. Editorial Reverté, Barcelona, 1964.
- [9] F. Bos and B.J. Geurts. Commutator errors in the filtering approach to large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 17(0305108):1–19, 2005.
- [10] F. Bos and B.J. Geurts. Lagrangian dynamics of commutator errors in large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 17(075101):1–15, 2005.
- [11] O. Botella and R. Peyret. Benchmark spectral results on the lid-driven flow. *Computers & Fluids*, 27(4):421–433, 1998.
- [12] M. Braza, D. Faghani, and H. Persillon. Successive stages and the role of natural vortex dislocation in three-dimensional wake transition. *Journal of Fluid Mechanics*, 439:1–41, 2001.
- [13] C-H. Bruneau and M. Saad. The 2-d lid driven cavity problem revisited. *Computers & Fluids*, 35:326–348, 2006.
- [14] J. Cadafalch, C.D. Pérez-Segarra, R. Cònsul, and A. Oliva. Verification of finite volume computations on steady-state fluid flow and heat transfer. *Journal of fluids engineering-transactions of ASME*, 124(1):11–121, 2003.
- [15] S. Camarri, M. V. Salvetti, B. Koobus, and A. Dervieux. Large-eddy simulation of a bluff-body flow on unstructured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40(11):1431–1460, 2002.
- [16] D.R. Chenoweth and S. Paolucci. Natural convection in an enclosed vertical air layer with large horizontal temperature differences. *J. Fluid Mech.*, 169:173–210, 1986.
- [17] N. Chidambaram and R.H. Pletcher. A colocated-grid, fully coupled algorithm for Large Eddy Simulation of incompressible and compressible flows. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 37:1–23, 2000.
- [18] S.K. Choi. Note on the Use of Momentum Interpolation Method for Unsteady Flows. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 36:545–550, 1999.
- [19] S.K. Choi, S.O. Kim, C.H. Lee, and H.K. Choi. Use of momentum interpolation method for flows with large body force. *Numerical Heat Transfer, part B*, 43(3):267–287, 2003.
- [20] A.J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2(1):12–26, 1967.

- [21] A. Cubero and U. Piomelli. Large-eddy simulations of channel flows with variable filter-width-to-grid-size ratios. In Springer Netherlands, editor, *Direct and Large-Eddy Simulation VI*, pages 151–158, 2005.
- [22] F. Daude, I. Mary, and P. Comte. Implicit time integration method for LES of complex flows. In Springer Ercoftac Series, editor, *Direct and Large-Eddy Simulation VI*, volume 6, University of Poitiers, 2005.
- [23] J.W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 41:453–480, 1970.
- [24] G.B. Deng, J. Piquet, P. Queutey, X. Vasseur, and M. Visonneau. A new fully coupled method for computing turbulent flows. *Computers & Fluids*, 30:445–472, 2001.
- [25] G.B. Deng, J. Piquet, P. Queutey, and M. Visonneau. A new fully coupled solution of the Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 19:605–639, 1994.
- [26] D. Durão, M. Heitor, and J. Pereira. Measurements of turbulent and periodic flows around square cross-section cylinder. *Experiments in Fluids*, 6:298–304, 1988.
- [27] H.C. Elman, V.E. Howle, J.N. Shadid, and R.S. Tuminaro. A parallel block multi-level preconditioner for the 3D incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 187:504–523, 2003.
- [28] E. Erturk, T.C. Corke, and C. Gokcol. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48:747–774, 2005.
- [29] J.H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer; 3 edition, 2001.
- [30] D. Fletcher, S. Maskel, and M. Patrick. Heat and mass transfer computations for laminar flow in an axisymmetric sudden expansion. *Computers & Fluids*, 13:207–221, 1985.
- [31] J. Fröhlich, W. Rodi, J.P. Bertoglio, U. Bieder, and H. Touil. *Large Eddy Simulation of Flow around Circular Cylinders on Structured and Unstructured Grids I.*, volume 75 of *Notes on Numerical Fluid*

- Mechanics*, chapter Numerical Flow Simulations II, pages 231–249. E.H. Hirschel (ed.), 2001.
- [32] Norberto Fueyo. Grupo de Fluidodinámica Numérica. <http://gfn.unizar.es>. Área de Mecánica de Fluidos, Universidad de Zaragoza.
- [33] C. Fureby and F.F. Grinstein. Large eddy simulation of high-Reynolds-number free and wall-bounded flows. *Journal of Computational Physics*, 181:68–97, 2002.
- [34] C. Fureby, G. Tabor, H.G. Weller, and A.D. Gosman. Large eddy simulation of the flow around a square prism. *AIAA Journal*, 38(3):442–452, 2000.
- [35] P.H. Gaskell and A.K.C. Lau. Curvature-compensated convective-transport - SMART, a new boundedness-preserving transport algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 8(6):617–641, 1988.
- [36] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids*, 3:1760–1765, 1991.
- [37] B.J. Geurts. Interacting errors in large-eddy simulation: a review of recent developments. *Journal of turbulence*, 7(55):1–16, 2006.
- [38] B.J. Geurts and D.D. Holm. Regularization modeling for large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 15(1):13–16, 2003.
- [39] U. Ghia, K.N. Ghia, and C.T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48:387–411, 1982.
- [40] S. Ghosal and P. Moin. The basic equations for large eddy simulation of turbulent flows in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 118:24–37, 1995.
- [41] W. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum. *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*. MIT Press, 1999.
- [42] W. Gropp, E. Lusk, and R. Thakur. *Using MPI-2: Advanced Features of the Message-Passing Interface*. MIT Press, 1999.

- [43] J.L. Guermond, J.T. Oden, and S. Prudhomme. Mathematical perspectives on large eddy simulation models. *Journal of Mathematical Fluid Mechanics*, 6:194–248, 2004.
- [44] J. Gullbrand. Grid-independent large-eddy simulation in turbulent channel flow using three-dimensional explicit filtering. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs, 2003.
- [45] J. Gullbrand and F.K. Chow. The effect of numerical errors and turbulence models in large-eddy simulations of channel flow, with and without explicit filtering. *Journal of Fluid Mechanics*, 495:323–341, 2003.
- [46] J. Gustafson. Fixed time, tiered memory, and superlinear speedup. In *Proceedings of the Fifth Distributed Memory Computing Conference (DMCC5)*, October 1990.
- [47] D. Heesch. Doxygen, source code documentation generator tool. <http://www.stack.nl/~dimitri/doxygen/>.
- [48] M. Ioveno and D. Tordella. Variable scale filtered Navier-Stokes equations: the new procedure to deal with the associated commutation error. *Physics of Fluids*, 15(7):1926–1936, 2003.
- [49] H. Jasak. OpenFoam: The open source cfd toolbox. <http://www.open CFD.co.uk/openfoam/>.
- [50] T. Jayase, J.A.C. Humphrey, and R. Greif. A consistently formulated QUICK scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures. *Journal of Computational Physics*, 98(1):108–118, jan 1992.
- [51] P. Johansson and L. Davidson. Modified collocated SIMPLEC algorithm applied to buoyancy-affected turbulent flow using a multigrid procedure. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 28:39–57, 1995.
- [52] M. Kadja, J.S. Anagnostopoulos, and G.C. Bergeles. Implementation of newly developed algorithms in the simulation of atmospheric turbulent transports. *Computers & Fluids*, 26(5):489–504, 1997.
- [53] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional step method for incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59(2):308–323, 1985.

- [54] L. Landau and E. Lifchitz. *Mécanique des fluides*. Éditions MIR, segunda edition, 1988.
- [55] A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Advances in Geophysics*, 18:237, 1974.
- [56] B.P. Leonard and J.E. Drummond. Why you should not use hybrid, power-law or related exponential schemes for convective modelling - there are much better alternatives. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20:421–442, 1995.
- [57] B. Lessani, J. Ramboer, and C. Lacor. Efficient large-eddy simulations of low mach number flows using preconditioning and multigrid. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 18(3):221–233, 2004.
- [58] D.K. Lilly. The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In *Proceedings of the IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences*, pages 195–210, Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, NY, 1967.
- [59] D.K. Lilly. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids*, 4:633–635, 1992.
- [60] T.S. Lund. The use of explicit filters in Large Eddy Simulation. *Computers and Mathematics with Applications*, 46:603–616, 2003.
- [61] S.C. Luo, X.H. Tong, and B.C. Khoo. Transition phenomenton in the wake of a square cylinder. *Journal of Fluids and Structures*, 23:227–248, 2007.
- [62] D.A. Lyn, S. Einav, W. Rodi, and J.H. Park. A laser-doppler velocimetry study of ensemble-averaged characteristics of the turbulent near-wake of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 304:285–319, 1995.
- [63] D.A. Lyn and W. Rodi. The flapping shear layer formed by flow separation from the forward corner of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 267:353–376, 1994.
- [64] O.E. Macagno and T.K. Hung. Computational and experimental study of a captive annular eddy. *Journal of Fluid Mechanics*, 28(1):43–64, 1967.

- [65] S. Majumdar. Role of underrelaxation in momentum interpolation for calculation of flow with nonstaggered grids. *Numerical Heat Transfer*, 13:125–132, 1988.
- [66] A.G. Malan, R.W. Lewis, and P. Nithiarasu. An improved unsteady, unstructured, artificial compressibility, finite volume scheme for viscous incompressible flows: Part i. theory and implementation. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 54:695–714, 2002.
- [67] A.G. Malan, R.W. Lewis, and P. Nithiarasu. An improved unsteady, unstructured, artificial compressibility, finite volume scheme for viscous incompressible flows: Part ii. application. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 54:715–729, 2002.
- [68] I Mary, S Pierre, and M Deville. An algorithm for unsteady flows at all speeds. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24:371–401, 2000.
- [69] I Mary, P Sagaut, and M Deville. An algorithm for low mach number unsteady flows. *Computers & Fluids*, 29:119–147, 2000.
- [70] P.J. Mason and N.S. Callen. On the magnitude of the subgrid-scale eddy coefficient in large-eddy simulations of turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 162:439–462, 1986.
- [71] C. Meneveau and J. Katz. Scale-invariance and turbulence models for large-eddy simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2(32):1–32, 2000.
- [72] C. Meneveau, T.S. Lund, and W.H. Cabot. A lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 319:353–385, 1996.
- [73] J. Meyers, B.J. Geurts, and M. Baelmans. Database analysis of errors in large-eddy simulation. *Physics of Fluids*, 15(9):2740–2755, 2003.
- [74] T.F. Miller and F.W. Schmidt. Use of a pressure-weighted interpolation method for the solution of the incompressible Navier-Stokes equations on a nonstaggered grid system. *Numerical Heat Transfer*, 14:213–233, 1988.
- [75] D. Nag and A. Datta. Variation of the recirculation length of newtonian and non-Newtonian power-law fluids in laminar flow through a suddenly expanded axisymmetric geometry. *Journal of fluids engineering-transactions of ASME*, 29(2):245–250, 2007.

- [76] A. Nakayama and S.N. Vengadesan. On the influence of numerical schemes and subgrid-stress models on large eddy simulation of turbulent flow past a square cylinder. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 38(3):227–253, 2002.
- [77] N. Nethercote and J. Seward. Valgrind: A framework for heavyweight dynamic binary instrumentation. In *Proceedings of PLDI 2007*, San Diego, California, USA, June 2007.
- [78] C. Norberg. Flow around rectangular cylinders-pressure forces and wake frequencies. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 49(1-3):187–196, 1993.
- [79] W.L. Oberkampf and T.G. Trukano. Verification and validation benchmarks. *Nuclear Engineering and Design*, 2007. in press.
- [80] A. Okajima. Strouhal numbers of rectangular cylinders. *Journal of Fluid Mechanics*, 123:379–398, 1982.
- [81] J. Papageorgakopoulos, G. Arampatzis, D. Assimacopoulos, and N.C. Markatos. Enhancement of the momentum interpolation method on non-staggered grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 33:1–22, 2000.
- [82] A. Pascau, C. Pérez, and F.J. Serón. A comparison of segregated and coupled methods for the solution of the incompressible Navier-Stokes equations. *Communications in numerical methods in engineering*, 12(10):617–630, 1996.
- [83] A. Pascau, C. Pérez, and D. Sánchez. A well-behaved scheme to model strong convection in a general transport-equation. *International Journal for Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 5(1):75–87, jan 1995.
- [84] S.V. Patankar and D.B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:1787–1806, 1972.
- [85] M Perić, R Kessler, and G Scheuerer. Comparison of finite-volume numerical methods with staggered and colocated grids. *Computers & Fluids*, 16(4):389–403, 1987.
- [86] U. Piomelli. High Reynolds number calculations using the dynamic sugrid-scale stress model. *Fluid Dynamics*, 5(6):1484–1490, 1993.

- [87] U. Piomelli. Large-eddy and direct simulation of turbulent flows. von Karman Institute for Fluid Dynamics Lecture series on Introduction to turbulence modelling, 2004.
- [88] S.B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [89] Carlos Pérez. *Desarrollo de métodos de volúmenes finitos para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, 1994.
- [90] V. Przulj and B. Basara. Bounded convection schemes for unstructured grids. 15th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, Anaheim, CA, 11-14 June, 2001.
- [91] M. Rahman, A. Miettinen, and T. Siikonen. Modified SIMPLE formulation on a collocated grid with an assesment of the simplified QUICK scheme. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 30:291–314, 1997.
- [92] C.M. Rhie and W.L. Chow. Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation. *AIAA Journal*, 21(11):1525, 1983.
- [93] W. Rodi. Comparison of LES and RANS calculations of the flow around bluff bodies. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 69(71):55–75, 1997.
- [94] W. Rodi, J.H. Ferziger, M. Breuer, and M. Pourquié. Workshop on large-eddy simulation of flows past bluff bodies. In *Rottach-Egern*, Alemania, June 1995.
- [95] Y Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM; 2 edition, 2003.
- [96] A.K. Saha, G. Biswas, and K. Muralidhar. Three-dimensional study of flow past a square cylinder at low Reynolds number. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 24:54–66, 2003.
- [97] P.N. Shankar and M.D. Deshpande. Fluid mechanics in the driven cavity. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 32:93–136, 2000.
- [98] W.Z. Shen, J. Michelsen, and J.N. Sorensen. Improved Rhie-Chow interpolation for unsteady flow computations. *AIAA Journal*, 39(12):2406–2409, Dec 2001.

- [99] J.S. Shuen. A coupled implicit method for chemical non-equilibrium flows at all speeds. *Journal of Computational Physics*, 106:306–318, 1993.
- [100] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations, I: the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3):99–164, 1963.
- [101] A. Sohankar. Flow over a bluff body from moderate to high Reynolds numbers using large eddy simulation. *Computers & Fluids*, 35(10):1154–1168, 2006.
- [102] A. Sohankar, L. Davidson, and C. Norberg. Large eddy simulation of flow past a square cylinder: Comparison of different subgrid scale models. *Journal of fluids engineering-transactions of ASME*, 122:39–47, 2000.
- [103] A. Sohankar, C. Norberg, and L. Davidson. Vortex shedding: Numerical simulation of unsteady flow around a square two-dimensional cylinder. In The University of Sydney, editor, *12th Australian Fluid Mechanics Conference*, pages 517–520, 1995.
- [104] A. Sohankar, C. Norberg, and L. Davidson. Low-Reynolds-number flow around a square cylinder at incidence: study of blockage, onset of vortex shedding and outlet boundary condition. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 26:39–56, 1998.
- [105] Y. Srinivas, G. Biswas, A. S. Parihar, and R. Ranjan. Large-eddy simulation of high Reynolds number turbulent flow past a square cylinder. *Journal of Engineering Mechanics*, 132(3):327–335, 2006.
- [106] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. MA: MIT Press, 1972.
- [107] E. Turkel. Preconditioning methods for solving the incompressible and low speed compressible equations. *Journal of Computational Physics*, 72(2), 1987. 227-298.
- [108] B. Vanleer. Towards ultimate conservative difference scheme .2. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics*, 14(4):361–370, 1974.
- [109] S. Venkateswaran, D. Li, and C. Merkle. Influence of stagnation regions on preconditioned solutions at low speeds. AIAA Paper No. 2003-435.

- 41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, January 6-9, 2003.
- [110] J. Vierendeels, B. Merci, and E. Dick. Benchmark solutions for the natural convective heat transfer problem in a square cavity with large horizontal temperature differences. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 13(8):1057–1078, 2003.
- [111] W-P. Wang. *Coupled compressible and incompressible finite volume formulation for the large eddy simulation of turbulent flow with and without heat transfer*. Phd thesis, Iowa State University, Ames, Iowa, 1995.
- [112] N.P. Waterson and H. Deconinck. Design principles for bounded higher-order convection schemes - a unified approach. *Journal of Computational Physics*, page doi:10/1016/j.jcp.2007.01.021, 2007 (in press).
- [113] J. Weidendorfer. Kcachegrind - profiling visualization. <http://sourceforge.net/projects/kcachegrind/>.
- [114] JM Weiss and WA Smith. Preconditioning applied to variable and constant density flows. *AIAA Journal*, 33(11), 1995.
- [115] B. Yu, Y. Kawaguchi, W-Q. Tao, and H. Ozoe. Checkerboard pressure predictions due to the underrelaxation factor and time step size for a nonstaggered grid with momentum interpolation method. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 41:85–94, 2002.
- [116] B. Yu, W-Q. Tao, J-J. Wei, Y. Kawaguchi, T. Tagawa, and H. Ozoe. Discussion on momentum interpolation method for collocated grids of incompressible flow. *Numerical Heat Transfer, Part B*, 42:141–166, 2002.
- [117] Y. Zang, R.L. Street, and J.R. Kosef. A Non-Staggered Grid, Fractional Step Method for Time-Dependent Incompressible Navier-Stokes Equations in Curvilinear Coordinates. *Journal of Computational Physics*, 114:18–33, 1994.

Apéndice A

Código computacional paralelo

El empezar es el comienzo del acabar.

- Dicho popular

En este apéndice se muestra la estructura de datos y el diagrama de flujo básicos del código paralelo de propósito general (MICs) desarrollado durante este trabajo, con el que se han obtenido los resultados presentados en esta memoria. Se ha programado en el lenguaje (de bajo nivel) C, el mismo que el de la librería PETSc, cuyas funciones son utilizadas para resolver los sucesivos sistemas de ecuaciones lineales en paralelo. Las capacidades (actuales) del código son las siguientes:

- 2D y 3D.
- Malla estructurada (cartesiana o cilíndrica).
- Resolución acoplada de las ecuaciones de Navier-Stokes.
- Resolución segregada o acoplada de un número arbitrario de escalares.
- Implementación flexible de condiciones de contorno y fuentes.
- Definición de propiedades del fluido (como densidad o viscosidad) como constantes o variables.
- Esquemas convectivos de alta resolución.
- Esquemas de integración temporal implícitos de alto orden.
- Modelo de turbulencia LES.

A.1. Estructura de datos

Aunque el código ha sido escrito en lenguaje C, la modularidad y flexibilidad que proporciona un lenguaje (de alto nivel) orientado a objetos como C++ se ‘emula’ en cierta medida mediante la definición de nuevos tipos de datos (‘estructuras’ en C llamadas ‘clases’ en C++), que pueden agrupar tanto datos (‘características’) como punteros¹ a funciones (‘acciones’) encargadas de manipular algunos de esos mismos datos. Estas clases constituyen una representación abstracta (no tienen asignado espacio en memoria) de la información que se necesita para resolver un problema general, agrupando en módulos la referida a un mismo aspecto del problema. Se pueden considerar como plantillas sobre las que se crean ‘objetos’ (de nuevo, nomenclatura tomada del lenguaje C++) concretos: se evalúa y se asigna memoria a los miembros de estos ‘objetos’ en función del problema particular que se resuelve (en caso de una ejecución en paralelo, esta asignación de memoria dependerá de la porción local de malla que maneje el procesador correspondiente). Los tipos de dato (‘estructuras’ de C) definidos en el código desarrollado son, por orden alfabético, los siguientes:

St_Bcond: Condición de contorno, definida en una región local de la malla (*patch*). Incluye datos como la ecuación a la que se aplica y, a través de un puntero a una función, la manera de evaluar los coeficientes implícitos y explícitos de su expresión. Se crea automáticamente una lista de las condiciones de contorno aplicada para cada ecuación.

St_Geom: Propiedades geométricas de la malla local, como el número de celdas y la anchura de éstas en cada dirección.

St_Global: Parámetros globales del problema. Contiene información del comunicador MPI, y un contador del número de objetos creados de algunas de las clases (como condiciones de contorno) en el momento actual de la ejecución.

St_Grid: Definición y propiedades de la malla local, como si es cartesiana o cilíndrica, o las coordenadas de las caras.

St_Input: Datos de entrada definidos por ‘el usuario’, editando un fichero externo.

¹Un puntero es un tipo especial de variable que almacena el valor de una dirección de memoria.

- St_Interp:** Parámetros útiles para calcular los coeficientes de interpolación del esquema convectivo. Incluye datos como el índice local de las celdas *upwind*.
- St_Local:** Parámetros locales del problema. Entre sus miembros destaca el índice del procesador, información sobre la porción de malla que maneja, o un puntero a la primera condición de contorno local definida.
- St_Patch:** Región rectangular de la malla *patches*. Se crea automáticamente una lista de regiones (ver abajo).
- St_Porosity:** Parámetros útiles para multiplicar flujos a través de las caras por un factor (de 0 a 1). Se crea automáticamente una lista de porosidades locales (es decir, asociadas a una región perteneciente al procesador en cuestión) (ver abajo).
- St_Prop:** Propiedad (constante o variable) asociada a una región de la malla (o *patch*). Se crea automáticamente una lista de propiedades locales a un procesador (ver abajo).
- St_Sys:** Objetos de PETSc para formar y resolver el sistema de ecuaciones distribuido, como el vector incógnita y del lado derecho, la matriz de coeficientes, el *array* distribuido o el *solver* lineal.
- St_Trans:** Parámetros específicos de un flujo no estacionario, como el orden del esquema temporal.
- St_Var:** Parámetros de una variable dependiente (o incógnita). Incluye datos como el coeficiente de relajación aplicado, el coeficiente de difusión de la ecuación de conservación correspondiente o el campo inicial de la variable.

St_Bcond	St_Prop	St_Patch	St_Porosity
int id	int id	int id	int id
int ivar	ktypeProp ktype	int N[3], Ng[3]	int ineighb
int ineighb	double Cons	int Ifirst[3], Ifirstg[3]	double Cons
St_Patch *Patch	double **Array	int llast[3], llastg[3]	St_Patch *Patch
St_Prop *CoeffA	void(* Funct)(struct St_Prop *Prop)	int ncell, ncellg	St_Porosity *Next
St_Prop *CoeffB	St_Patch	St_Patch *Next	
St_Bcond *Next	St_Prop *Next		

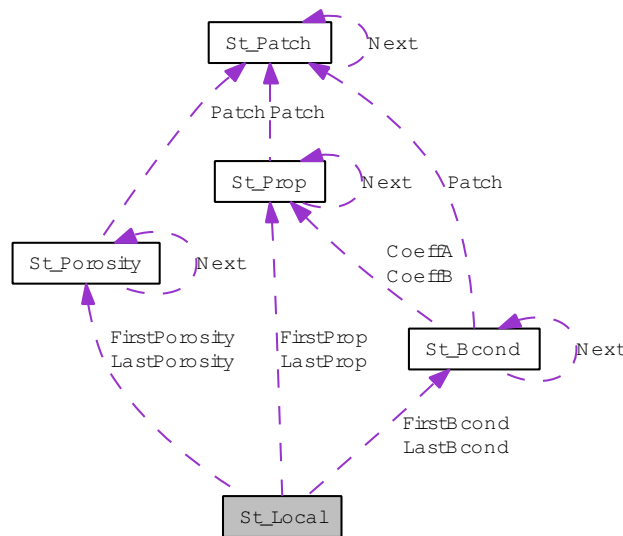


Figura A.1: Miembros de las clases que permiten formar listas de objetos (arriba). Diagrama de colaboración del tipo de dato St_Local (abajo), elaborada con el *software* Doxygen [47].

Algunas de las clases enumeradas contienen un solo objeto (St_Geom, St_Global, St_Grid, St_Input, St_Interp, St_Local y St_Trans). Otras tienen un número fijo durante toda la ejecución del programa (así, se declaran dos objetos tipo St_Sys, para tener en cuenta los grados de libertad de un sistema acoplado o uno segregado, y se declara un *array* de objetos St_Var, con tantos índices como variables dependientes). No es necesario, en cambio, conocer *a priori* el número de objetos del resto de clases (St_Bcond, St_Prop, St_Patch, St_Porosity), ya que se añaden automáticamente a una lista de su mismo tipo conforme son creados (ver Figura A.1, abajo). Estas últimos cuatro clases de datos se definieron, inicialmente, para permitir la implementación de las condiciones de contorno del problema de una manera flexible y general; por su relevancia en la estructura del código se describen con más detalle a continuación.

Una condición de contorno (o fuente) consiste básicamente en la composición de términos implícitos y explícitos, que deben ser añadidos a la matriz de coeficientes y al lado derecho de la ecuación (respectivamente) en ciertas regiones de la malla computacional (ver Ecuación (5.4)). Así, la estructura que las representa (St_Bcond) incluye a su vez dos miembros del tipo St_Prop (que permite utilizar una función general para evaluar dichos coeficientes) y uno del tipo St_Patch (que define la región rectangular en la que se aplica). En la tabla que aparece en la Figura A.1 (arriba) se enumeran los miembros que componen estas clases.

La estructura que representa una condición de contorno (St_Bcond) contiene el índice de la ecuación de conservación 'ieq' a la que se aplica, el índice de la variable a la que afecta el coeficiente implícito 'ivar' (en el sistema acoplado 'ivar' e 'ieq' pueden ser distintas) y su posición en la molécula computacional 'ineighb' (la mayoría de las veces es la propia celda), un puntero a la región de celdas en la que se aplica (objeto tipo St_Patch previamente definido) y dos punteros a dos objetos del tipo propiedad (St_Prop, uno para el coeficiente implícito y otra para el explícito). Además, la estructura incluye dos datos adicionales asignados dinámicamente por el sistema: un número de identificación y un puntero (recursivo) al mismo tipo de dato, que apunta a la siguiente condición de contorno local (es decir, con celdas del *patch* incluidas en la región de malla local) y definida para la misma ecuación ('ieq'). Se crea así una lista que permite recorrer todas las condiciones de contorno aplicadas a una ecuación dada e insertar de manera automática los coeficientes en las filas y columnas adecuadas de la matriz y del vector del lado derecho del sistema de ecuaciones.

La clase St_Prop incluye un parámetro 'ktypeProp' que indica el tipo de propiedad (constante, dependiente únicamente de la geometría de la celda, dependiente de las incógnitas del sistema o variable en el tiempo) y determina

el momento del proceso iterativo en el que debe actualizarse su evaluación. Si se trata de un objeto propiedad del tipo constante, el valor correspondiente (permanente) se almacena en una única posición (Cons). En caso contrario, la estructura proporciona un puntero a un *array* para almacenar los datos y a una función para evaluarlos. La asignación de memoria del *array* depende del número de celdas locales del objeto tipo *patch* en el que se define la propiedad. Así, una vez definida esta función, el sistema se encarga de calcular los coeficientes y almacenarlos en el *array*. Además de aparecer en las condiciones de contorno, son también tipos de dato `St_Prop`, la densidad o el coeficiente de difusión de las ecuaciones de transporte (en estos casos, el *patch* comprende todas las celdas de la malla).

El tipo de dato `St_Porosity`, aunque puede tener otros usos, también tiene relación con las fronteras del dominio computacional. Cuando se recorre la malla para, por ejemplo, evaluar los flujos convectivos a través de las caras, las expresiones generales no pueden utilizarse en las caras frontera del dominio (ver Apartado 5.3). Una opción para tratar estas particularidades es incluir sentencias condicionales ('if') en el bucle para detectar estas caras y evitar la evaluación (el flujo correcto será especificado mediante una condición de contorno). Sin embargo, este tratamiento tiene algunas ventajas, como que la inclusión de condicionales en bucles tan largos dificulta la optimización del propio compilador o que puede ser una fuente de errores de programación. La estrategia seguida en este trabajo ha priorizado la eficiencia y la limpieza en la programación de las particularidades asociadas al contorno, sobre el espacio en memoria requerido. En el *setup* de la ejecución se procede al cálculo y almacenamiento para cada celda, P , del índice de todas sus vecinas y , en caso de no existir alguna/s de ellas, se ha tomado como índice el de la propia celda. De esta manera, se asume por defecto un gradiente nulo para todas las variables en todas las caras fronteras, y se evita la inclusión de condicionales en los bucles que recorren la malla (esta estrategia ha resultado muy útil para implementar de una manera adecuada las condiciones de contorno asociadas a las correcciones de la interpolación del momento). Cuando se quiere imponer una condición de contorno diferente, se debe anular la contribución por defecto, y esto es llevado a cabo mediante la definición de objetos del tipo porosidad. Estos objetos tienen asociado un factor constante (generalmente 0), una región de celdas (*patch*) y la cara sobre la que se aplica ese factor de corrección.

La Figura A.1 presenta el diagrama de colaboración de la clase que representa al procesador local (`St_Local`); este diagrama ha sido elaborado con el *software* Doxygen [47], una herramienta para la documentación de programas escritos en C y C++. Dicho tipo de dato contiene la información de las cuatros listas que se crean en una ejecución (condiciones de contorno para

cada ecuación, propiedades, *patches*, y porosidades) necesaria para recorrerlas de manera automática. En concreto, esta clase apunta a los objetos (locales) que ocupan el primer lugar y el último de cada lista.

Para finalizar con la estructura de datos, es interesante destacar que la clase `St_Bcond` puede tener otros usos aparte de implementar las condiciones de contorno, siendo una herramienta útil para implementar nuevos modelos en el código. Así, por ejemplo, el término adicional en una malla cilíndrica, respecto a la cartesiana (ver Apartado 6.6), que puede tratarse tanto explícitamente como implícitamente ha sido incluido como condición de contorno; en el primer caso sólo se asigna una función para el miembro `CoeffA` y el `CoeffB` es una constante de valor 0, mientras que en el segundo caso sólo es variable el `CoeffB`.

A.2. Diagrama de bloques

La Figura A.2 muestra de una manera simplificada el diagrama de flujo del programa principal en un problema estacionario. La primera subrutina (*Setup*) se encarga de, a partir de los datos proporcionados por el usuario, crear los objetos de las distintas clases que definen el problema particular. A continuación, se inicializa el vector de incógnitas (*Init*) y se comienza el bucle en iteraciones exteriores². Este bucle principal empieza recorriendo la lista de propiedades para su evaluación; recorrido que incluye tanto las propiedades asociadas a las condiciones de contorno como términos generales de las ecuaciones de conversación (flujos convectivos y difusivos, fuerzas de presión) o propiedades del fluido (como la densidad y la viscosidad). Posteriormente, se procede a la formación del sistema de ecuaciones, mediante la inserción de los coeficientes correspondientes en la matriz y en el vector fuente. Finalmente, se resuelve el sistema para el vector corrección ($A\Delta\Phi = RHS = b - A\Delta\Phi$) y se actualiza el vector incógnita. A continuación, se comprueba si se ha cumplido el criterio de convergencia: en caso negativo, se repite el proceso (aunque sólo se evaluarán de nuevo las propiedades que dependan de las variables incógnitas) y, en caso afirmativo, se imprimen la solución final y se termina el programa.

A.2.1. Módulo de usuario

El módulo de usuario consta de ficheros de entrada tipo texto y de ficheros donde se programa funciones en C. En total, es necesario editar 7

²En un problema transitorio se realiza, además, un bucle (externo) sobre pasos temporales.

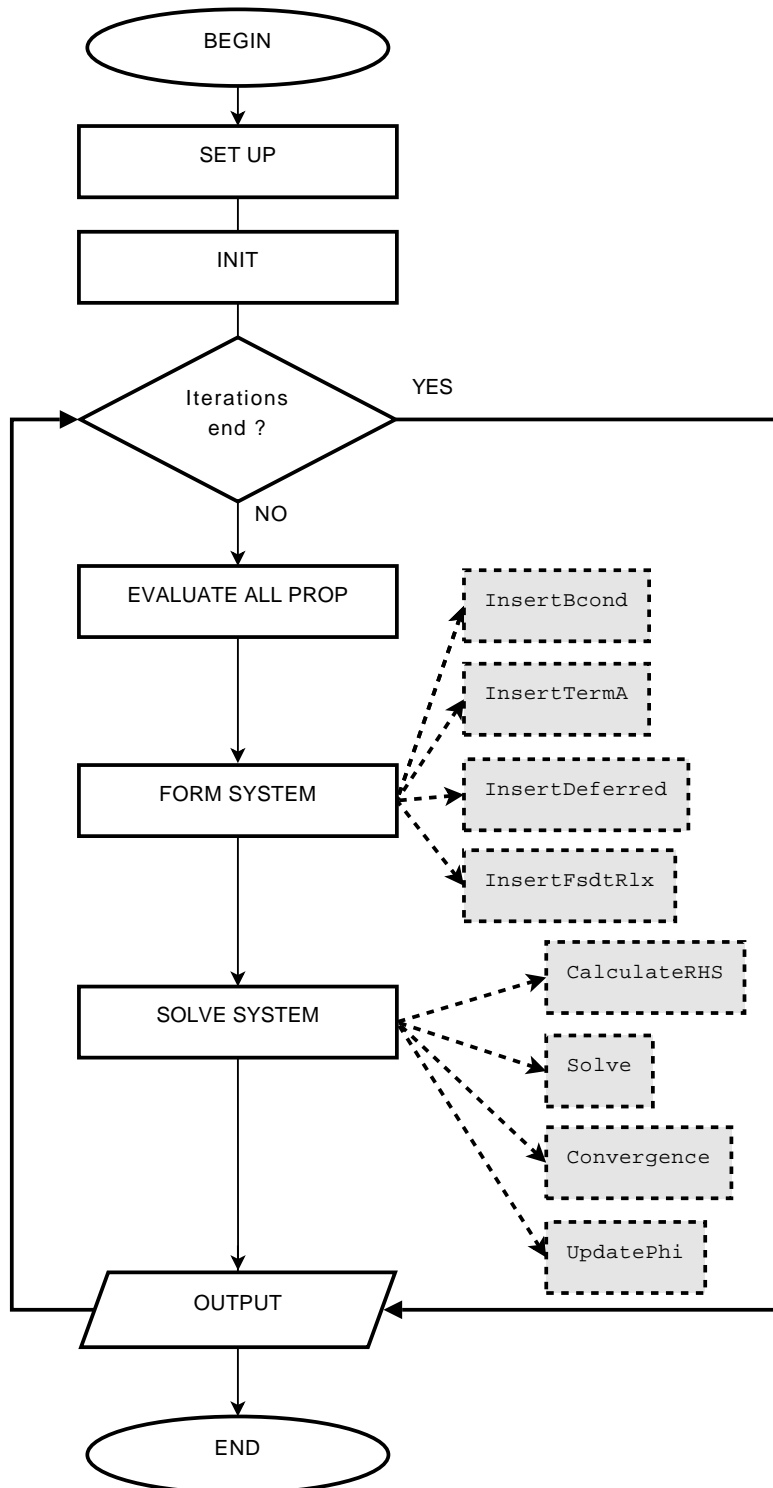


Figura A.2: Diagrama de flujo en un problema estacionario.

ficheros para especificar el flujo que se quiere resolver: tres de texto `grd.inp`, `rod.inp` y `trans.inp`, y los ficheros de C `userdeclarat.h`, `uservar.c`, `userbcond.c` y `userprop.c`. En el *Setup* se leen estos ficheros y se llama a las subrutinas que crean los objetos necesarios de cada clase, asignándoles la memoria correspondiente a la porción de malla local. A continuación se presenta una breve descripción de estos ficheros, y en la Figura A.3 se muestra un diagrama de las subrutinas llamadas por el usuario (encuadradas con líneas discontinuas, las llamadas a otras funciones desde estas subrutinas).

grd.inp: tipo de malla, número de celdas y coordenadas de las caras.

rod.inp: parámetros asociadas a la resolución del problema, como nivel de monitorización, criterio de convergencia o impresión de resultados.

trans.inp: constantes del problema relacionadas con un problema transitorio.

declarat.h: macros necesitadas por el compilador, como número de dimensiones y de variables, y otras útiles para el usuario como longitud característica del dominio o viscosidad del fluido.

UserVar.c: definición de las variables incógnita.

UserBcondSetup.c: definición de las condiciones de contorno.

UserProp.c: definición de las propiedades del fluido, como la densidad.

A. Código computacional paralelo

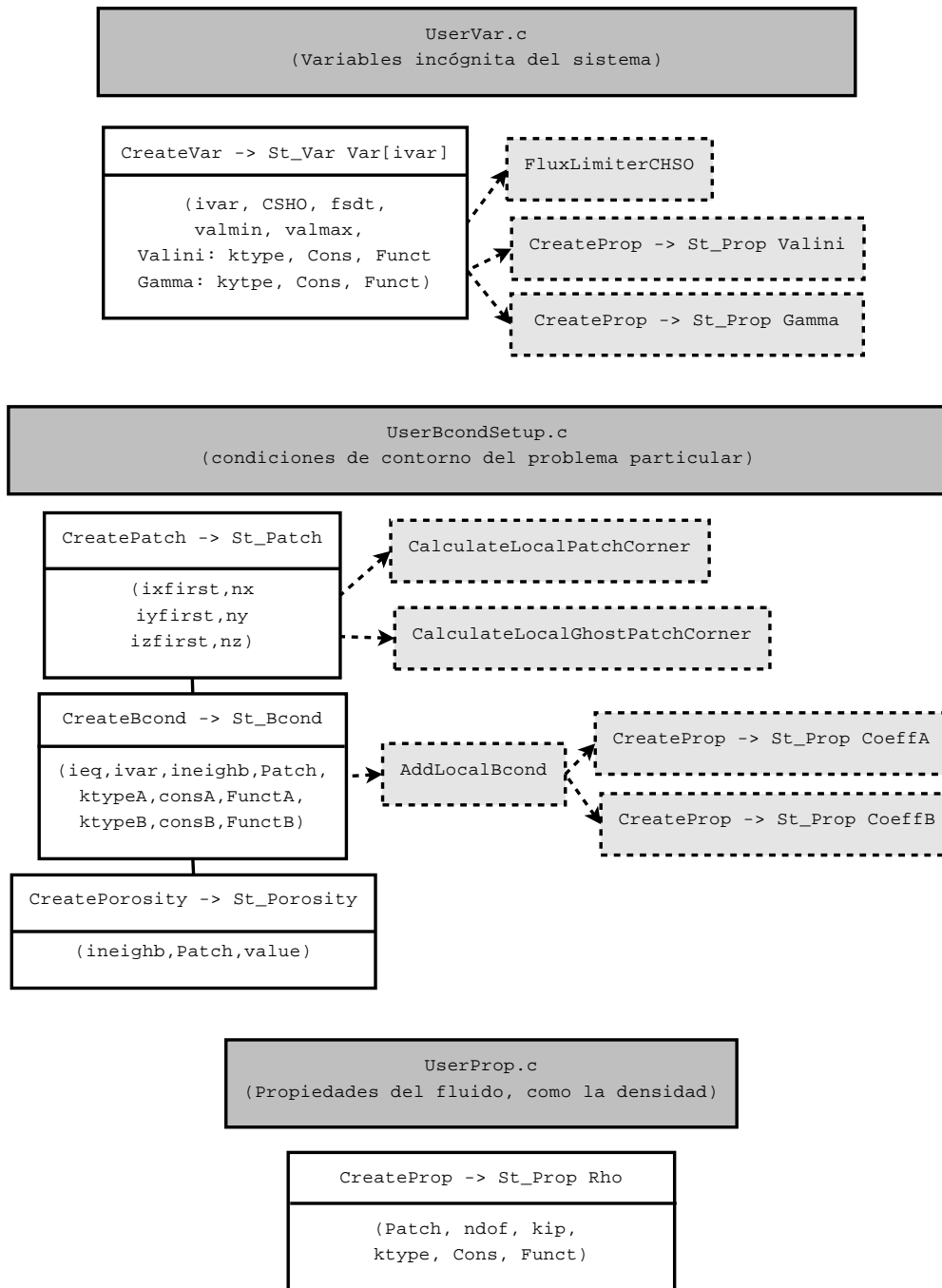


Figura A.3: Diagrama de las subrutinas llamadas en el módulo de usuario.

Apéndice B

Información suplementaria en el CD anexo

*De colores,
de colores se visten los campos en la primavera.
- Canción popular*

Junto con la presente memoria, se anexa un CD que proporciona información suplementaria relacionada con varios aspectos de su contenidos. Incluye los siguientes ficheros y directorios:

leame.txt: Fichero de texto que informa de los contenidos del cd.

memoria.pdf: La propia memoria en formato electrónico *pdf*.

docu.html: Documentación del código generada automáticamente mediante la herramienta Doxygen [47]. Se sugiere abrir inicialmente el fichero *index.html*.

ConvNat: Este directorio incluye dos videos relacionados con el problema del flujo en una cavidad generado por convección natural (Apartado 6.4):

Ra1e7.avi : Transitorio del campo de temperatura y de los contornos de vorticidad (líneas discontinuas para valores negativos) para el flujo a $Ra = 1.0e7$ y $\epsilon = 0.6$.

Ra1e8.avi : Caso a $Ra = 1.0e8$.

SqCylLam: Este directorio incluye dos videos del movimiento periódico del desprendimiento de vórtices laminar ($Re = 100$) tras un cilindro cuadrado (ver Apartado 6.5 de la memoria para una descripción del caso).

modv.avi: Contornos del módulo de velocidad.

vortz.avi: Contornos de vorticidad (ω_z).

SqCylLES: Los videos incluidos en este directorio ilustran la transición de la estela tras un cilindro cuadrado, desde un campo inicial bidimensional hasta que la turbulencia está completamente desarrollada (desde $t = 40$ hasta $t = 114D/U$), obtenida mediante LES (Apartado 7.3.2 del Capítulo 7).

vortz.avi: Isosuperficies de la componente transversal de vorticidad (w_z).

vortx.avi: Desarrollo de la componente longitudinal de vorticidad (w_x) en el mismo intervalo de tiempo.

cp.avi: Coeficiente de presión (c_p).

vortz-upw.avi: Una visión alternativa, aguas arriba, de las isosuperficies de w_z .

vortz-upw.avi: Isosuperficies de vorticidad vertical w_y (visión aguas arriba).