



**Universidad
Zaragoza**

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Máster Universitario en Modelización e Investigación Matemática, Estadística y
Computación

Evaluación de esquemas de alto orden para la simulación numérica de fenómenos de transporte convectivo en flujos reales

Pablo Solán Fustero

Directores:

Dra. Pilar García Navarro

Dr. Adrián Navas Montilla

Ponente:

Dr. José Luis Gracia Lozano

Área de Mecánica de Fluidos
Departamento de Ciencia de Materiales y Fluidos
Noviembre, 2019

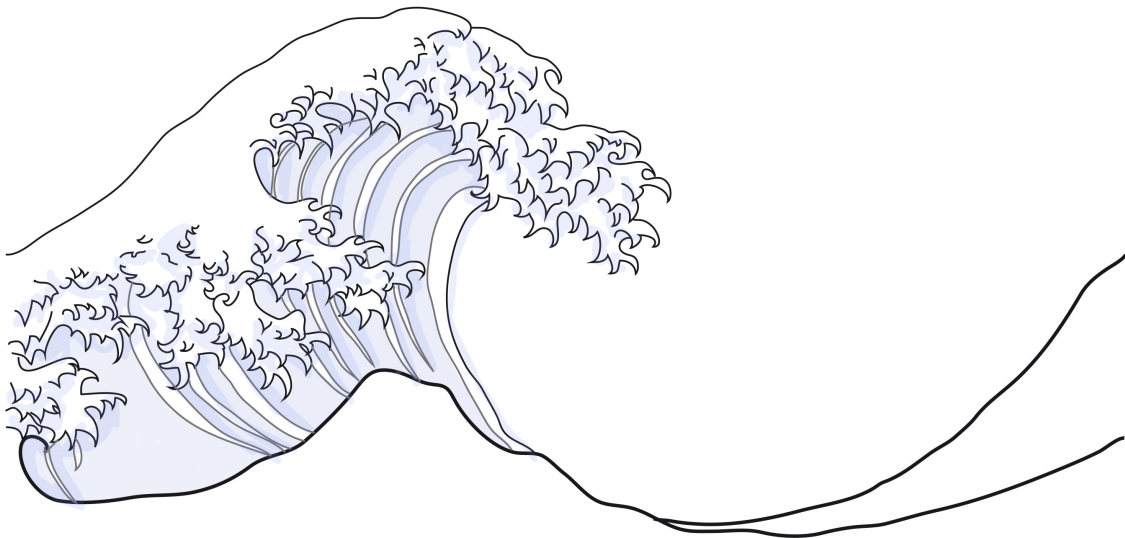
Resumen / Abstract

Los flujos reales están determinados por características y fenómenos físicos muy complejos. En particular, la turbulencia del movimiento fluido es indescriptible analíticamente, así que es necesario afrontar su resolución mediante métodos numéricos. En la Dinámica de Fluidos Computacional, a la hora de resolver flujos turbulentos es conveniente conocer de manera muy detallada las propiedades de los esquemas numéricos que se van a utilizar. Dos propiedades relevantes de estos esquemas son la dispersión y la difusión numéricas, que pueden ser cuantificadas mediante el análisis espectral de von Neumann. En este trabajo se explora el estudio de varios esquemas numéricos, utilizando esta metodología, para evaluar su adecuación para la resolución de problemas de turbulencia. El análisis espectral de los esquemas numéricos se complementa con el estudio de un problema unidimensional descrito por la ecuación de Burgers con término fuente, que presenta características análogas a las de las ecuaciones de Navier-Stokes. Con las conclusiones obtenidas se propone un modelo de simulación para flujos de aguas poco profundas y se evalúan sus limitaciones.

Real flows are characterized by very complex physical phenomena. Particularly, the turbulent motion is analytically indescribable, so it is necessary to resolve it using numerical methods. In Computational Fluids Dynamics, it is convenient to possess a deep understanding of the specific properties of the numerical schemes that are to be used for the resolution of turbulent flows. Two relevant properties are numerical dispersion and diffusion, which can be quantified by means of the von Neumann spectral analysis. This work aims at the evaluation of the suitability of different numerical schemes for the resolution of turbulent flows. The methodology for this analysis is based on the spectral analysis. Furthermore, this method is complemented with the study of a one-dimensional turbulence problem described by Burgers' equation with source term. A set of guidelines for the design of turbulence simulation models are eventually proposed, based on the analysis of the aforementioned problem. The proposed model is applied to the shallow water equations and is evaluated using experimental results as a benchmark.

Agradecimientos

En primer lugar, el autor quiere agradecer a los directores de este trabajo toda su dedicación y directrices, sin las cuales no hubiera sido posible afrontar de ninguna manera una empresa tan amplia y compleja. Gracias a la directora Dra. Pilar García por haberme ofrecido este trabajo, enmarcado en el proyecto de investigación del Grupo de Hidráulica Computacional de la Universidad de Zaragoza, Herramientas eficientes de alta precisión para la simulación y control de flujos PGC2018-094341-B-I00, cuyo objetivo es el desarrollo de un código propio de simulación para la predicción y control de fenómenos en flujos complejos, y con financiación del Gobierno de Aragón, Grupo de Referencia Mecánica de Fluidos Computacional T32-17R. Así como por plantear las dudas y cuestiones más trascendentales y menos evidentes a ojos del autor, quien se siente admirado tanto por su capacidad de trabajo y dirección al frente del área como por su labor a la hora de hacer aprender y apreciar la Mecánica de Fluidos. Gracias al director Dr. Adrián Navas Montilla por su empeño diario e infatigable en sacar adelante el trabajo de la manera más constructiva y en sumergirme (*¿hundirme?*) en el mundo de la investigación. Junto a él, me gustaría mencionar al resto de miembros del despacho de colaboradores por haberme acogido como a uno más y por quienes profeso una sincera amistad. Parte de este trabajo se ha realizado en colaboración con el Dr. Esteban Ferrer Vaccarezza y el Dr. Juan Manzanero Torrico del grupo de investigación Métodos y Aplicaciones Numéricas a la Tecnología Aeroespacial del departamento Departamento de Matemática Aplicada a la Ingeniería Aeroespacial de la Universidad Politécnica de Madrid, a quienes se agradece sus valiosas sugerencias e indicaciones a la hora de analizar esquemas de alto orden. Gracias al ponente de este trabajo Dr. José Luis Gracia Lozano, del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Zaragoza, puesto que con sus comentarios me ha ayudado ayudado a estructurar adecuadamente los contenidos de este trabajo.



Índice general

1. Introducción y motivación	1
2. Introducción a la turbulencia	7
2.1. Características de los flujos turbulentos	7
2.2. Correlación y espectro	8
2.3. Descomposición de Reynolds	8
2.4. Producción de turbulencia y cascada energética	9
2.5. Espectro de la turbulencia en el rango inercial	10
2.6. Introducción a la simulación de la turbulencia	11
3. Esquemas numéricos, volúmenes finitos y propiedades	15
3.1. Método de Godunov	16
3.2. El problema de Riemann	17
3.3. Ecuaciones lineal advectiva 1D y de Burgers 1D	18
3.4. Extensión a alto orden temporal y espacial	18
3.5. Propiedades de los esquemas numéricos	20
3.5.1. Consistencia, estabilidad y convergencia	20
3.5.2. Dispersión, difusión y condición CFL.	22
4. Análisis espectral de esquemas numéricos	25
4.1. Aspectos preliminares	25
4.1.1. Definición del problema de estudio	25
4.1.2. Discretización y límite de muestreo	26
4.2. Método analítico de Von Neumann	28
4.2.1. Método aplicado al problema semidiscreto	28
4.2.2. Ejemplos de método semidiscreto: FOU y UWC3	29
4.2.3. Método aplicado al problema completamente discreto	30
4.2.4. Ejemplo de método discreto: UWC3-ADER	32
4.2.5. Ejemplo de método discreto: UWC3-RK	33
4.2.6. Influencia del tiempo total de simulación	35
4.2.7. Análisis de estabilidad para varios esquemas	37
4.3. Análisis de von Neumann aproximado	38
4.3.1. Obtención de armónicos	38
4.3.2. Barrido espectral y paso espacial	39
4.3.3. Procedimiento del análisis aproximado	42
4.3.4. Validación de un esquema lineal: UWC3-ADER3	43
4.3.5. Validación de un esquema semidiscreto no lineal: WENO5	43
4.3.6. Análisis aproximado y comparación de los métodos WENO y UWC	44
4.3.7. Comparación de los esquemas WENO3-ADER3 y WENO3-RK3	45
4.3.8. Criterio del 1 % en dispersión y difusión aplicado al esquema completo	46

5. Resolución numérica de la ecuación de Burgers	49
5.1. Ecuación de Burgers	49
5.2. Resultados numéricos	52
5.2.1. Sensibilidad de la solución al número de modos excitados, N_c	53
5.2.2. Sensibilidad de la solución al refinamiento de malla, N	55
5.2.3. Comparación entre esquemas FOU, UWC y WENO	58
6. Aplicación a flujos reales de aguas poco profundas	65
6.1. Definición del caso de estudio y su modelo matemático	66
6.2. Análisis de los resultados numéricos	68
7. Conclusiones	73
Bibliografía	78
A. Análisis de la condición de consistencia	83
A.1. Ecuación lineal advectiva	84
A.2. Ecuación de Burgers	85
A.2.1. Malla doble	85
B. Esquema numérico UWC3-ADER	87
B.1. Esquema semidiscreto	87
B.2. Esquema discreto completo	88
C. Esquema numérico UWC3-RK	91
C.1. Esquema discreto completo	91
D. Ejemplo de análisis aproximado semidiscreto sobre un esquema no lineal	95
E. Ejemplo de análisis aproximado discreto 2 (12 esquemas)	99
E.1. Difusión	102
F. Valores del criterio del 1% para diferentes esquemas	105

Capítulo 1

Introducción y motivación

En Mecánica de Fluidos la turbulencia del movimiento fluido es un fenómeno indescriptible desde un punto de vista analítico [35, 37, 44]. A pesar de ello, es posible citar una serie de características que permiten diferenciar los flujos turbulentos de flujos meramente caóticos: se trata de flujos *aleatorios*, cuya apariencia puede calificarse como irregular e impredecible; aparece la *vorticidad*, es decir, la producción de estructuras denominadas *vórtices*; son altamente *no lineales*, lo cual repercute en el mantenimiento del régimen turbulento por medio del proceso denominado estiramiento de vórtices (*vortex stretching*); y, finalmente, se caracterizan por una tasa de transferencia de energía entre escalas (longitudes de onda, λ) que es invariante al problema de estudio [20]. Así, se puede decir que, debido a la naturaleza aparentemente caótica de los flujos turbulentos, es posible utilizar una teoría estadística para describirlos. La turbulencia hace del flujo una *mezcla* que abarca un amplio rango de escalas, que van desde las dimensiones del dominio físico hasta las escalas pequeñas de disipación (escalas de Kolmogorov [18]). Un ejemplo de esta condición se muestra en la Figura 1.1, donde se representa una simulación bidimensional en la que coexisten estructuras coherentes de gran tamaño y turbulencia de menor escala [10], un comportamiento habitual en turbulencia bidimensional. Estas estructuras vorticales vienen determinadas por una longitud característica, de manera que en la figura 1.1 se pueden identificar vórtices de escalas grandes ($l \approx 300\Delta x$, con Δx el tamaño de malla utilizado en la discretización), así como vórtices de escalas pequeñas ($l \approx 30\Delta x$).

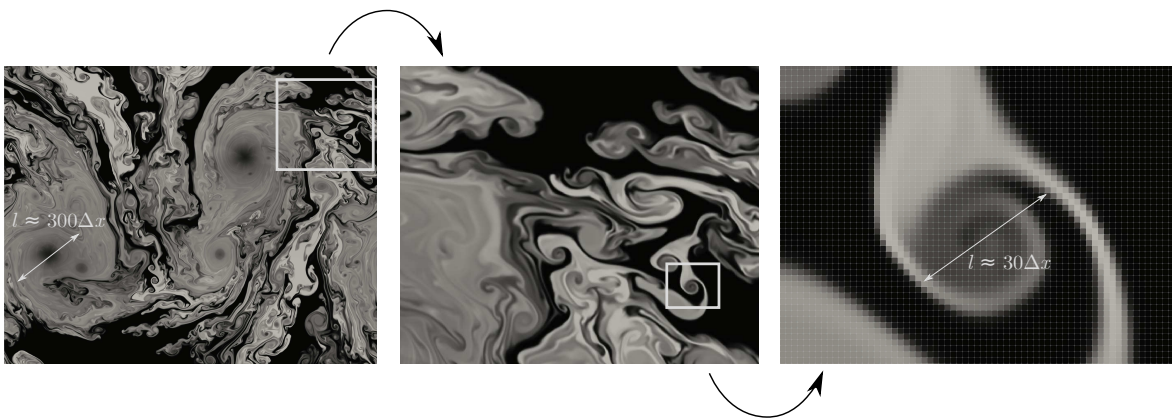


Figura 1.1: Ejemplo de simulación de flujo turbulento bidimensional con estructuras coherentes de diferentes escalas.

En general, en un flujo turbulento tridimensional se produce un fenómeno de transferencia de energía entre las estructuras turbulentas más grandes y las más pequeñas, que sucede por medio del proceso de estiramiento de vórtices. Así, en estado estacionario (promedio), ocurre un reparto de energía a lo largo de todo el espectro de escalas (longitudes de onda, λ) del flujo turbulento, que se conoce como cascada energética [42]. Esta cascada energética representa,

como se muestra en la Figura 1.2, el espectro energético del flujo, $E(k)$, en función del número de onda, $k = 2\pi/\lambda$. En números de onda bajos (escalas grandes), se produce la inyección de energía. Desde esas escalas, se produce una transferencia de energía hacia las escalas más pequeñas formando el denominado *rango inercial* del espectro (en escala logarítmica). Este se representa en la cascada energética mediante una tendencia lineal de disminución de energía, según aumenta k . Para números de onda altos (escalas pequeñas, correspondientes a las escalas de Kolmogorov), el efecto de la viscosidad molecular es dominante y se disipa la energía en forma de calor. La zona inercial, cuyo espectro de energía presenta una tendencia lineal de pendiente $-5/3$ [20], interesa especialmente a la hora de tratar de reconstruir flujos turbulentos por medio de cálculos numéricos [26, 27, 28, 31, 38].

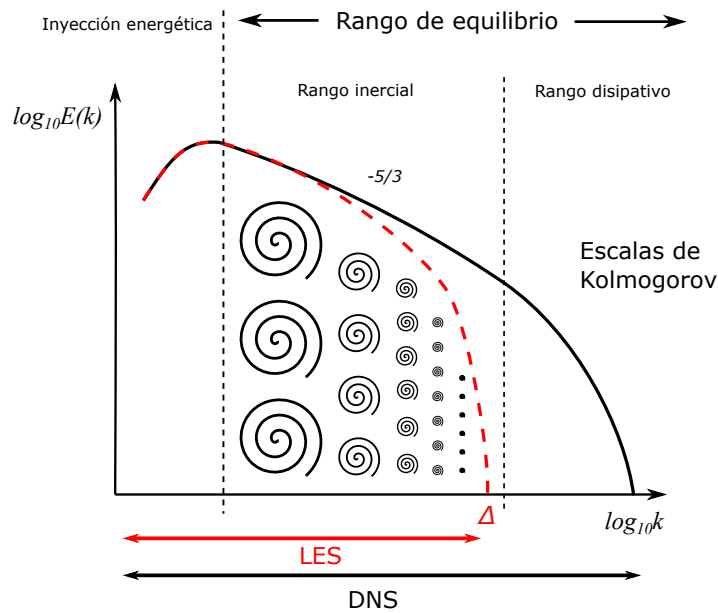


Figura 1.2: Representación del espectro energético de un flujo turbulento también denominada cascada energética. Rangos de números de onda de actuación de las metodologías DNS y LES/ILES.

Debido a la falta de una teoría completa, cerrada y analítica de la turbulencia y a la complejidad de los flujos turbulentos, es necesario afrontar su cálculo mediante el uso de herramientas numéricas. La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) trata de resolver el problema de la turbulencia por medio de las ecuaciones de Navier-Stokes, que gobiernan el comportamiento de los flujos turbulentos en el medio continuo [20]. La resolución directa explícita de este sistema de ecuaciones diferenciales, denominado DNS (*Direct Numerical Simulation*), supone una alta necesidad de recursos computacionales debido al amplísimo rango de escalas en el que se manifiestan las fluctuaciones turbulentas [21]. Por esta razón, se proponen otros métodos para afrontar este cálculo con los que se trata de disminuir dicho coste. Los métodos LES (*Large-Eddy Simulation*) encaran la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes tan sólo para las grandes escalas (números de onda pequeños). Habitualmente, es necesario complementarlos con un modelo *ad hoc*, comúnmente denominado SGS (Subgrid-Scale [40]), para filtrar las fluctuaciones en las escalas pequeñas (números de onda grandes) a partir de un umbral Δ y representar así la transferencia de energía recibida desde las escalas mayores y su posterior disipación. Algunos métodos numéricos solucionan de manera implícita el problema de las pequeñas escalas para los métodos LES, puesto que introducen una disipación numérica lo suficientemente elevada como para eliminar las fluctuaciones de pequeña escala. Estos métodos se llaman ILES (*Implicit LES*) y no requieren la modelización de la disipación en las escalas pequeñas. Otra metodología diferente es la denominada RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), según la cual no se resuelven de manera explícita las ecuaciones

de Navier-Stokes para ninguna escala. Por el contrario, se modela todo el rango de escalas mediante la descomposición de Reynolds de las variables en suma de valor promedio más fluctuación [2]. En ese caso, se resuelve el flujo promedio y los efectos de la turbulencia sobre éste debidos a las fluctuaciones se introducen mediante términos viscosos artificiales. En la Figura 1.2 se muestran los rangos de números de onda de actuación de las distintas metodologías mencionadas, sin incluir RANS, ya que estos no resuelven fluctuaciones turbulentas en las ecuaciones de Navier-Stokes para ningún valor de k .

Los flujos turbulentos por lo tanto contienen fluctuaciones en un amplio rango de números de onda, sin una clara separación entre escalas. Esto, a la hora de elegir el método de resolución, requiere un conocimiento en profundidad de los esquemas numéricos utilizados. Es necesario caracterizar propiedades de los mismos, como la dispersión y la difusión numéricas, para cada número de onda. Por ejemplo, el uso de algunos esquemas de alto orden con propiedades particulares puede favorecer la disipación de las fluctuaciones turbulentas en las pequeñas escalas, de manera que no sea necesario el uso de un modelo extra de disipación (SGS). Esto permite determinar que, en este caso, este esquema sería útil en el marco de la metodología ILES.

El análisis espectral de von Neumann es un procedimiento que sirve para comprobar, por medio del cálculo analítico de la dispersión y la difusión, la validez de un esquema numérico [9, 16]. Este método analítico es válido para esquemas numéricos lineales, pero en el caso de tratar con esquemas no lineales, es necesario recurrir a una versión aproximada del método de von Neumann, la cual está basada en el análisis de las propiedades de propagación de las ondas por medio de la transformada de Fourier [1, 17, 31, 34]. Este análisis espectral permite desarrollar herramientas con las que estimar a priori, como paso previo a realizar una simulación, el comportamiento esperado de un esquema numérico en un problema de turbulencia. En este sentido, varios autores han introducido y utilizado el llamado criterio del 1% [27, 31], que propone los dos valores de k para los cuales el error relativo en dispersión, $k_{1\%}^{disp}$, y en difusión, $k_{1\%}^{diff}$, supera el 1%, umbral a partir del cual estos errores en difusión y/o dispersión serán apreciables en la solución numérica.

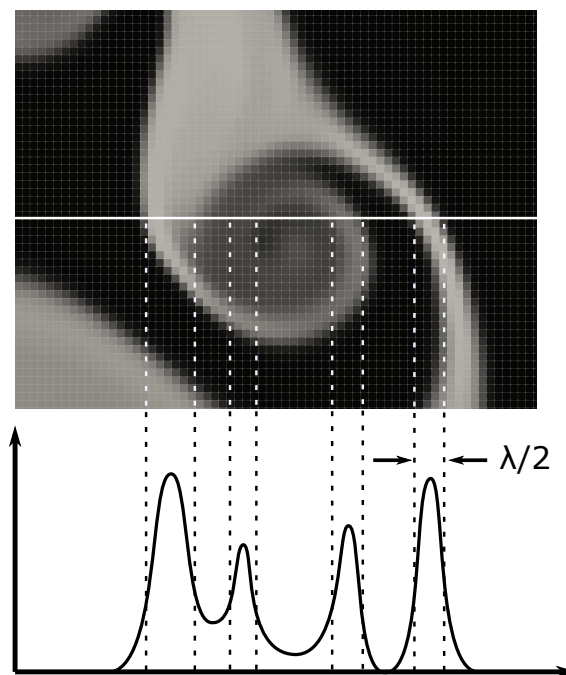


Figura 1.3: Ejemplo de corte transversal de un vórtice de una simulación de flujo turbulento 2D.

El interés central de este trabajo radica en explorar el uso del análisis aproximado de von Neumann y confirmar la validez de los criterios del 1% para esquemas numéricos en volúmenes finitos, en particular el esquema UWC (upwind centrado) y el esquema WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*, [24]). La diferencia principal entre ambos reside en que los métodos UWC reconstruyen a partir de un único *stencil* y los WENO utilizan una combinación de reconstrucciones en diversos *stencils* a través de unos pesos no lineales que se calculan dinámicamente para evitar las oscilaciones de Gibbs. El alto orden en este trabajo hace referencia al número de celdas que forma el *stencil*. La integración temporal se lleva a cabo por medio de dos metodologías: ADER [43] y Runge-Kutta [38]. La primera de ellas se basa en una expansión en desarrollo de Taylor de las derivadas temporales y la sustitución de éstas por derivadas espaciales (procedimiento de Cauchy-Kovalevskaya, [32]); el segundo, en la rutina propia del método de Euler.

El fin último de la evaluación de estos esquemas es obtener criterios aplicables al cálculo numérico de flujos turbulentos reales de aguas poco profundas [3, 30, 33], que es el objetivo principal del proyecto de investigación en el que se enmarca este trabajo. También se valorará la aplicación de estos métodos/criterios a otro tipo de flujos (aerodinámica, aeroacústica, combustión, etc.). Con la intención de estudiar en detalle y de manera básica las características de estos esquemas para la resolución de turbulencia, se necesita un modelo matemático simplificado unidimensional de las ecuaciones que rigen los flujos reales. La ecuación de Burgers sirve como analogía unidimensional de las ecuaciones de Navier-Stokes, pues representa su dinámica convectiva no lineal y ofrece información valiosa sobre algunas de las propiedades de la turbulencia [5, 13, 19]. Utilizando un término fuente de forzamiento adecuadamente diseñado, se puede considerar la ecuación de Burgers válida para describir el movimiento turbulento unidimensional [4, 6, 31]. Las fluctuaciones propias de la turbulencia en el caso unidimensional pueden resultar no tan intuitivas como en los casos tridimensionales. En la simulación 2D mostrada en la Figura 1.3, las fluctuaciones pueden visualizarse mediante un corte transversal de alguno de los vórtices. La Figura 1.3 muestra un ejemplo de corte, donde se puede asociar con facilidad el valor de la mitad de una longitud de onda, $\lambda/2$. Para el caso unidimensional, las fluctuaciones turbulentas pueden visualizarse sobre una condición inicial de valor constante unidad que se deja evolucionar y el cual ha sido perturbado por medio de un término forzamiento. La Figura 1.4 muestra un ejemplo de solución de la ecuación de Burgers modificada en un tiempo arbitrario, en la cual se pueden apreciar estas perturbaciones de diferentes longitudes de onda que no siguen ningún patrón determinado.

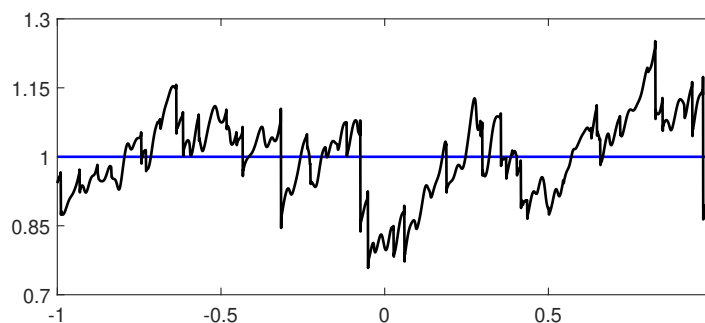


Figura 1.4: Ejemplo de solución de la ecuación de Burgers modificada 1D. Condición inicial (—) y solución en un tiempo arbitrario (—).

Los resultados obtenidos para la ecuación de Burgers serán contrastados en primer lugar con las predicciones teóricas. Se comprobará que la zona de acción del término fuente en la cascada energética se ajuste a la pendiente predicha en la bibliografía [5, 4, 6, 11, 13, 28]; mientras que en la zona inercial del espectro, en la cual no actúa el término fuente, se esperará una pendiente diferente [7, 18, 26, 27, 31]. Una vez aseguradas las características

básicas, se analizarán los espectros energéticos utilizando las herramientas obtenidas en el análisis espectral: k_1^{disp} y k_1^{diff} . Por medio del cálculo del error en los resultados de Burgers, siguiendo un procedimiento concreto propuesto en este trabajo, se puede llegar a una serie de conclusiones acerca del comportamiento y la pertinencia de los esquemas numéricos utilizados en la resolución.

Por último, se lleva a cabo la resolución de un flujo real de lámina libre utilizando las ecuaciones de aguas poco profundas en combinación con un esquema WENO de alto orden siguiendo la metodología ILES, justificada esta decisión por las conclusiones obtenidas en el análisis de las soluciones de Burgers para los esquemas de tipo WENO [30, 33]. En los flujos de aguas poco profundas, la turbulencia es predominantemente horizontal debido al confinamiento geométrico del flujo, pero también existe turbulencia tridimensional que en determinadas condiciones juega un papel fundamental. La aproximación ILES mencionada anteriormente será de aplicación a la componente horizontal de la turbulencia, aunque también será necesario utilizar un modelo de turbulencia que caracterice los efectos de mezcla 3D que las ecuaciones de aguas poco profundas no pueden representar.

La distribución de contenidos de la memoria se describe a continuación. Los Capítulos 2 y 3, comenzando por los aspectos más teóricos del trabajo, presentan, el primero de ellos, una introducción a la teoría de la turbulencia en la que se expandirán los aspectos comentados en esta introducción y, el segundo, una descripción de los métodos de volúmenes finitos y de los esquemas utilizados en los siguientes capítulos. El Capítulo 4, que ocupa la parte central de la memoria, trata el análisis espectral de von Neumann de los esquemas utilizados, tanto el método analítico como el aproximado. La parte final del texto, que consta de los Capítulos 5 y 6, se dedica a la resolución de la ecuación de Burgers, junto con el análisis de estos desde un punto de vista turbulento haciendo uso de los datos del análisis espectral, y a la resolución de un flujo real de aguas poco profundas. Por último, en el Capítulo 7 se exponen las conclusiones más generales derivadas de la realización del trabajo, así como conclusiones concretas sobre los esquemas numéricos obtenidas de los resultados de la ecuación de Burgers.

Capítulo 2

Introducción a la turbulencia

2.1. Características de los flujos turbulentos

Este capítulo se ha preparado como una síntesis principalmente extraída de [20] y otros textos debidamente citados. Los flujos turbulentos no permiten un estudio analítico. De hecho, la turbulencia no se puede definir con precisión, pero conviene diferenciarlo de lo que podría ser un mero "flujo caótico". Para ello, se explican a continuación una serie de características básicas de los flujos turbulentos.

1. *Aleatoriedad*: los flujos turbulentos tienen apariencia irregular, caótica e impredecible.
2. *No linealidad*: los flujos turbulentos son altamente no lineales. Por un lado, la no linealidad supone el llamado *vortex stretching*, un proceso relevante que permite el mantenimiento de la vorticidad en los flujos turbulentos tridimensionales. Por otro lado, supone un aumento del número adimensional que caracteriza los flujos turbulentos: el número de Reynolds. Este parámetro es utilizado para clasificar flujos como turbulentos o laminares cuando toma valores altos o bajos respectivamente, midiendo la importancia relativa de los mecanismos de convección, representado por la velocidad del flujo u , y los mecanismos de difusión, representados por la viscosidad cinemática ν . El número Re viene dado por

$$Re = \frac{uD}{\nu}, \quad (2.1)$$

donde D es una dimensión característica del flujo.

3. *Viscosidad*: los flujos turbulentos se caracterizan por una tasa de difusión de momento y calor rápida, debido a la mezcla macroscópica de las partículas fluidas.
4. *Vorticidad*: la turbulencia está repleta de vorticidad fluctuante, que se manifiesta en la formación de estructuras coherentes, las cuales mantienen su identidad a lo largo del tiempo y que aparecen de manera reiterada adquiriendo aproximadamente la misma forma [10]. Estas estructuras se denominan *vórtices* y abarcan un rango amplísimo de escalas de dimensión: desde la anchura de la región que contiene el flujo turbulento hasta escalas del orden de los milímetros.
5. *Disipación*: el proceso de *vortex stretching* transfiere la energía de los vórtices de más grandes escalas a los de las más pequeñas y es en éstas en las que se produce la disipación total de la energía en forma de calor, debido a la viscosidad molecular.

Un flujo aleatorio no cumple todas estas características.

2.2. Correlación y espectro

Sea $u(\mathbf{x}, t)$ una variable medida en un flujo turbulento. Se suponen dos medidas de la misma variable separadas por una distancia \mathbf{x} en un tiempo t , tal que $u(\mathbf{x}_0, t)$ y $u(\mathbf{x}_0 + \mathbf{x}, t)$. La correlación entre ambas variables, si el campo es espacialmente homogéneo, sólo depende de la distancia \mathbf{x} y viene dada por

$$R(\mathbf{x}) = \overline{u(\mathbf{x}_0, t)u(\mathbf{x}_0 + \mathbf{x}, t)} \quad (2.2)$$

Se puede definir el espectro energético como la transformada de Fourier de la correlación

$$E(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{2/3}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (2.3)$$

donde la correlación se puede calcular como la transformada inversa de Fourier como sigue

$$R(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} E(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (2.4)$$

donde $d\mathbf{k} = dk_1 dk_2 dk_3$.

Si se tiene el caso de $\mathbf{x} = 0$, entonces la correlación queda

$$R(0) = \overline{u(\mathbf{x}_0, t)u(\mathbf{x}_0, t)} = \overline{u^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} E(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (2.5)$$

La cantidad $E(\mathbf{k})d\mathbf{k}$ es la variación de energía en la banda de número de onda $dk_1 dk_2 dk_3$ centrada en \mathbf{k} . De esta manera se entiende que $E(\mathbf{k})$ representa cómo se distribuye la energía en función de la longitud de onda \mathbf{k} .

2.3. Descomposición de Reynolds

Los flujos turbulentos se caracterizan por una apariencia irregular, caótica e impredecibles; están llenos de ruido. Es por ello conveniente adoptar la descomposición de Reynolds [2], según la cual se define la variable de interés instantánea como

$$\tilde{u}_i = U_i + u_i, \quad (2.6)$$

donde U_i es un promedio temporal que viene dado por

$$U_i = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \tilde{u}_i dt, \quad (2.7)$$

y donde u_i es la fluctuación en torno a ese promedio, que cumple que su promedio temporal se anula

$$\bar{u}_i = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} u_i dt = 0. \quad (2.8)$$

Teniendo en cuenta estas dos definiciones, los balances de la energía cinética tanto del flujo promedio como del flujo turbulento son según [20]

$$\begin{aligned}
 \frac{D}{DT} \left(\frac{1}{2} U_i^2 \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{P U_j}{\rho_0} + 2\nu U_i E_{ij} - \overline{u_i u_j} U_i \right) \\
 &\quad \text{transporte} \\
 &\quad - \frac{2\nu E_{ij} E_{ij}}{\text{disipación viscosa}} + \frac{\overline{u_j u_i} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}}{\text{pérdida por turbulencia}} - \frac{g}{\rho_0} \overline{\rho} U_3 \\
 &\quad \text{pérdida por energía potencial} \\
 &\quad (2.9) \\
 \frac{D}{DT} \left(\frac{1}{2} u_i^2 \right) &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\overline{\rho u_j}}{\rho_0} + \frac{1}{2} \overline{u_i^2 u_j} - 2\nu \overline{u_i e_{ij}} \right) \\
 &\quad \text{transporte} \\
 &\quad + \frac{g \alpha w T'}{\text{producción flotante}} - \frac{\overline{u_j u_i} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}}{\text{producción cortante}} - \frac{2\nu \overline{e_{ij} e_{ij}}}{\text{disipación viscosa}}
 \end{aligned}$$

No se va a explicar en detalle cada uno de los términos, pero sí conviene una breve descripción de sus contribuciones a la variación de la energía.

Los primeros tres términos a la derecha de las igualdades representan el transporte de la energía cinética. Pueden redistribuir la energía de una región a otra, pero no la generan ni la disipan. El resto de términos sí que actúan como sumideros o fuentes energéticas.

El término en el que reside el interés, que supone la transferencia de energía del flujo promedio al flujo turbulento, es el quinto de ambas ecuaciones

$$\pm \overline{u_j u_i} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}. \tag{2.10}$$

Se calcula como el producto de la velocidad de deformación promedio $\frac{\partial U_i}{\partial x_j}$ y el esfuerzo turbulento $\overline{u_j u_i}$, también denominado tensor de esfuerzos de Reynolds. Si éste se representa en sus componentes cartesianas $\mathbf{u} = (u, v, w)$ tiene la forma

$$\begin{bmatrix} \overline{u^2} & \overline{uv} & \overline{uw} \\ \overline{uv} & \overline{v^2} & \overline{vw} \\ \overline{uw} & \overline{vw} & \overline{w^2} \end{bmatrix} \tag{2.11}$$

Se trata de un tensor simétrico en cuya diagonal se encuentran los esfuerzos normales y fuera de ella, los esfuerzos cortantes. En el caso de tener unas fluctuaciones turbulentas isotrópicas todos los elementos de fuera de la diagonal se anularán, teniendo además $\overline{u^2} = \overline{v^2} = \overline{w^2}$. Esto, como se verá más adelante, presenta unas consecuencias relevantes en la generación y transmisión de la turbulencia.

El producto de ambas cantidades resulta negativo en flujos cortantes, de manera que el término adquiere un valor negativo en la ecuación de balance energético del flujo promedio y positivo en la del turbulento. Supone, por lo tanto, una pérdida de energía cinética promedio y una ganancia en energía cinética turbulenta. Se le llama debido a ello producción cortante de turbulencia.

2.4. Producción de turbulencia y cascada energética

Estructuras turbulentas como los vórtices son transportadas por el flujo promedio que asimismo las alimenta, como se acaba de describir. Sin embargo, existe una fuerte dependencia de estos vórtices con su escala que determina su interacción con el flujo.

Los vórtices de mayor escala son anisotrópicos, puesto que *conocen* la dirección del esfuerzo promedio o el gradiente de densidades de su entorno. En un campo totalmente isotrópico las componentes fuera de la diagonal del tensor de esfuerzos de Reynolds (2.11) se anulan, haciendo también cero el término de producción cortante de turbulencia de las ecuaciones (2.9). De esta manera no se puede extraer energía del flujo promedio, así que la turbulencia requiere anisotropía para mantenerse contra la disipación viscosa que se da en los vórtices de menor escala, que reciben la energía de los de mayor escala. Este proceso de transferencia de energía turbulenta se denomina **cascada energética** se lleva a cabo mediante el llamado *vortex stretching* [42].

Los vórtices más pequeños son advectados en los campos de velocidades de los vórtices más grandes, de manera que no interactúan ni con estos mayores ni con el flujo promedio. En otras palabras, dejan de *conocer* la dirección que lleva el flujo.

Las escalas de estos vórtices más pequeños dependen de dos parámetros relevantes para las escalas pequeñas sugeridos por Kolmogorov en 1941 [18]: la tasa ϵ al cual la energía tiene que ser disipada por los vórtices y la viscosidad cinemática ν que dispersa los gradientes de velocidad. La tasa de disipación es del orden de

$$\epsilon \sim \frac{u'^3}{l}, \quad (2.12)$$

donde u' es una escala típica de las fluctuaciones del flujo y l es una escala típica de longitud de los vórtices grandes.

De esta manera, a través de un análisis dimensional, se llega a la definición de las escalas de disipación llamadas microescalas de Kolmogorov

$$\lambda_0 = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}. \quad (2.13)$$

Una disminución en la magnitud de la viscosidad ν disminuye a su vez las escalas disipativas.

2.5. Espectro de la turbulencia en el rango inercial

Como se ha visto, $E(\mathbf{k})$ representa la energía cinética turbulenta en función de \mathbf{k} . Si la turbulencia es isotrópica entonces se vuelve independiente de la orientación del número de onda, $E = E(k)$, de manera que puede entenderse el tamaño de los vórtices como k^{-1} . La correlación será

$$R(k) = \overline{u^2} = \int_0^\infty E(k) dk. \quad (2.14)$$

Interesa conocer la forma de $E(k)$ en el rango que sea isotrópico. Para lo cual hay que encontrar dicho rango.

En escalas pequeñas, representadas por $k \gg l^{-1}$ (rango de equilibrio), no hay relación directa entre la turbulencia y el movimiento de los vórtices grandes, puesto que las escalas pequeñas han sido generadas por una larga serie de pasos pequeños en los que se pierde información en cada paso. Es por ello que el espectro en estos números de onda grandes es prácticamente isotrópico.

En números de onda en el entorno de $k \simeq l^{-1}$ se produce un pico de producción de energía; y la disipación se manifiesta con una caída pronunciada del espectro cuando $k > \lambda_0^{-1}$.

Se denomina rango inercial (subrango del rango de equilibrio) al que abarca aquellas escalas menores que las escalas de producción y mayores que las de disipación: $l^{-1} \ll k \ll \lambda_0^{-1}$, en

el cual se da la transferencia de energía debida únicamente a las fuerzas inerciales. En este rango la producción y la disipación son muy pequeñas. Queda entonces saber cómo es E en el rango inercial.

En el rango inercial el espectro depende de la tasa de disipación y del número de onda:

$$E = E(k, \epsilon)$$

Existe la dependencia con ϵ , porque, a pesar de que la disipación en este rango es pequeña, esta energía se transfiere a través de las escalas que abarca el rango.

A la forma explícita de E se llega por medio de un análisis dimensional. Sus unidades son

$$[E] = \frac{L^3}{T^2}, \tag{2.15}$$

y las de sus variables de dependencia

$$[\epsilon] = \frac{L^2}{T^3} \quad [k] = \frac{1}{L} \tag{2.16}$$

Así que se llega a la ley de Kolmogorov de $-5/3$ que establece

$$E = A\epsilon^{2/3}k^{-5/3}, \tag{2.17}$$

en $l^{-1} \ll k \ll \lambda_0^{-1}$. La constante A se ha determinado por medios experimentales para todos los flujos turbulentos como $A \simeq 1.5$.

Toda la descripción anterior sobre el rango inercial, así como esta nueva pendiente dada por la ley de Kolmogorov se pueden ver a simple vista en la Figura 2.1, que representa la cascada energética muestra la dependencia del espectro energético con el número de onda en escala logarítmica.

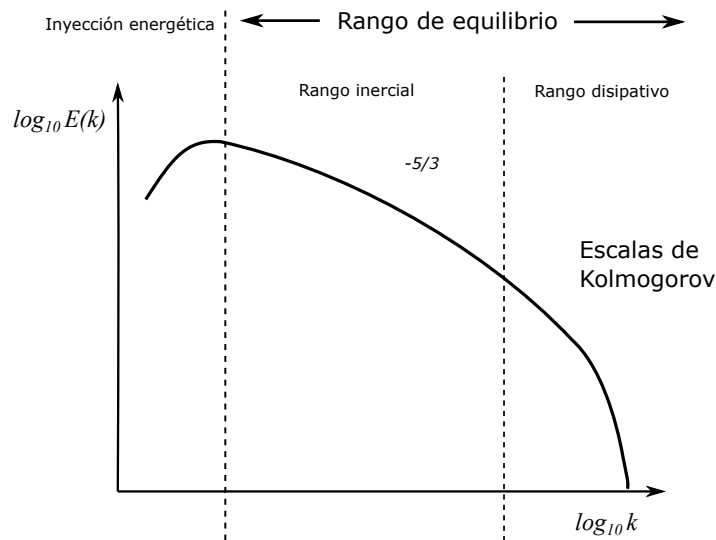


Figura 2.1: Cascada energética en la que se muestra la inyección energética, el rango inercial, junto con la ley de Kolmogorov, y el disipativo.

2.6. Introducción a la simulación de la turbulencia

La dinámica de fluidos computacional (CFD) trata de resolver el problema de la turbulencia por medio de las ecuaciones de Navier-Stokes, conformadas por un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que gobiernan los flujos turbulentos en el medio continuo. Existen diferentes maneras de afrontar este cálculo, de las cuales la más evidente consiste en

resolver de forma directa las ecuaciones, que recibe el nombre de cálculo numérico directo (DNS, *direct numerical simulation*). Los flujos turbulentos contienen fluctuaciones en un amplio rango de números de onda, sin una clara separación entre escalas. La coexistencia de estas fluctuaciones acopladas en todas las escalas supone una gran dificultad para la metodología DNS, puesto que ha de tener en cuenta todas las escalas del movimiento, que abarcan desde las más grandes (determinadas por los contornos del dominio físico y las periodicidades) hasta las más pequeñas (correspondientes a las escalas de disipación de Kolmogorov).

Volviendo a la cascada energética, DNS comprende todos los números de onda disponibles en el problema de la turbulencia, como se puede apreciar en la Figura 2.2. En un sistema físico, por ejemplo, una atmósfera planetaria, estos amplísimos rangos de escalas que sería deseable resolver cubren desde los miles de kilómetros hasta los milímetros. Por lo tanto, los tamaños de malla necesarios suponen un coste computacional inasequible. En definitiva, a pesar de que las ecuaciones de Navier-Stokes son capaces de describir por entero flujos turbulentos, el cálculo numérico directo, la resolución explícita de todas las escalas, resulta impracticable debido a la enorme cantidad de recursos computacionales que requiere [2, 21].

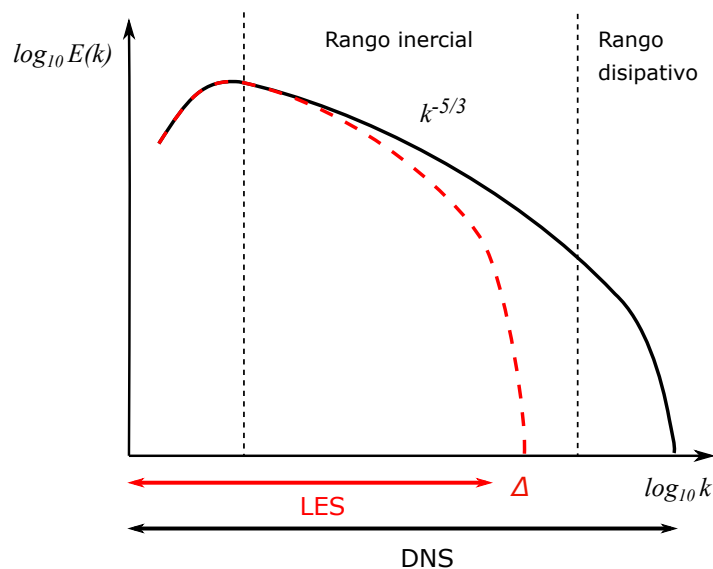


Figura 2.2: Rangos de actuación de distintos modelos de resolución numérica de flujos turbulentos en la cascada energética.

Otro enfoque distinto de calcular numéricamente flujos turbulentos, denominado LES (*large-eddy simulation*), o simulación de grandes torbellinos, consiste en resolver explícitamente las estructuras turbulentas de escalas grandes, que son fundamentales para la transferencia de momento. En la Figura 2.2 se muestra que la metodología LES abarca únicamente los números de onda de menor valor, sin llegar, por lo tanto, a las escalas en las que sucede la disipación energética. Debido a esto, es necesario introducir un modelo que represente, al menos estadísticamente, el intercambio de energía de las escalas mayores con las menores y la mencionada disipación energética. Por medio de la construcción de un filtro, habitualmente llamado modelo SGS (subgrid-scale), se eliminan las fluctuaciones propias de las pequeñas escalas, donde el método numérico es susceptible de producir resultados imprecisos. En la Figura 2.3 se muestra un ejemplo de filtrado, donde Δ representa la escala de menor dimensión resuelta. Un modelo SGS ampliamente utilizado es el propuesto por Smagorinsky [40], en el cual la viscosidad viene caracterizada por la escala Δ . Algunos métodos numéricos solucionan de manera implícita el problema de las pequeñas escalas para los métodos LES. Estos nuevos métodos, denominados ILES (*implicit LES*), resuelven las escalas grandes y no disponen ningún modelo para las pequeñas, puesto que la disipación numérica es de tal magnitud que

elimina sus fluctuaciones.

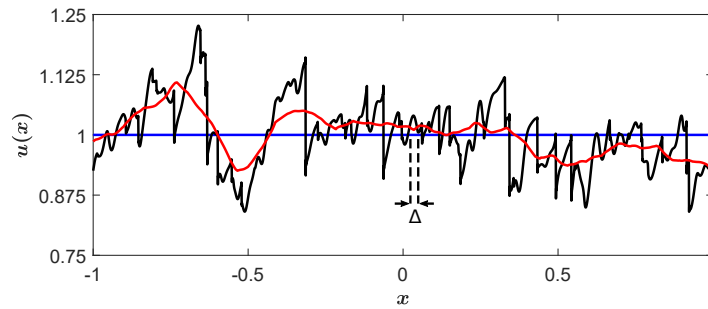


Figura 2.3: Ejemplo de modelo de filtrado SGS sobre una señal $u(x)$ (—) para longitudes de onda menores que Δ (—).

Un enfoque totalmente diferente a los anteriores es el propuesto por el método RANS (Reynolds averaged Navier-Stokes), cuyo punto de partida es la descomposición de Reynolds de las variables del flujo en promedio y fluctuación, ecuación (2.6). Esta descomposición, aplicada a las ecuaciones de Navier-Stokes, conduce al tensor de estrés de Reynolds, ecuación (2.11), que requiere un modelo de viscosidad. La diferencia fundamental con los métodos DNS, LES e ILES reside en que RANS no resuelve de manera explícita ninguna escala, sino que, por medio de las fluctuaciones en las variables descompuestas, y el mencionado tensor de esfuerzos de Reynolds, se resuelven los fenómenos turbulentos. Debido a ello, no aparece en la Figura 2.2 en ningún rango del espectro de números de onda.

Una de las cuestiones que se plantean en este trabajo trata acerca de si el error introducido por esquemas de alto orden puede actuar como modelo implícito de disipación en las pequeñas escalas. Con este objetivo, se analizarán las soluciones numéricas aportadas por varios esquemas de alto orden tanto en el tiempo como en el espacio para comprobar si pueden clasificarse como métodos ILES. En la parte final del trabajo se plantea la resolución de un flujo real de aguas poco profundas. Este caso, a pesar de contar con la naturaleza esencialmente bidimensional de las aguas poco profundas, requiere la consideración de ciertos fenómenos tridimensionales. Por lo tanto, el método utilizado, denominado *depth-averaged LES*, resuelve la turbulencia horizontal (grandes vórtices, estructuras coherentes en 2D) y modela las escalas pequeñas (turbulencia tridimensional) mediante un modelo algebraico de turbulencia que introduce el efecto de la mezcla turbulencia tridimensional en el flujo resuelto.

Capítulo 3

Esquemas numéricos, volúmenes finitos y propiedades

Las leyes de conservación hiperbólicas están modeladas por ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (PDE) generalmente no lineales que no se pueden resolver de manera analítica. Una de las técnicas más habituales para computar su solución mediante métodos numéricos se hace por medio de la discretización del dominio computacional en celdas de volumen. En estas celdas las ecuaciones originales en derivadas parciales pueden ser integradas y convertidas en sistemas algebraicos de ecuaciones. La solución aproximada del sistema PDE original está conformada por un conjunto de valores promedio en las celdas que resultan de la integración de las variables conservadas en éstas. Éste es el denominado **método de volúmenes finitos**.

Sea el siguiente sistema un problema de valores iniciales y de contorno

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PDEs: } \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{U}) = \mathbf{S} \\ \text{IC: } \mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) = \mathring{\mathbf{U}}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \text{BC: } \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}_{\partial\Omega}(\mathbf{x}, t) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{array} \right. \quad (3.1)$$

definido en el dominio $\Omega \times [0, T]$ con $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ y $T \in \mathbb{R}^+$. EL dominio espacial se discretiza en N celdas volumétricas, definidas como $\Omega_j \subset \Omega$, tal que $\Omega = \bigcup_{j=1}^N \Omega_j$. El volumen contenido en cada celda se calcula como

$$\vartheta_j = \int_{\Omega_j} d\Omega_j \quad j = 1, \dots, N \quad (3.2)$$

En cada celda, Ω_j , para un tiempo $t^n = n\Delta t$, las variables conservadas se definen como promedios

$$\mathbf{U}_j^n = \frac{1}{\vartheta_j} \int_{\Omega_j} \mathbf{U}(\mathbf{x}, t^n) d\Omega_j \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.3)$$

Supuestas la condiciones iniciales $\mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) = \mathring{\mathbf{U}}(\mathbf{x})$, se integra (3.1) en cada celda Ω_j como sigue

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{1}{\vartheta_j} \left(\int_0^{\Delta t} \int_{\partial\Omega_j} \mathbf{E}(\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)) \hat{\mathbf{n}} d\Gamma_j dt + \int_0^{\Delta t} \int_{\Omega_j} \mathbf{S}(\mathbf{U}(\mathbf{x}, t), \mathbf{x}, t) d\Omega_j dt \right) \quad (3.4)$$

El promedio en la celda en el tiempo t^{n+1} , denotado por \mathbf{U}_j^{n+1} , se puede calcular explícitamente a partir del promedio en t^n además de una aproximación de la integral de los flujos a

través de $\partial\Omega_j$ y la contribución del término fuente.

3.1. Método de Godunov

En 1959 Godunov [14] desarrolló un esquema numérico conservativo basado en volúmenes finitos para resolver las ecuaciones de Euler de la dinámica de gases en presencia de ondas de choque. Este método, aunque de primer orden tanto en tiempo como en espacio, puede ser utilizado como esquema base para desarrollar métodos de alto orden. Esta extensión se puede realizar, como se verá más adelante, mediante el método ADER.

Se considera el caso particular unidimensional de (3.1)

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PDEs: } \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{S} \\ \text{IC: } \mathbf{U}(x, 0) = \mathring{\mathbf{U}}(x) \\ \text{BC: } \mathbf{U}(a, t) = \mathbf{U}_a(t) \quad \mathbf{U}(b, t) = \mathbf{U}_b(t) \end{array} \right. \quad (3.5)$$

definido en el dominio $[a, b] \times [0, T]$, con $\mathring{\mathbf{U}}(x)$ la condición inicial y $\mathbf{U}_a(t)$ y $\mathbf{U}_b(t)$ las condiciones de contorno izquierda y derecha, respectivamente. En este caso unidimensional, la malla está compuesta por N celdas

$$a = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}} = b \quad (3.6)$$

como se muestra en la Figura 3.1, con las celdas definidas como

$$\Omega_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \quad j = 1, \dots, N \quad (3.7)$$

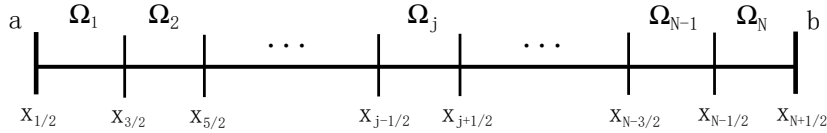


Figura 3.1: Discretización de la malla.

El tamaño de las celdas se deriva de (3.2) y se define como

$$\Delta x_j = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} dx = x_{j+1/2} - x_{j-1/2} \quad j = 1, \dots, N. \quad (3.8)$$

Dentro de cada celda, las cantidades conservadas en el tiempo t^n se definen como los siguiente promedios

$$\mathbf{U}_j^n = \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \mathbf{U}(x, t^n) dx \quad j = 1, \dots, N, \quad (3.9)$$

La integración del sistema lineal de leyes conservativas descrito en (3.4) conduce a

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_j^{n+1} &= \mathbf{U}_j^n - \frac{1}{\Delta x_j} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_{j+\frac{1}{2}}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_{j-\frac{1}{2}}, t)) dt \right) \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta x_j} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S}(\mathbf{U}(x, t), x, t) dx dt, \end{aligned} \quad (3.10)$$

con $t^{n+1} = t^n + \Delta t$. Es posible definir los flujos numéricos como

$$\mathbf{F}_{j+\frac{1}{2}}^- \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_{j+\frac{1}{2}}, t)) dt \quad \mathbf{F}_{j-\frac{1}{2}}^+ \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_{j-\frac{1}{2}}, t)) dt, \quad (3.11)$$

Si se considera una aproximación explícita de la integración temporal de los flujos físicos en las fronteras de las celdas, se pueden expresar en términos de los dos promedios contiguos en $t = t^n$ como $\mathbf{F}_{j+\frac{1}{2}}^- = \mathbf{F}_{j+\frac{1}{2}}^-(\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n)$. Equivalentemente, el término fuente

$$\mathbf{S}_j \approx \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathbf{S}(\mathbf{U}(x, t), x, t) dx dt, \quad (3.12)$$

se puede expresar en forma explícita como $\bar{\mathbf{S}}_j = \bar{\mathbf{S}}_j(\mathbf{U}_j^n, x_j, t^n)$, haciendo posible escribir (3.10) como la siguiente fórmula explícita de actualización

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_j} \left(\mathbf{F}_{j+\frac{1}{2}}^- - \mathbf{F}_{j-\frac{1}{2}}^+ \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x_j} \bar{\mathbf{S}}_j \quad (3.13)$$

que representa el esquema numérico de Godunov.

3.2. El problema de Riemann

En cada interfaz $j + 1/2$, los flujos numéricos (3.11) se pueden calcular localmente resolviendo un problema de valores iniciales (IVP) compuesto por un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y una condición inicial constante a trozos, como se muestra en la Figura 3.2.

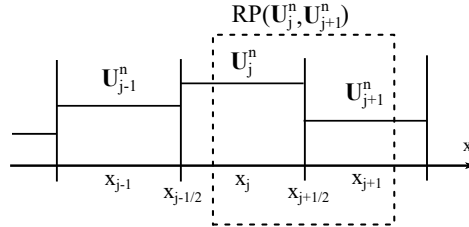


Figura 3.2: Región colindante a la celda Ω_j y representación de datos definidos a trozos, mostrando un problema de Riemann (RP) en $x_{j+1/2}$, al que se refiere como $RP(\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n)$.

El problema a resolver en la pared x_{j+1} se define como

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PDEs: } \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{S} \\ \text{IC: } \mathbf{U}(x, t^n) = \begin{cases} \mathbf{U}_j^n & x < x_{j+1/2} \\ \mathbf{U}_{j+1}^n & x > x_{j+1/2} \end{cases} \end{array} \right. \quad (3.14)$$

dentro del dominio $[x_{j+1/2} - \Delta x/2, x_{j+1/2} + \Delta x/2] \times [t^n, t^n + \Delta t]$. El problema (3.14) se denomina problema de Riemann, en la pared $x_{j+1/2}$, $RP(\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n)$ [32].

Puede darse el caso de que las condiciones a ambos lados de la pared no vengan dadas por datos constantes sino por polinomios definidos a trozos (junto con sus derivadas). Estos problemas se denominan problemas de Riemann derivativos (DRP). En tales circunstancias la solución contendrá un término líder dado por el equivalente problema de Riemann con datos constantes y el resto de términos de mayor orden se resolverán como diferentes problemas de Riemann para cada derivada [32, 43].

3.3. Ecuaciones lineal advectiva 1D y de Burgers 1D

Este trabajo considera dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales unidimensionales para llevar a cabo el análisis de dispersión y difusión de von Neumann se utiliza la ecuación lineal advectiva 1D por ser ésta lineal (Capítulo 4); en segundo lugar, se analizan las características de las soluciones de la ecuación de Burgers 1D (Capítulo 5). Se aplica a continuación lo detallado en las secciones anteriores sobre estas dos ecuaciones.

Ambas ecuaciones se pueden describir de la siguiente manera general y homogénea

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u(x, t))}{\partial x} = 0, \quad (3.15)$$

donde el flujo $f(u(x, t))$ determina de cuál de ellas se trata

$$f(u(x, t)) = \begin{cases} a \cdot u(x, t), & a = cte & \text{Ecuación lineal advectiva} \\ \frac{u(x, t)^2}{2} & & \text{Ecuación de Burgers} \end{cases}. \quad (3.16)$$

La integración en el volumen de control x_j de las ecuaciones lineal advectiva y de Burgers se lleva a cabo por medio de la forma general (3.15), como sigue

$$\begin{aligned} & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{\partial u}{\partial t} dx dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \frac{\partial f}{\partial x} dx dt = 0 \\ \Rightarrow & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u dx dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta x} [f_{j+1/2} - f_{j-1/2}] dt = 0 \\ \Rightarrow & \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial}{\partial t} \bar{u}_j dt + \frac{1}{\Delta x} [\tilde{f}_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n] = 0 \\ \Rightarrow & \frac{1}{\Delta} [\bar{u}_j^{n+1} - \bar{u}_j^n] + \frac{1}{\Delta x} [\tilde{f}_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n] = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

La fórmula de actualización explícita es

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\tilde{f}_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n] = 0. \quad (3.18)$$

En adelante, por mayor simplicidad, a la variable de interés promediada espacialmente en la celda se le denotará sin la barra superior $\bar{u}_j^n \rightarrow u_j^n$. Semejante con el flujo: $\tilde{f}_{j\pm 1/2}^n \rightarrow f_{j\pm 1/2}^n$.

3.4. Extensión a alto orden temporal y espacial

La extensión temporal a altos órdenes se lleva a cabo mediante dos métodos: los métodos tipo ADER, desarrollados por E. F. Toro [43], y los métodos tipos Runge-Kutta, desarrollados por C. Runge y W. Kutta [38]. Los métodos tipo ADER requieren una solución en la interfaz de posición $x_{j+1/2}$ en función del tiempo t , permitiendo calcular los flujos numéricos y construyendo un esquema numérico de orden K tanto en el espacio como en el tiempo. La solución contendrá un término principal, provisto por el problema de Riemann derivativo de orden cero (DRP^0), equivalente a un problema de Riemann constante a trozos, y términos de mayor orden, asociados con k diferentes problemas de Riemann para las derivadas. Cabe mencionar que el problema de Riemann derivativo de orden K puede descomponerse en $K + 1$ problemas de Riemann [32].

Los flujos numéricos en las interfaces de la ecuación (3.18) pueden ser descritos como expansiones de Taylor en el tiempo de la siguiente manera

$$f_{j+1/2}^n = f_{j+1/2}^{(0)} + \sum_{k=1}^K f_{j+1/2}^{(k)} \frac{\Delta t^k}{(k+1)!}$$

$$f_{j-1/2}^n = f_{j-1/2}^{(0)} + \sum_{k=1}^K f_{j-1/2}^{(k)} \frac{\Delta t^k}{(k+1)!},$$
(3.19)

donde $f_{j+1/2}^{(0)}$ y $f_{j-1/2}^{(0)}$ son los términos principales, obtenidos de la resolución de DRP^0 , y donde

$$f_{j+1/2}^{(k)} = \left[\frac{\partial^k}{\partial t^k} f_{j+1/2}(t) \right]_{t=0}$$

$$f_{j-1/2}^{(k)} = \left[\frac{\partial^k}{\partial t^k} f_{j-1/2}(t) \right]_{t=0},$$
(3.20)

son los términos de mayor orden de los flujos numéricos. De esta manera se construye un esquema de orden arbitrario K en el tiempo capaz de resolver los problemas de Riemann derivativos (DRP^K).

El teorema de Cauchy-Kovalevskaya permite establecer relaciones entre derivadas espaciales y temporales [32], de manera que las derivadas temporales pueden expresarse analíticamente a partir de la información provista por el método de reconstrucción espacial. Esto permite sustituir las derivadas temporales de los flujos físicos en $t = 0$ por derivadas espaciales de la variable u

$$\frac{\partial^k f}{\partial t^k} = R^{(k)} \left(\frac{\partial^k u}{\partial x^k}, \frac{\partial^{k-1} u}{\partial x^{k-1}}, \dots, u \right).$$
(3.21)

Otro método de extender la integración temporal a órdenes mayores es mediante el mencionado Runge-Kutta, cuya estrategia es diferente a la de los métodos ADER. Runge-Kutta está basado en la rutina propia del método de Euler, en el cual para completar una actualización temporal es necesario primero resolver una serie de pasos intermedios en forma de ecuaciones dependientes unas de otras. El orden del método viene determinado por el número de ecuaciones que intervienen en cada paso temporal. En el caso concreto de este trabajo se ha dispuesto de un Runge-Kutta de orden 3, cuyas 3 ecuaciones de actualización vienen dadas por

$$u_j^{(1)} = u_j^n + \Delta t \xi(u_j^n)$$

$$u_j^{(2)} = \frac{3}{4}u_j^n + \frac{1}{4}u_j^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \xi(u_j^{(1)})$$

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{3}u_j^n + \frac{2}{3}u_j^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \xi(u_j^{(2)}),$$
(3.22)

donde $\xi(u_j^n) = f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n$.

Las discontinuidades que algunas variables presentan a lo largo del espacio pueden introducir oscilaciones indeseadas en la solución numérica, por lo que es necesaria una adecuada reconstrucción espacial para evitarlas. Para la reconstrucción espacial de los flujos se utilizan dos casos concretos del conjunto de métodos WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) [24]. En estos métodos, los polinomios de bajo orden que forman el conjunto dinámico de celdas denominado *stencil* se combinan de diferentes maneras. Si la combinación se realiza

utilizando los pesos óptimos, la reconstrucción obtenida será puramente lineal, recuperando el método Upwind centrado; a esta estrategia WENO de pesos óptimos la denotaremos como UWC. Esta reconstrucción es idónea para soluciones en regiones suaves. La reconstrucción de pesos óptimos UWC viene dada por

$$u_{j+1/2} = \sum_0^{k-1} \gamma_r u_{j+1/2}^{(r)} = u(x_{j+1/2}) + o(\Delta x^{2k-1}), \tag{3.23}$$

donde γ_r son los pesos óptimos [24, 39].

Si, por otro lado, se combinan los polinomios de bajo orden para formar una reconstrucción descentrada, este método sigue la reconstrucción clásica WENO [24], que es preferible para casos con discontinuidades; en nuestro caso recibirá el nombre de WENO. La reconstrucción viene dada por

$$u_{j+1/2} = \sum_0^{k-1} w_r u_{j+1/2}^{(r)} = u(x_{j+1/2}) + o(\Delta x^{2k-1}), \tag{3.24}$$

donde los coeficientes w_r se calculan como

$$w_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{l=0}^{k-1} \alpha_l} \quad \text{cumpliendo} \quad \sum_{r=0}^{k-1} w_r = 1, \quad w_r \geq 0. \tag{3.25}$$

Los coeficientes α_r se construyen a partir de los pesos óptimos γ_r y del indicador de suavidad β_r propuesto en [24, 39] como sigue

$$\alpha_r = \frac{\gamma_r}{(\beta_r + \epsilon)^2}, \tag{3.26}$$

con ϵ un parámetro pequeño adecuadamente definido. La Figura 3.3 muestra de manera simple la reconstrucción seguida por ambos.

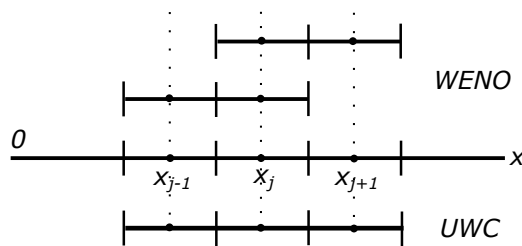


Figura 3.3: *Stencils* utilizados por WENO y UWC.

3.5. Propiedades de los esquemas numéricos

3.5.1. Consistencia, estabilidad y convergencia

La validez y la precisión de un esquema numérico para la resolución de un modelo matemático pueden ser evaluadas cuantitativamente por medio de tres conceptos que cubren diferentes aspectos de las relaciones entre modelos matemáticos analíticos, esquemas numéricos y sus soluciones [16]. Estos tres criterios son la consistencia, la estabilidad y la convergencia:

1. La **consistencia** es una condición sobre el esquema numérico que establece que éste tiene que tender a la ecuación diferencial del modelo cuando los pasos espacial y temporal de la discretización tiendan a cero.

2. La **estabilidad** se encarga de prevenir que el esquema numérico no introduzca errores que crezcan indefinidamente. Además, no decreta ninguna otra condición sobre la ecuación diferencial.

Se considera el error $\bar{\epsilon}_j^n$ en una celda j y un tiempo n como la diferencia entre la solución numérica u_j^n y la solución exacta de la ecuación discretizada \bar{u}_j^n

$$\bar{\epsilon}_j^n = u_j^n - \bar{u}_j^n. \quad (3.27)$$

Puesto que este error tiene que permanecer acotado, la condición puede expresarse como

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\bar{\epsilon}_j^n| \leq K, \quad (3.28)$$

con Δt fijo y K independiente de n .

Si los errores numéricos decrecen con el tiempo se dice que el esquema numérico es estable. Este concepto está estrechamente relacionado con el de difusión numérica, como se verá en la siguiente sección.

3. La **convergencia** es una condición sobre la solución numérica que establece que ésta tiene que tender a la solución exacta cuando los pasos espacial y temporal tiendan a cero. En otras palabras, que la solución se adecue a la del modelo resuelto.

Para ello, se define el error $\tilde{\epsilon}_j^n$ como la diferencia entre la solución numérica u_j^n y la solución exacta de la ecuación analítica $\tilde{u}(j\Delta x, n\Delta t)$

$$\tilde{\epsilon}_j^n = u_j^n - \tilde{u}(j\Delta x, n\Delta t). \quad (3.29)$$

Este error tiene que cumplir la siguiente condición

$$\lim_{\substack{\Delta x \rightarrow 0, \\ \Delta t \rightarrow 0}} |\tilde{\epsilon}_j^n| = 0, \quad (3.30)$$

con valores fijos de la posición $x_j = j\Delta x$ y del tiempo $t^n = n\Delta t$.

Tanto la estabilidad como la convergencia son condiciones que afectan a las soluciones numéricas y que se miden mediante el cálculo de errores distintos. Incluso la consistencia está relacionada con las otras dos, como se establece en el teorema de equivalencia de Lax: para un problema de valores iniciales bien planteado y un esquema de discretización consistente, la estabilidad es la condición necesaria y suficiente para asegurar la convergencia. La demostración del teorema se puede encontrar en [36].

Por lo tanto, para analizar un problema dependiente con el tiempo o de valores iniciales, se deben llevar a cabo dos cometidos:

1. analizar la condición de consistencia. Esto conduce a la determinación del orden de precisión del esquema y su error de truncamiento;
2. y analizar las propiedades de la estabilidad.

Mediante la realización de estas dos tareas se puede asegurar la convergencia sin análisis adicionales.

En esta memoria se trabaja con dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales en 1D: la ecuación lineal advectiva (4.1) y la ecuación de Burgers (5.1). El interés de este trabajo se

centra en la segunda de estas dos tareas anteriores, tema sobre el que se extenderán en mayor profundidad las siguientes secciones. Sin embargo, también resulta necesaria la resolución satisfactoria de la primera de las tareas, la de analizar la condición de consistencia. En el Apéndice A se lleva a cabo este análisis de la condición de consistencia para ambas ecuaciones, donde se estima el orden de convergencia para cinco esquemas diferentes, a saber: FOU, UWC3-RK3, WENO3-RK3, UWC5-RK3 y WENO5-RK3.

3.5.2. Dispersión, difusión y condición CFL.

La **dispersión** es el fenómeno físico propio de las ondas viajando en un medio que relaciona su longitud de onda con su frecuencia. Según éste varias ondas con longitudes de onda diferentes viajan con diferentes velocidades de fase. Se puede dar una **dispersión numérica** (en adelante dispersión) que conduce a una velocidad de fase modificada en la solución numérica respecto a la solución exacta, dependiente de la longitud de onda.

La **difusión** es un fenómeno físico de homogeneización en el que alguna propiedad es transportada debido a la agitación de sus moléculas. Puede suceder, por ejemplo, como resultado de la presencia conjunta de varias sustancias de concentraciones distintas. La agitación molecular tiende a *mezclar* estas sustancias en todas las direcciones siguiendo una proporción con la diferencia de concentraciones iniciales y que tiende a un estado final de mezcla homogénea. También puede ocurrir en fenómenos de conducción en los que entre dos sustancias a diferentes temperaturas sobreviene un intercambio de calor. La conducción de calor o son resultado de la difusión en un fluido.

Existe además un fenómeno análogo de naturaleza no física denominado **difusión numérica** o también **viscosidad numérica** (en adelante difusión) que se introduce en las soluciones como efecto de las aproximaciones numéricas. Este tipo de difusión se manifiesta como una reducción en la magnitud de la solución tras cada paso temporal.

Una manera de evaluar la difusión numérica consiste en calcular el factor de amplificación de solución numérica final respecto a la condición inicial. El caso ideal se corresponde con un factor de amplificación unidad, es decir, en el cual no exista difusión y las amplitudes inicial y final sean iguales. Normalmente el uso de cualquier esquema numérico para resolver una ecuación diferencial introduce siempre una cantidad de difusión numérica; si se puede medir esta cierta cantidad difusiva es posible establecer un criterio para seleccionar entre varios esquemas el menos difusivo. También puede suceder que el factor de amplificación aumente por encima de la unidad, en cuyo caso el esquema dejaría de ser estable, porque no se cumpliría la condición (3.30).

El **criterio del 1%**, [27] [31], determina si la propagación de la solución se lleva a cabo con precisión. Este criterio establece que es necesario que, en el caso de que la dispersión numérica presente un error mayor que un 1%, la difusión numérica sea grande para atenuar las fluctuaciones que portarían un error dispersivo grande.

Es necesario para ello cuantificar estas dos magnitudes mediante un análisis espectral que investiga el número de onda numérico equivalente. El **análisis de von Neumann** [9] es un procedimiento que se sirve del mencionado número de onda equivalente, para comprobar, por medio del número de la dispersión y la difusión, la estabilidad y validez de un esquema numérico. En la siguiente sección se introducirá este método de análisis de manera teórica; asimismo se ilustrará su funcionamiento sobre diferentes tipos de esquemas numéricos (ADER y RK, lineales y no lineales, etc.) por medio de varios ejemplos.

En la Sección 4.3.6 se hace uso del criterio del 1% para comparar dos discretizaciones espaciales diferentes (que más adelante se explicarán en mayor detalle).

Por otro lado, existe además una condición de estabilidad fundamental para la mayoría de los esquemas explícitos relacionada con la difusión numérica. Esta condición, denominada

CFL por Courant, Friedrichs y Levy [8], expresa que la distancia recorrida en un intervalo de tiempo Δt por las perturbaciones propagadas con velocidad a tiene que ser menor que la distancia mínima entre dos puntos de la malla, es decir, Δx .

También se puede expresar como

$$\sigma = a \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1, \quad (3.31)$$

donde $\sigma \in \mathbb{R}$ es el número adimensional de Courant. Esta ecuación expresa que la relación de malla $\Delta t/\Delta x$ tiene que elegirse tal que el dominio de dependencia de la ecuación diferencial ha de estar completamente contenido en el dominio numérico de dependencia de las ecuaciones discretizadas [22]. Es decir, la aproximación u_j^{n+1} debe incluir toda la información con significado físico que determina el comportamiento en el punto j .

La solución numérica no dependerá de Δx o de Δt separadamente, sino que lo hará en el número de Courant. Los cálculos se harán con valores constantes del CFL, de manera que para un Δx dado se tendrán valores proporcionales de la discretización espacial Δt siguiendo la condición (3.31).

Capítulo 4

Análisis espectral de esquemas numéricos

Muchos fenómenos estudiados en la física son descritos total o parcialmente mediante ecuaciones o sistemas de ecuaciones matemáticas diferenciales ordinarias o diferenciales en derivadas parciales.

Algunas de estas ecuaciones no se pueden resolver de manera analítica, así que se requieren herramientas de resolución aproximada tales como los métodos numéricos. Las aproximaciones de estos métodos pueden introducir modificaciones en el resultado que carezcan de significado físico. Cada tipo de esquema empleado puede presentar efectos muy distintos en la solución. Es conveniente por lo tanto conocer y cuantificar las características particulares de la solución numérica para un determinado esquema numérico elegido.

4.1. Aspectos preliminares

4.1.1. Definición del problema de estudio

Es necesario definir el problema de estudio. Se considera la ecuación escalar de transporte lineal

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (4.1)$$

donde $u = u(x, t) \in \mathcal{C} \subseteq \mathbb{R}$ es la variable transportada con velocidad $a \in \mathbb{R}^+$ y donde \mathcal{C} es el subconjunto de valores relevantes de u . Las coordenadas temporal y espacial son t y x , respectivamente. La solución se calculará en el dominio temporal $\Omega \times [0, T]$, donde $T \in \mathbb{R}^+$ es el tiempo de simulación y $\Omega = [x_a, x_b]$ es el dominio espacial, con $x_a, x_b \in \mathbb{R}$. Para evitar cualquier efecto adicional en la solución producido por los contornos, se considerarán condiciones de contorno periódicas, es decir $u(x_a, t) = u(x_b, t)$. La condición inicial dispone de un único modo de oscilación, con número de onda k , y viene dada por

$$u(x, 0) = \hat{u}_k e^{i(kx)}, \quad (4.2)$$

donde

$$\hat{u}_k = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-i(kx)} dx \quad (4.3)$$

es la amplitud del armónico k , con $f(x)$ una función cualquiera. El número de onda se define como

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (4.4)$$

con longitud de onda λ ; y la frecuencia angular como

$$\omega = \frac{2\pi}{T}, \quad (4.5)$$

con T el periodo de la oscilación.

La solución de la ecuación (4.1) para el modo único de oscilación, \hat{u}_k , en (4.4), se puede escribir como

$$u(x, t) = \hat{u}_k e^{ik(x-at)}, \quad (4.6)$$

ya que la ecuación (4.1) representa un transporte lineal con velocidad a , por tanto, la solución será una traslación en x de la condición inicial. Si consideramos la relación $a = \omega/k$, podemos escribir (4.6) como

$$u(x, t) = \hat{u}_k e^{i(kx-\omega t)}. \quad (4.7)$$

Es posible comprobar fácilmente que si la solución en (4.7) se introduce en la Ecuación original (4.1), se obtiene

$$-\omega i \hat{u}_k e^{i(kx-\omega t)} + a k i \hat{u}_k e^{i(kx-\omega t)} = 0,$$

recuperando

$$-\omega i \hat{u}_k e^{i(kx-\omega t)} + a k i \hat{u}_k e^{i(kx-\omega t)} = 0,$$

la relación exacta $a = \omega/k$. Esta relación entre ω y k se denomina no dispersiva, ya que a es constante. Esto quiere decir que la velocidad de propagación de las ondas es independiente de la frecuencia de las mismas. Cuando esto no sucede, tendremos el caso de ondas dispersivas, en las que $a = a(k)$. Estamos interesados en estudiar soluciones numéricas de la Ecuación (4.1), donde la relación $a = a(k)$ vendrá dada por el método numérico que se utilice. En estos casos, la relación entre frecuencia angular y número de onda se escribirá como

$$\tilde{\omega}(\tilde{k}) = \tilde{k} a(\tilde{k}), \quad (4.8)$$

donde $\tilde{k} \in \mathbb{R}$ se denominará número de onda modificado y $\tilde{\omega}(\tilde{k})$ se denominará frecuencia angular modificada. También se puede escribir de forma general como

$$\tilde{\omega} = \xi + i\eta, \quad (4.9)$$

lo que permite definir el número de onda modificado como $\tilde{k} = \text{Re}(\tilde{\omega})/a$, que se puede escribir como $\tilde{k} = \frac{1}{a}\xi$, y la atenuación como $\text{Im}(\tilde{\omega})$, que se reduce a η .

4.1.2. Discretización y límite de muestreo

Es necesario llevar a cabo la discretización del dominio sobre el que actuará el esquema numérico. Se escoge un dominio computacional formado por N celdas, Ω_j , del mismo tamaño, Δx , cuyos posiciones vienen dadas por

$$x_j = \frac{1}{2} \Delta x (2j + 1). \quad (4.10)$$

La discretización temporal se realiza utilizando n intervalos iguales, de magnitud Δt . La aproximación numérica de la solución en un tiempo $t^n = n\Delta t$ y en la posición $x_j = n\Delta x$ se denotará como u_j^n (Figura 4.1).

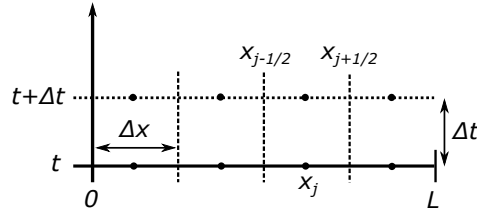


Figura 4.1: Dominio computacional de discretización.

De la misma manera, las posiciones de las paredes serán

$$\begin{aligned} x_{j+1/2} &= x_j + \frac{1}{2}\Delta x \\ x_{j-1/2} &= x_j - \frac{1}{2}\Delta x \end{aligned} \quad (4.11)$$

Con esta discretización, el valor de las condiciones iniciales promediado en cada celda requiere

$$u_j(t = 0) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \hat{u}_k e^{i(kx - \omega t)} \Big|_{t=0} dx = \frac{\hat{u}_k}{jk\Delta x} \left[e^{i(kx_{j+1/2})} - e^{i(kx_{j-1/2})} \right]. \quad (4.12)$$

Por medio de 4.11 se llega a la siguiente formulación

$$u_j(t = 0) = \frac{\hat{u}_k}{k\Delta x/2} e^{ikx_j} \sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right). \quad (4.13)$$

En el caso concreto con el que se trabajará en adelante se dispone para mayor simplicidad la siguiente condición inicial

$$u(x, t = 0) = \sin(kx), \quad (4.14)$$

de manera que la amplitud sea $\hat{u}_k = 1$. Con esto se obtiene la siguiente condición inicial

$$u_j(t = 0) = \frac{1}{k\Delta x} \left[-\cos(kx) \right]_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \quad (4.15)$$

La discretización determinará los valores máximos y mínimos de longitud de onda resolubles que la malla permita representar. Así, la máxima y mínima longitud de onda posible será $\lambda_{max} = 2L$ y $\lambda_{min} = 2\Delta x$, respectivamente. De acuerdo con la definición de k en (4.4), el máximo y mínimo número de onda vendrá dado según el teorema de muestreo de Nyquist-Shannon por $k_{max} = \pi/\Delta x$ y $k_{min} = \pi/L$, respectivamente. Al valor k_{max} también se le denomina frecuencia de Nyquist y representa la frecuencia más alta que se puede resolver para una discretización determinada por un tamaño de celda Δx . En la Figura 4.2 se muestra la relación entre la discretización espacial y los valores máximos y mínimos de frecuencia.

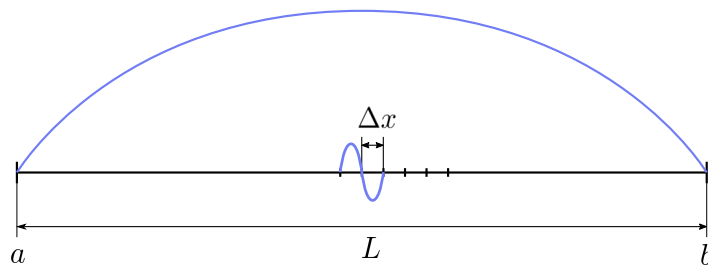


Figura 4.2: Discretización espacial del dominio computacional, mostrando la máxima y mínima longitud de onda.

4.2. Método analítico de Von Neumann

Es posible cuantificar analíticamente la difusión y la dispersión numérica generadas por el esquema numérico utilizando el denominado análisis de von Neumann, siempre que se trate de un esquema lineal. En origen, dicho método fue desarrollado para evaluar la estabilidad de un esquema numérico utilizando un análisis de la propagación de las pequeñas perturbaciones. Las ecuaciones del flujo y del transporte escalar se comportan de un modo lineal en la propagación de las pequeñas perturbaciones. Por tanto, entender cómo los esquemas transportan dichas perturbaciones permite cuantificar en qué medida las disipan (es decir, estimar la magnitud de la difusión numérica) o las amplifican (es decir, comprobar si el esquema es inestable). Además, permite evaluar también la velocidad de propagación de dichas perturbaciones para así estimar la dispersión numérica del esquema.

El análisis de estabilidad de von Neumann, también llamado análisis de Fourier, fue desarrollado por John von Neumann durante la Segunda Guerra Mundial en el Laboratorio Nacional de Los Alamos, financiado por la Comisión de Energía Atómica de los Estados Unidos. El interés en este desarrollo yacía en la posibilidad de saber si un método numérico iba a funcionar adecuadamente sin necesidad de realizar una simulación y esperar a que finalizara, evitando así una metodología “ensayo-error”. En aquella época, la capacidad computacional era muy limitada e incluso las simulaciones más simples podían demorarse demasiado. Hasta el final de la Segunda Guerra Mundial este método permaneció clasificado y fue en 1947 cuando J. Crank y P. Nicholson lo publicaron y salió a la luz [9]. Tras su popularización en la segunda mitad del siglo XX, se considera una herramienta indispensable en el análisis de métodos numéricos [16].

Este método permite calcular la dispersión y la difusión tanto del esquema discreto completo, en el que intervienen la integración temporal y la discretización espacial, como del esquema semidiscreto que cuenta únicamente con la discretización espacial.

4.2.1. Método aplicado al problema semidiscreto

Es posible describir la ecuación (4.1) de manera discreta únicamente en el espacio, según lo que se denomina **método semidiscreto**. El esquema semidiscreto puede analizarse desde el punto de vista de von Neumann para comparar distintos métodos de resolución. La manera matemática de expresarlo es la siguiente

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= -a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \\ \Rightarrow \frac{\partial u_j(t)}{\partial t} &= \mathcal{A}u_j(t), \end{aligned} \tag{4.16}$$

donde $\mathcal{A} = \mathcal{A}(k, a, \Delta x) \in \mathbb{C}$ es el operador semidiscreto. La solución numérica semidiscreta, si tenemos en cuenta $x_j = j\Delta x$, es

$$u(x_j, t) = u_j(t) = \hat{u}_k e^{i(kj\Delta x - \tilde{\omega}t)}. \tag{4.17}$$

Si se introduce esta solución (4.17) en la ecuación semidiscreta (4.16) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_j(t)}{\partial t} &= \mathcal{A}u_j(t) \\ \Rightarrow -i\tilde{\omega}u_j(t) &= \mathcal{A}u_j(t) \\ \Rightarrow \tilde{\omega}u_j(t) &= i\mathcal{A}u_j(t) \end{aligned} \tag{4.18}$$

En este caso, la dispersión y la difusión se calculan a partir de las partes real e imaginaria de la frecuencia angular modificada (4.8). En primer lugar, la dispersión, teniendo en cuenta $\sigma = a\Delta t/\Delta x$, se define como sigue

$$\tilde{k}\Delta x = \frac{Re(\tilde{\omega})}{a}\Delta x = \frac{\xi}{a}\Delta x; \quad (4.19)$$

y la difusión, que se normaliza por k

$$\psi = \frac{Im(\tilde{\omega})}{ak} = \frac{\eta}{ak}. \quad (4.20)$$

Es decir, para encontrar las partes real e imaginaria de la frecuencia angular modificada se ha de aplicar el operador \mathcal{A} sobre la función problema y, posteriormente, multiplicar por el número complejo. A continuación se pone un ejemplo del modo de cálculo.

4.2.2. Ejemplos de método semidiscreto: FOU y UWC3

Se analizan ahora la dispersión y la difusión numérica en función de $k\Delta x$ de un esquema semidiscreto para una discretización espacial *upwind* de primer (first-order *upwind*, FOU) y tercer orden centrada en el espacio (third-order centered *upwind*, UWC3).

El esquema FOU semidiscreto, haciendo uso de la ecuación (4.16), viene dado por la siguiente expresión

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} = -\frac{a}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n), \quad (4.21)$$

con $a < 0$.

Se introduce la solución semidiscreta (4.17) para hallar la forma explícita de $\tilde{\omega}$ como sigue

$$\begin{aligned} -i\tilde{\omega}\hat{u}_k e^{i(kj\Delta x - \tilde{\omega}n\Delta t)} &= -\frac{a}{\Delta x} [\hat{u}_k e^{i(kj\Delta x - \tilde{\omega}n\Delta t)} - \hat{u}_k e^{i(k(j-1)\Delta x - \tilde{\omega}n\Delta t)}] \\ \Rightarrow \tilde{\omega} &= -i\frac{a}{\Delta x} [1 - e^{-ik\Delta x}] \end{aligned} \quad (4.22)$$

Su forma binómica es

$$\tilde{\omega} = \frac{a}{\Delta x} \text{sen}(k\Delta x) + i\frac{a}{\Delta x} (\cos(k\Delta x) - 1). \quad (4.23)$$

Por otro lado, el esquema UWC3 semidiscreto viene dado por

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} = -\frac{a}{\Delta x} \left(\frac{1}{3}u_{j+1}^n + \frac{1}{2}u_j^n - u_{j-1}^n + \frac{1}{6}u_{j-2}^n \right). \quad (4.24)$$

Introduciendo la solución semidiscreta (4.17) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_j}{\partial t} &= -\frac{a}{\Delta x} \left(\frac{1}{3}u_{j+1}^n + \frac{1}{2}u_j^n - u_{j-1}^n + \frac{1}{6}u_{j-2}^n \right) \\ \Rightarrow -i\tilde{\omega}u_j^n &= -\frac{a}{\Delta x} \left(\frac{1}{3}u_j^n e^{ik\Delta x} + \frac{1}{2}u_j^n - u_j^n e^{-ik\Delta x} + \frac{1}{6}u_j^n e^{-i2k\Delta x} \right) \\ \Rightarrow \tilde{\omega} &= -i\frac{a}{\Delta x} \left(\frac{1}{3}e^{ik\Delta x} + \frac{1}{2} - e^{-ik\Delta x} + \frac{1}{6}e^{-i2k\Delta x} \right) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Su forma binómica es

$$\tilde{\omega} = \frac{a}{\Delta x} \left(\frac{4}{3} \sin(k\Delta x) - \frac{1}{6} \sin(2k\Delta x) \right) + i \frac{a}{\Delta x} \left(-\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \cos(k\Delta x) - \frac{1}{6} \cos(2k\Delta x) \right) \quad (4.26)$$

Se recogen en la Tabla 4.1 las relaciones de dispersión y difusión de ambos esquemas, basadas en las ecuaciones (4.19) y (4.20).

Esquema	$\tilde{k}\Delta x$	$\frac{\eta/k\Delta x}{\cos(k\Delta x) - 1}$
FOU	$\sin(k\Delta x)$	$\frac{k\Delta x}{\cos(k\Delta x) - 1}$
UWC3	$\frac{4}{3} \sin(k\Delta x) - \frac{1}{6} \sin(2k\Delta x)$	$-\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \cos(k\Delta x) - \frac{1}{6} \cos(2k\Delta x)$

Tabla 4.1: relaciones de dispersión y de difusión de los esquemas semidiscretos FOU y UWC3.

En la Figura 4.3 se muestra la evolución de las relaciones recogidas en la tabla anterior. La dispersión se mantiene cercana a la dispersión ideal casi hasta la unidad, luego aumenta para valores en torno a $k\Delta x = \pi/2$ y disminuye de nuevo hasta $k\Delta x = \pi$.

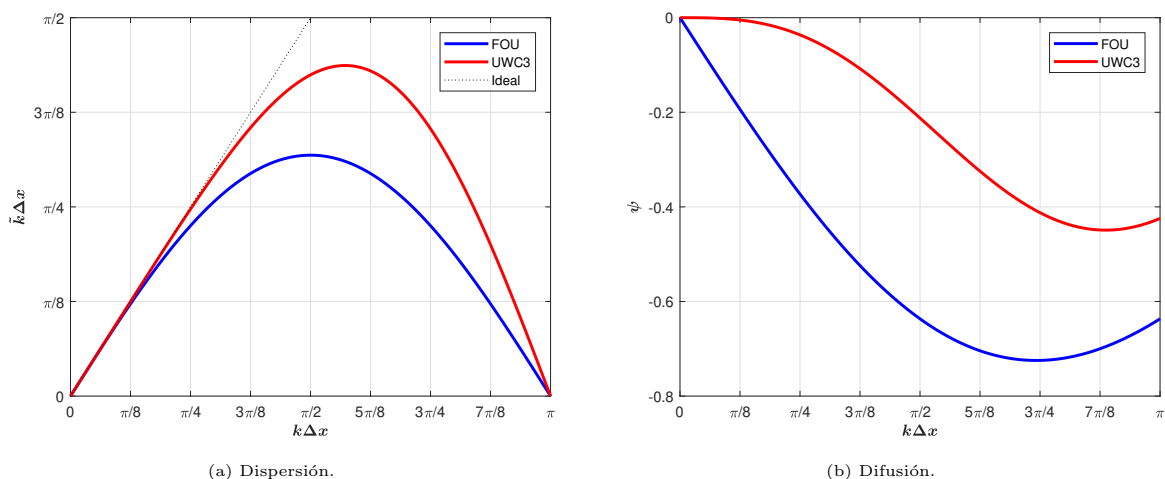


Figura 4.3: Análisis de dispersión y difusión del esquema semidiscreto UWC3.

4.2.3. Método aplicado al problema completamente discreto

En el caso de llevar a cabo una discretización completa. Tanto en espacio como en tiempo, hay que tener en cuenta las relaciones $x_j = j\Delta x$ y $t^n = n\Delta t$ en la solución (4.7) y se obtiene

$$u(x_j, t^n) = u(x, t) = \hat{u}_k e^{i(kj\Delta x - \tilde{\omega}n\Delta t)}. \quad (4.27)$$

Por lo tanto, la solución en el siguiente tiempo t^{n+1} será

$$u_j^{n+1} = \hat{u}_k e^{i(kj\Delta x - \tilde{\omega}n\Delta t)} e^{-i\tilde{\omega}\Delta t}, \quad (4.28)$$

haciendo evidente la relación

$$u_j^{n+1} = e^{-i\tilde{\omega}\Delta t} u_j^n. \quad (4.29)$$

Esta relación permite expresar el esquema numérico de la siguiente manera

$$u_j^{n+1} = \mathcal{M} u_j^n, \quad (4.30)$$

donde $\mathcal{M} = \mathcal{M}(a, \Delta t, k\Delta x) \in \mathbb{C}$ es el operador discreto en forma compleja. Utilizando la definición del número CFL, $\sigma = a\Delta t/\Delta x$, dicho operador \mathcal{M} se puede escribir de manera compacta en términos del número de onda y el CFL solamente, es decir $\mathcal{M} = \mathcal{M}(k\Delta x, \sigma)$. De las ecuaciones (4.29) y (4.30) obtenemos la siguiente equivalencia

$$e^{-i\tilde{\omega}\Delta t} \triangleq \mathcal{M}. \quad (4.31)$$

Utilizando los resultados previos (ecuaciones (4.29)-(4.31)) se puede obtener la siguiente relación de recurrencia

$$u_j^{n+1} = \mathcal{M} \cdot (\mathcal{M})^{n-1} u_j^0 = (\mathcal{M})^n u_j^0, \quad (4.32)$$

donde $u_j^0 = u(x_j, 0) = \hat{u}_k e^{ikx_j}$. Esta relación muestra que en cada paso de tiempo la solución se modifica mediante el operador \mathcal{M} y que el operador equivalente a la aplicación del esquema de actualización durante n pasos de tiempo es igual al producto de dichos operadores n veces, $(\mathcal{M})^n$. De esto se deriva que, en el caso de tener un sistema de ecuaciones en lugar de una única ecuación M sería una matriz y, por lo tanto, la estabilidad de este sistema vendría a ser controlada por los valores propios de \mathcal{M} .

Si se utiliza la expresión de la frecuencia angular modificada de la ecuación (4.9) en la definición de \mathcal{M} en (4.31), tenemos

$$\mathcal{M} = e^{-i(\xi+i\eta)\Delta t}, \quad (4.33)$$

lo que permite reescribir \mathcal{M} como

$$\mathcal{M} = |\mathcal{M}| e^{-i\theta}, \quad (4.34)$$

donde $|\mathcal{M}| = e^{\eta\Delta t}$ es la magnitud de \mathcal{M} y $\theta = \xi\Delta t$ es la fase de \mathcal{M} . La magnitud de \mathcal{M} es un indicador de la atenuación de la solución numérica, ya que

$$|\mathcal{M}| = \left| \frac{u_j^{n+1}}{u_j^n} \right|, \quad (4.35)$$

donde es fácil darse cuenta de que, tras n pasos de tiempo, la atenuación de la solución vendrá dada por $(|\mathcal{M}|)^n$. Por otro lado, el desfase entre la solución numérica y la analítica se puede cuantificar utilizando la fase de \mathcal{M}

$$\theta = \text{argumento} \left(\frac{u_j^{n+1}}{u_j^n} \right), \quad (4.36)$$

pudiendo observar que tras n pasos de tiempo, será $n\theta$.

Al igual que en el caso semi-discreto, es posible obtener la expresión del número de onda modificado como $\tilde{k} = \text{Re}(\tilde{\omega})/a$. Será necesario adimensionalizar el número de onda con Δx para poder obtener una expresión que solamente dependa del producto $k\Delta x$ y de σ . Así, la relación anterior la expresaremos como $\tilde{k}\Delta x = \xi\Delta x/a$, que se puede escribir también como

$$\tilde{k}\Delta x = \theta \frac{\Delta x}{a\Delta t}. \quad (4.37)$$

Utilizando ahora el inverso del número CFL, $\Delta x/a\Delta t = 1/\sigma$, es posible expresar el producto $\tilde{k}\Delta x$ como

$$\tilde{k}\Delta x(k\Delta x, \sigma) = \frac{1}{\sigma} \theta(k\Delta x, \sigma), \quad (4.38)$$

que solo depende de $k\Delta x$ y de σ .

4.2.4. Ejemplo de método discreto: UWC3-ADER

Se considera un esquema con discretización espacial *upwind* de tercer orden (UWC3) e integración temporal ADER de primer, segundo y tercer orden. El desarrollo de este esquema se encuentra en el apéndice B. En la Figura 4.4 se muestran las representaciones de las relaciones (B.12)-(B.14).

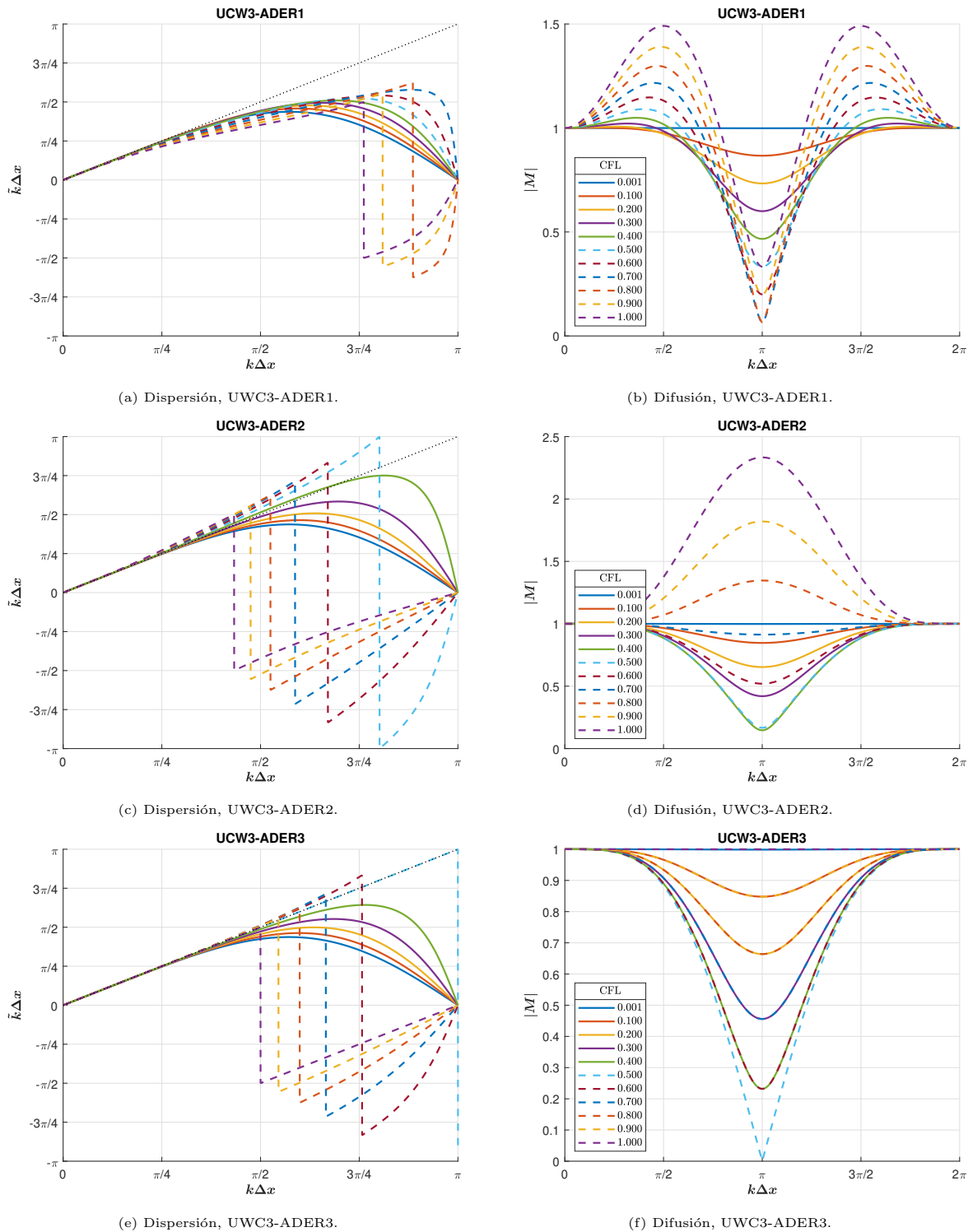


Figura 4.4: Análisis de dispersión y difusión del esquema discreto completo UWC3-ADER.

La difusión también se puede mostrar en coordenadas polares, como muestra la Figura 4.5.

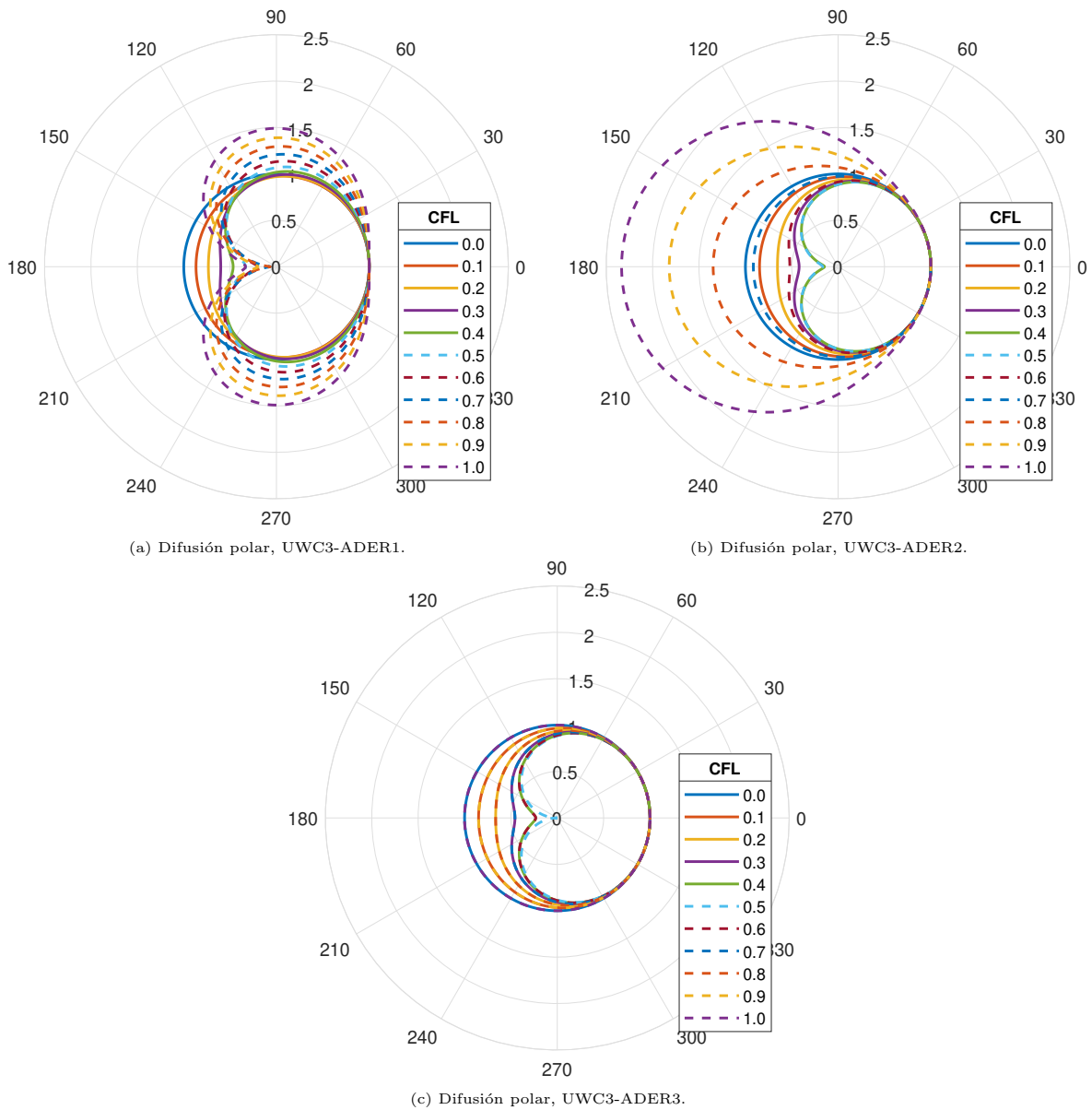
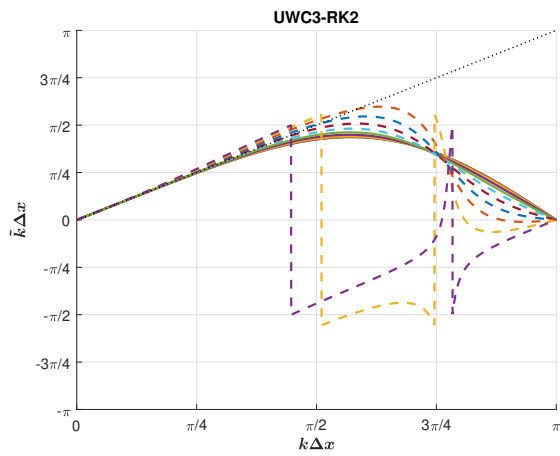


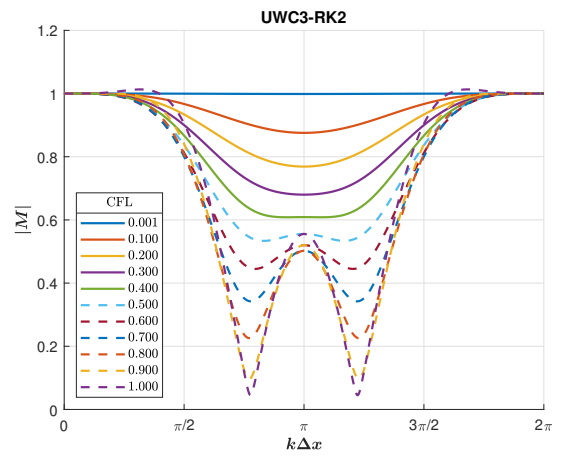
Figura 4.5: Difusión en coordenadas polares.

4.2.5. Ejemplo de método discreto: UWC3-RK

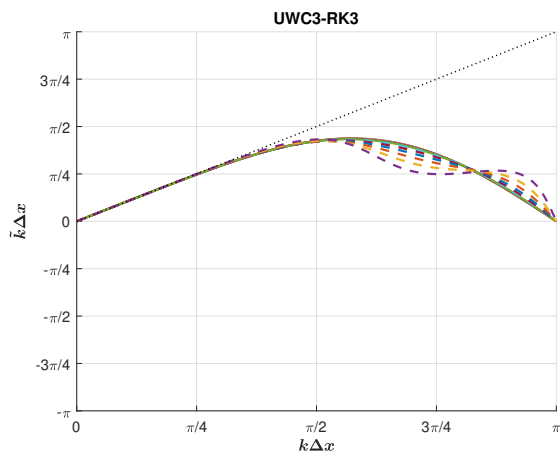
En segundo lugar, se discretiza la ecuación de transporte lineal (4.1) por medio de un esquema *upwind* de tercer orden en el espacio y un Runge-Kutta de segundo y tercer orden en el tiempo. El desarrollo de este esquema se encuentra en el apéndice C. El esquema semidiscreto es análogo al analizado en la Sección 4.2.2, así que lo mostrado en la Figura 4.3 es válido también para este esquema. La Figura 4.6 muestra la dispersión y la difusión para múltiples valores del CFL.



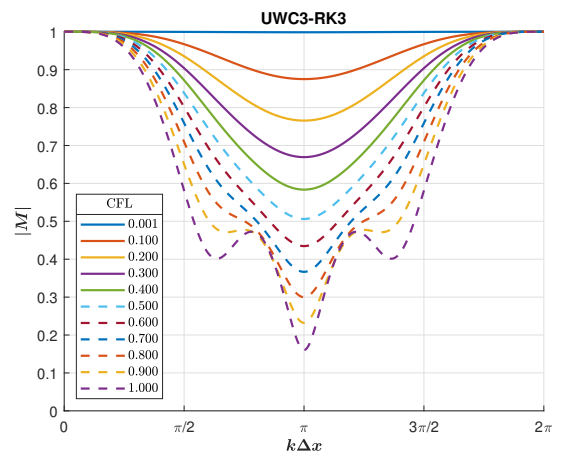
(a) Dispersión, UWC3-RK2.



(b) Difusión, UWC3-RK2.



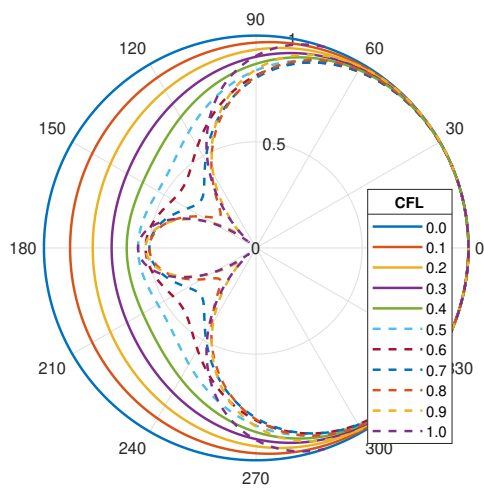
(c) Dispersión, UWC3-RK3.



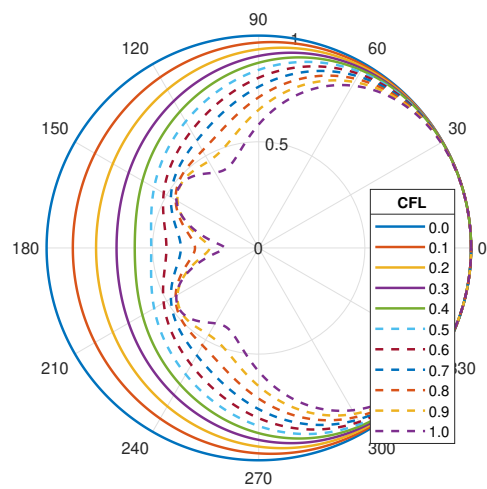
(d) Difusión, UWC3-RK3.

Figura 4.6: Análisis de dispersión y difusión del esquema discreto completo UWC3-RK (segundo y tercer orden).

La difusión también se muestra en coordenadas polares en la Figura 4.7.



(a) Difusión, UWC3-RK2.



(b) Difusión, UWC3-RK3.

Figura 4.7: Representación polar de la difusión numérica del esquema UWC3-RK.

4.2.6. Influencia del tiempo total de simulación

En el caso de la difusión de los esquemas ADER (Figuras 4.4b - 4.4f) se solapan las representaciones de los CFL que equidistan de 0.5. Esto es debido a que el factor de amplificación calculado hasta ahora establece la relación entre dos tiempos sucesivos, es decir, separados por un único paso temporal. Sin embargo, para CFL de menor valor será necesario un mayor número de pasos temporales, por lo tanto, la difusión acumulada inevitablemente aumentará. Se requiere por ello un nuevo análisis sobre cómo afecta el paso temporal a distintos valores del CFL para un mismo tiempo de simulación.

Puede darse el caso de que el paso temporal no sea un divisor exacto del tiempo total T de simulación. Es por ello necesario definir un paso temporal extra δ que facilite completar la fracción de tiempo restante. Así, si se define el número de pasos temporales completos como K , se tiene

$$T = K\Delta t + \delta \tag{4.39}$$

Supongamos que el tiempo máximo es igual al paso espacial, $T = \Delta x$, con $a = 1$. De esta manera, el cociente entre el tiempo máximo y el paso temporal será

$$\frac{T}{\Delta t} = \frac{\Delta x}{\sigma \cdot \Delta x} = \frac{1}{\sigma}. \tag{4.40}$$

Teniendo en cuenta esto, el número de pasos temporales completos que se darán, en función del CFL, es

$$K = \left\lfloor \frac{T}{\Delta t} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{1}{\sigma} \right\rfloor. \tag{4.41}$$

El tiempo restante para llegar al tiempo máximo, T , se denotará por δ y se utilizará para calcular un *CFL* modificado con el que realizar el último paso de actualización temporal.

$$\sigma^* = \frac{\delta}{T} = \frac{T - TK \cdot \sigma}{T} = 1 - K\sigma. \tag{4.42}$$

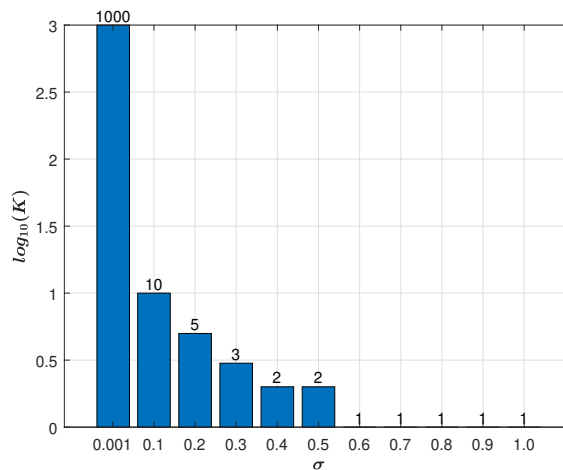


Figura 4.8: Pasos temporales completos necesarios según el CFL.

El factor de amplificación de este tiempo final se calculara de la siguiente manera

$$\frac{u^{n+K+1}}{u^n} = (M_\sigma)^K \cdot M_{\sigma^*}, \tag{4.43}$$

donde M_σ y M_{σ^*} son los factores de amplificación en un único paso temporal debido a σ y σ^* .

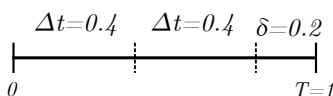


Figura 4.9: Ejemplo con dos pasos temporales completos.

Un breve ejemplo. Con $T = 1$, si tenemos $\sigma = 0.4$, entonces se dan dos pasos temporales completos, como se indica en la Figura 4.9, y se utilizaría un CFL modificado para el último paso de actualización de

$$CFL^* = \frac{1 - 2 \cdot 0.4}{1} = 0.2. \tag{4.44}$$

En tal caso, el factor de amplificación queda

$$\frac{u^{n+2+1}}{u^n} = M_{CFL}^2 \cdot M_{CFL^*}. \tag{4.45}$$

Se ha realizado un análisis de este tipo para distintos valores del CFL de los esquemas UWC3-ADER3 y UWC3-RK3.

En primer lugar, presentamos el número de pasos temporales necesarios según el CFL. En la Figura 4.8 se recoge este resultado, que tiene los mismos valores para ambos esquemas.

El valor absoluto del factor de amplificación se modifica como se recoge en las Figuras 4.10a y 4.10c.

En el caso del esquema numérico UWC3-ADER3 la tendencia que se observa es que, para valores grandes del CFL, cercanos a la unidad, la difusión es menor; y va aumentando conforme el CFL disminuye. Esta tendencia abarca todos los valores del CFL de 1 a 0 en el intervalo de valores $0 \leq k\Delta x \leq \pi/2$, como se puede observar con mayor detalle en la Figura 4.10b. En el intervalo $\pi/2 \leq k\Delta x \leq 3\pi/2$ no se sigue este orden riguroso de aumento de la difusión. Por el contrario, para valores del CFL $\sigma \leq 0.8$ se invierte la tendencia, siendo la difusión menor para CFL de menor valor. Por ejemplo, como se observa en la Figura 4.10a, la difusión para $\sigma = 0.001$ llega a ser menor que para $\sigma \leq 0.7$.

No sucede de la misma manera con el esquema UWC3-RK3, en cuyo caso, la difusión es mayor para valores mayores del CFL. Este comportamiento, que se puede comprobar en la Figura 4.10d, abarca aproximadamente el intervalo de valores $0 \leq k\Delta x \leq 2\pi/3$ y su simétrico $4\pi/3 \leq k\Delta x \leq 2\pi$. En los valores intermedios de $k\Delta x$, en torno a $k\Delta x = \pi$, se dan varios puntos de inflexión en los cuales la tendencia se modifica y presentan mayor difusión los valores de CFL menores; para luego volver a comportarse como al comienzo, como se aprecia en la Figura 4.10c. Por ejemplo, en torno a $k\Delta = \pi/2$, la difusión es mayor con cuando $\sigma = 1.0$ que cuando $\sigma = 0.001$; sin embargo, cuando $k\Delta x = 3\pi/4$, es difunde más el CFL $\sigma = 0.001$.

En resumen, para valores pequeños de la cantidad $k\Delta x$ estos dos esquemas, UWC3-ADER3 y UWC3-RK3, presentan comportamientos contrarios en cuanto a al difusión. Mientras que para el primero aumenta la difusión conforme disminuye el CFL, para el segundo lo hace cuando aumenta el CFL.

Por otro lado, una diferencia apreciable a simple vista es que, para los distintos valores del CFL, el esquema UWC3-ADER3 varía en mayor medida su difusión que el esquema UWC3-RK3, que no presenta una dependencia tan fuerte respecto al CFL.

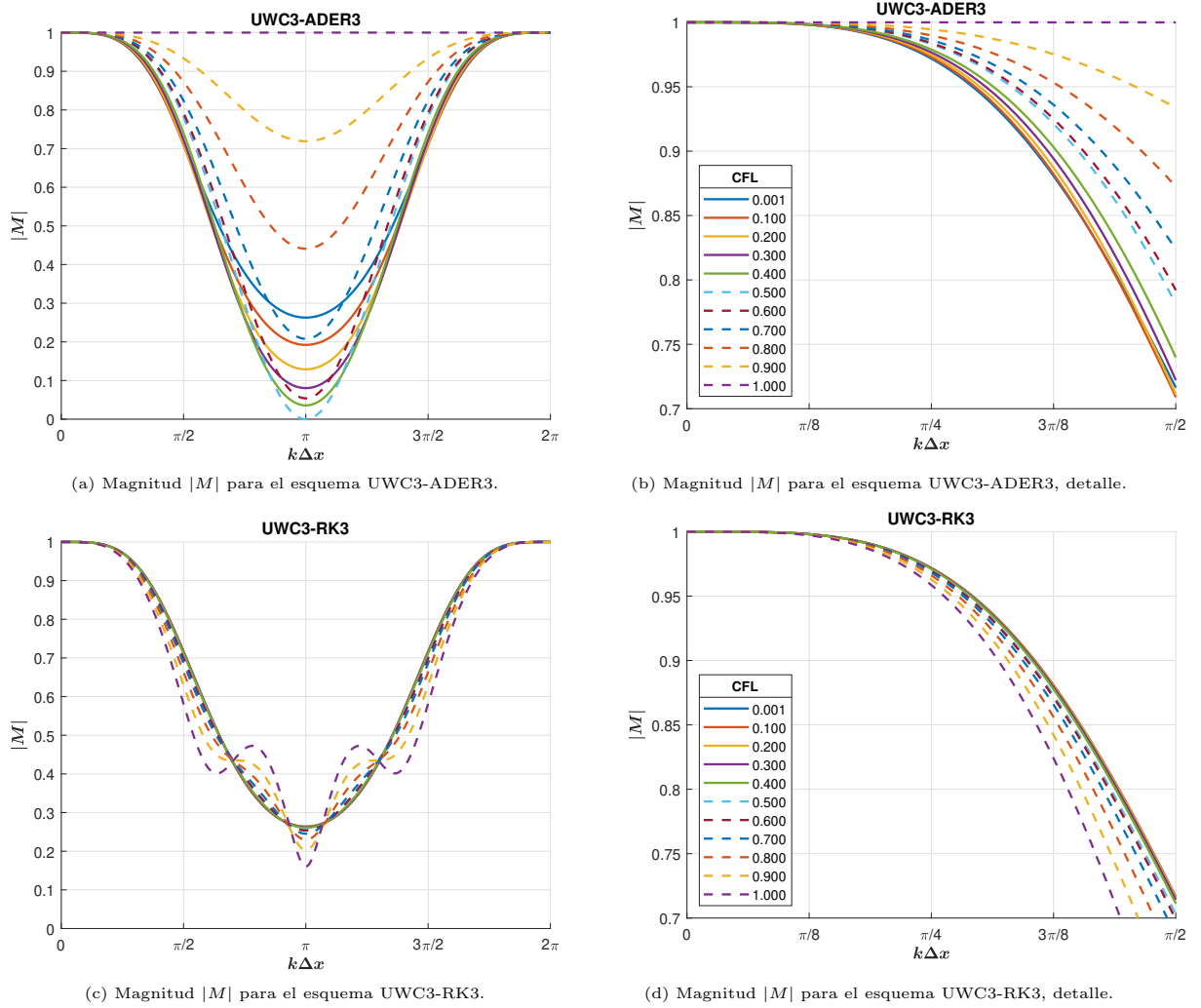


Figura 4.10: Análisis de dispersión y difusión de los esquemas discretos completos UWC3-ADER3 y UWC3-RK3.

4.2.7. Análisis de estabilidad para varios esquemas

Un esquema numérico se vuelve inestable cuando su factor de amplificación (4.31) aumenta por encima de la unidad. Se puede establecer un criterio para considerar el límite de estabilidad de un esquema según el valor del CFL. Con este motivo se considera el máximo valor de $|M|$ para valores de $k\Delta x \in [0, \pi]$ y todo ello se evalúa con $\sigma \in [0, 1.5]$.

Este valor máximo del factor de amplificación se calcula recogiendo siempre el máximo valor de M dentro del rango de $k\Delta x$ para valores del CFL entre 1 y 1.5.

Se ha calculado el límite de seis esquemas lineales distintos recogidos en la Figura 4.11. Entre ellos se han dispuesto variaciones en orden temporal de un mismo esquema, como el ADER o el Runge-Kutta.

En la Tabla 4.2 se muestran los límites de estabilidad de este conjunto de esquemas. Se han calculado con una precisión numérica de $1 \cdot 10^{-3}$. Se llega a la conclusión de que aquellos esquemas en los que el grado de discretización espacial coincide con el grado de discretización temporal tienen límites de estabilidad mayores. Como por ejemplo en el caso del ADER, donde sólo el de tercer orden presenta estabilidad hasta $\sigma = 1$. Semejante sucede con el Runge-Kutta. Hay un incremento del valor del CFL que permite la estabilidad cuando se pasa de grado 2 a grado 3, como se muestra en los valores de la tabla.

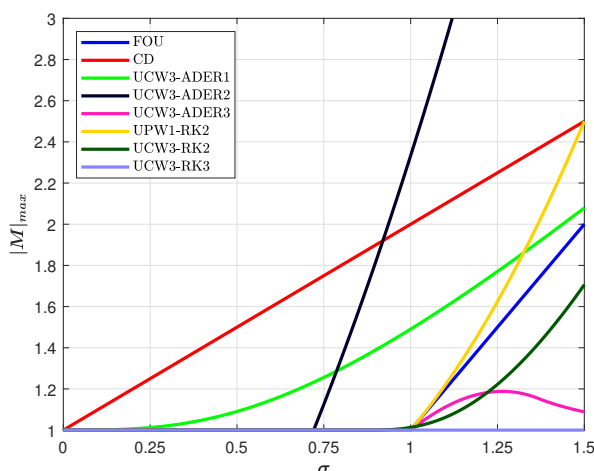


Figura 4.11: Análisis de estabilidad según el CFL.

Esquema	σ_{lim}
FOU	1.000
CD	0.002
UWC3-ADER1	0.109
UWC3-ADER2	0.721
UWC3-ADER3	1.000
UW1-RK2	1.000
UWC3-RK2	0.924
UWC3-RK3	1.627

Tabla 4.2: Límites de estabilidad.

4.3. Análisis de von Neumann aproximado

Algunos de los esquemas numéricos empleados en la resolución de ecuaciones pueden ser no lineales y, por lo tanto, no permitir la realización de un análisis de estabilidad utilizando el método analítico de von Neumann. Existen técnicas alternativas que permiten obtener información válida acerca de las inestabilidades que los mismos métodos introducen en las soluciones. Atendiendo a las propiedades de propagación de las ondas y por medio de la transformada de Fourier, como veremos más adelante, se puede definir una relación de dispersión artificial en función de un número de onda modificado [34]. Para demostrar que esta relación de dispersión artificial es válida se compararán las relaciones aportadas por las soluciones analíticas de los dos esquemas numéricos lineales descritos en las secciones 4.2.4 y 4.2.5 con los resultados numéricos.

El procedimiento es el siguiente. Cuando la amplitud de la condición inicial, ecuación (4.3), contiene un único armónico, pasando al dominio frecuencial, se obtendría una serie de frecuencias denominadas armónicos dominadas por una componente principal. En el caso de contar con un esquema lineal la única componente frecuencial resultante será la principal. Toda la información que nos interesa conocer está contenida en esta componente principal, que evolucionará en el tiempo y se verá afectado por las transformaciones derivadas del esquema numérico, pero su frecuencia correspondiente no variará. Es por ello interesante utilizar la Transformada de Fourier discreta (DFT) sobre los datos calculados como solución numérica. De esta manera se puede obtener el factor de amplificación numérico equivalente al analítico de la ecuación (4.31) y, con él, comprobar la dispersión y la difusión del esquema. Si el esquema fuera no lineal podrían aparecer otros modos adicionales además del dispuesto originalmente y efectos como el denominado *aliasing*, según el cual dos señales diferentes pueden ser reconstruidas de manera indistinguible. Una vez se haya validado el análisis numérico de un esquema lineal se podrá utilizar este método sobre esquemas no lineales.

4.3.1. Obtención de armónicos

Fourier, en un artículo de 1807, proponía que cualquier señal continua periódica podía ser representada por una suma de ondas sinusoidales adecuadamente elegidas [41]. La familia de técnicas matemáticas basadas en esta descomposición de señales se denominan análisis de Fourier.

La transformada de Fourier de una función $u(x) \in \mathbb{C}$ se define como

$$U(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(x)e^{-ixk} dx, \quad (4.46)$$

con $U(k) \in \mathbb{C}$ y donde $k \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ es el número de onda. La transformada inversa de Fourier se define como

$$u(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} U(k)e^{ixk} dk. \quad (4.47)$$

En el caso de señales discretas se trabaja con la transformada discreta de Fourier (DFT). Ésta se define como

$$U_\xi = \sum_{j=0}^{N-1} u_j e^{-i2\pi j\xi/N}, \quad (4.48)$$

donde el índice $j \in \mathbb{N}_0$ indica la posición espacial discretizada y $\xi \in \mathbb{N}_0$ el índice del número de onda discretizado. La transformada inversa de Fourier discreta será

$$u_j = \frac{1}{N} \sum_{\xi=0}^{N-1} U_\xi e^{i2\pi j\xi/N}, \quad (4.49)$$

donde, de nuevo, $u_j, U_\xi \in \mathbb{C}$.

Puesto que el espectro es simétrico, la DFT calcula dos frecuencias semejantes equidistantes respecto a π . para quitar una de estas frecuencias y reducir a la mitad el dominio frecuencial en [41] se propone otra reconstrucción basada en las siguientes transformaciones

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\bar{U}_\xi &= \frac{\operatorname{Re}U_\xi}{N/2} & \operatorname{Re}\bar{U}_0 &= \frac{\operatorname{Re}U_0}{N} \\ \operatorname{Im}\bar{U}_\xi &= \frac{\operatorname{Im}U_\xi}{N/2} & \operatorname{Re}\bar{U}_{N/2} &= \frac{\operatorname{Re}U_{N/2}}{N} \end{aligned}, \quad (4.50)$$

Con esto, la reconstrucción de la señal original es

$$u_j = \sum_{\xi=0}^{N/2} \operatorname{Re}\bar{U}_\xi \cos(2\pi\xi j/N) + \sum_{\xi=0}^{N/2} \operatorname{Im}\bar{U}_\xi \sin(2\pi\xi j/N). \quad (4.51)$$

Las componentes que se obtienen como producto de la DFT, ecuación (4.48), se corresponden con los armónicos con los que se evaluará la dispersión y la disipación del esquema numérico. Este procedimiento se detalla en la Sección 4.3.3.

4.3.2. Barrido espectral y paso espacial

El cometido es la caracterización de la disipación y de la dispersión, sin embargo, no se trabajará en el dominio de la frecuencia, sino en el de la cantidad $k\Delta x$. La razón que motiva el uso de $k\Delta x$ reside en su adimensionalidad. Puesto que se define como el producto del número de onda por el paso espacial, siendo la primera una propiedad de la señal y la segunda, del dominio discretizado, se evita así la dependencia con la malla.

Ahora el interés se centra en barrer, para distintos valores del CFL, todo el espectro de valores de $k\Delta x$, de 0 a π , para poder caracterizar la difusión y dispersión del esquema numérico en los resultados numéricos. La estrategia de barrido estriba en mantener la longitud de onda constante, con valor $\lambda = 2\pi$, ($[\lambda]$ = longitud), y por lo tanto $k = 1$, ($[k] = 1/\text{longitud}$), e ir

modificando el número de pasos espaciales que ocupa una longitud de onda. La magnitud del paso espacial vendrá dada por

$$k\Delta x = \frac{2\pi n}{2N/2}, \tag{4.52}$$

donde $n \in [1, N/2]$ y N es el número de celdas. Su valor aumenta desde $2\pi/N$, que para N muy grandes tenderá a 0, hasta π . Al aumentar Δx , el ratio entre la longitud de onda y el paso espacial $\frac{\lambda}{\Delta x}$ disminuye y la cantidad $k\Delta x$ aumentará conforme lo haga Δx .

Un ejemplo del problema descrito en la Sección 4.1.1 que ilustra la manera en la que se realiza este barrido es el que se recoge en la Figura 4.12, donde se aprecia que conforme disminuye el número de celdas que entran en una longitud de onda se van obteniendo valores mayores de $k\Delta x$.

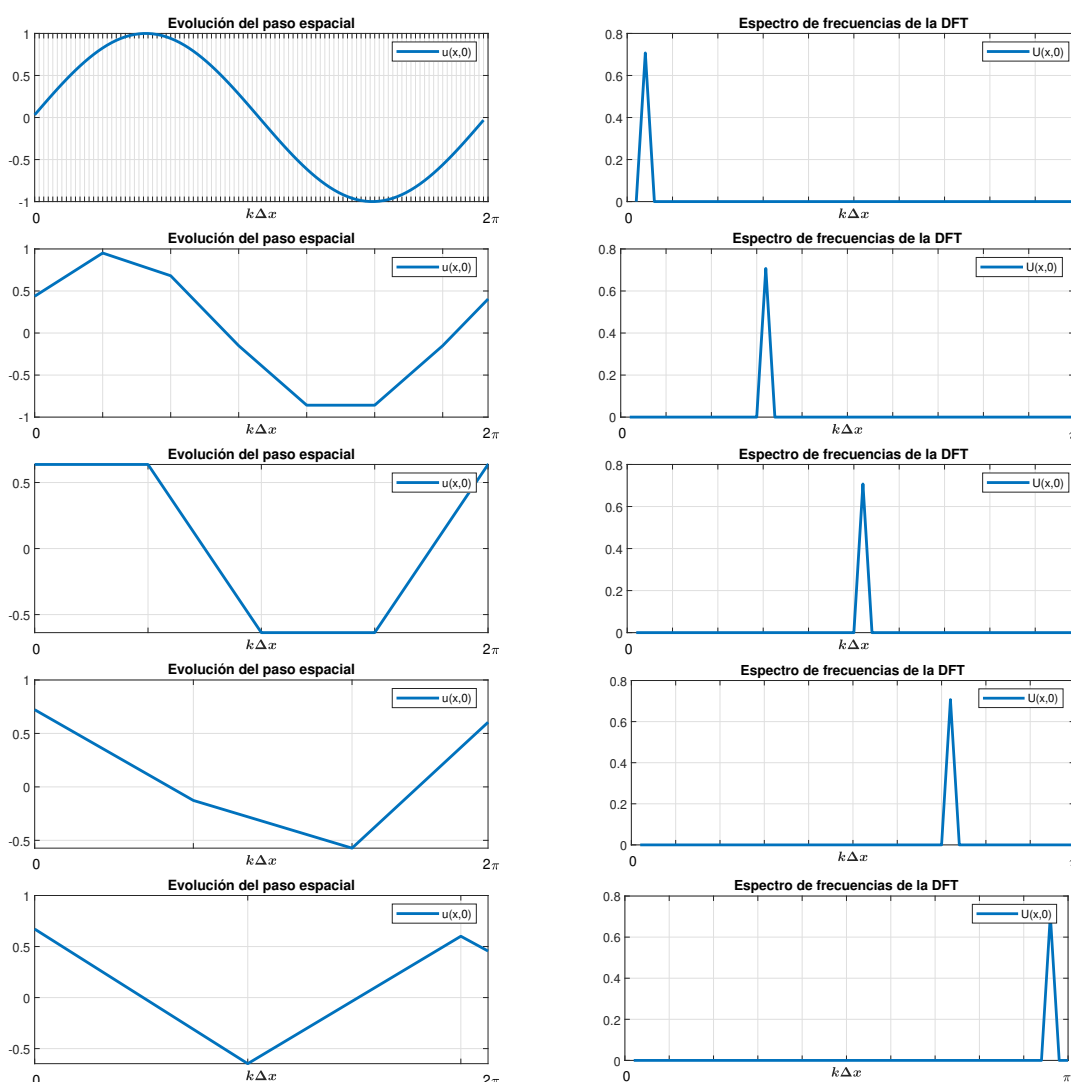


Figura 4.12: Evolución del paso espacial y barrido de $k\Delta x$, $\sigma = 0.001$.

Este caso concreto, utilizando un esquema numérico lineal (UWC3-ADER3), tan sólo se genera una componente armónica; sin embargo, cuando el esquema numérico no es lineal se producen componentes armónicas adicionales de menor magnitud, que también se van desplazando a lo largo del espectro de $k\Delta x$. Debido a esta diferencia de amplitud se observa

en la Figura 4.13 que la componente principal, para que se vean el resto de armónicos, se sale de escala. Asimismo, se muestra todo el rango de valores de $k\Delta x$, hasta 2π . Las componentes adicionales aumentan en amplitud conforme se acercan a $k\Delta x = \pi/2$, punto en el que se coinciden con las componentes principales, interfiriendo constructivamente. A partir de $k\Delta = \pi/2$ reaparecen los armónicos hasta que en $k\Delta x = \pi$ se atenúan y convergen de nuevo en el principal, como se aprecia en el último fotograma del proceso de la Figura 4.13.

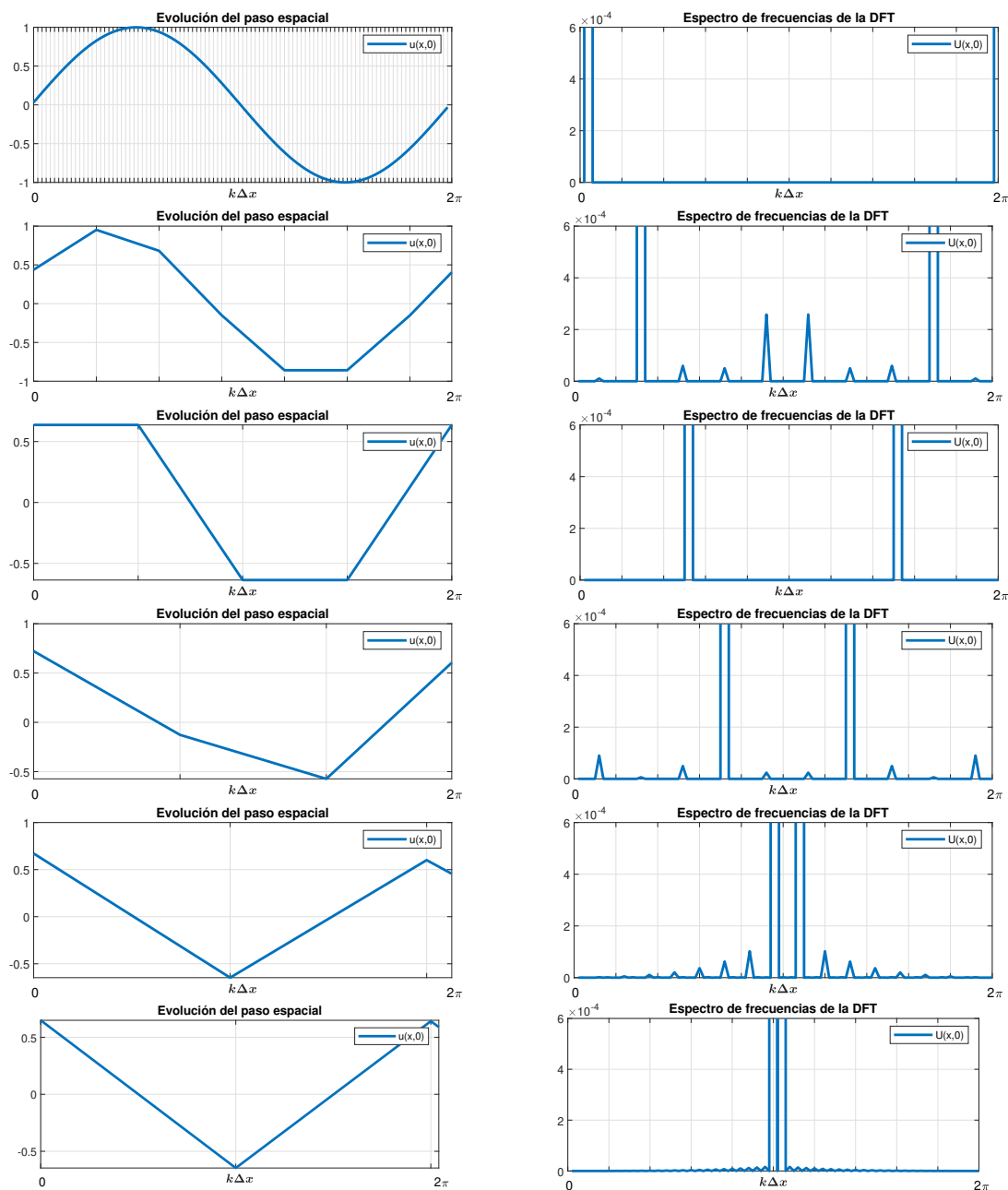


Figura 4.13: Evolución del paso espacial y barrido de $k\Delta x$, $\sigma = 0.001$, con un esquema no lineal (UWC3-ADER3).

4.3.3. Procedimiento del análisis aproximado

En primer lugar, se aplica la DFT, ecuación (4.48), sobre la condición inicial de la ecuación diferencial lineal de transporte dada por la ecuación (4.2). La amplitud de la condición inicial viene dada por un único armónico, como se recoge en la ecuación (4.3)

$$U_{\xi}^{CI} = \begin{cases} U_{\xi_0}^{CI} & \text{si } \xi = \xi_0 \\ 0 & \text{si } \xi \neq \xi_0 \end{cases}, \quad (4.53)$$

donde ξ_0 se corresponde con el número de onda discretizado de la señal originalmente dispuesta $k\Delta x_0$.

A continuación, se aplica la DFT a la solución proporcionada por el esquema numérico en un tiempo $t = \Delta t$. Las modificaciones introducidas por el esquema se pueden expresar de la siguiente manera respecto a la CI

$$U_{\xi} = U_{\xi}^{CI} e^{-i(at/\Delta x)W}, \quad (4.54)$$

donde $W \in \mathbb{C}$ es el número de onda modificado. Teniendo en cuenta esta última ecuación y disponiendo un tiempo igual al paso temporal $t = \Delta t$, se deduce el siguiente factor de amplificación

$$M' = e^{-i\sigma W}, \quad (4.55)$$

donde $\mathbb{R} \ni \sigma = a\Delta t/\Delta x$ es el número CFL.

Se llega así a la expresión del número de onda modificado dado en [34] y [17], haciendo uso de la señal obtenida por la DFT según las transformaciones (4.50)

$$W = -\frac{1}{i\sigma} \ln \frac{\bar{U}_{\xi}}{U_{\xi}^{CI}}. \quad (4.56)$$

También se puede expresar de forma explícita como

$$W = \Xi + iE. \quad (4.57)$$

Con este número de onda se pueden construir las relaciones de dispersión y difusión artificiales deseadas que arrojarán luz sobre los efectos introducidos por los esquemas no lineales.

En la ecuación (4.31) se definía el factor de amplificación analítico tras un paso temporal, de manera que se llegaba a la expresión de la frecuencia angular modificada (4.9). Este parámetro presenta dimensiones de frecuencia, pero aún así se puede llegar a una analogía entre él y el número de onda modificado. Si se atiende a las ecuaciones (4.29) y (4.54) y se supone la equivalencia entre los factores de amplificación se llega a la siguiente relación

$$\tilde{\omega}\Delta t = \sigma W. \quad (4.58)$$

Las relaciones de dispersión y de difusión pueden ser escritas en función de las partes reales e imaginarias de la frecuencia angular modificada y del número de onda modificado. En la Tabla se recogen estas relaciones tanto para los métodos semidiscreto y discreto, como para los métodos analítico y aproximado.

	Semidiscreto		Discreto	
	Dispersión	Difusión	Dispersión	Difusión
Analítico	$\xi\Delta t/\sigma$	$\eta\Delta t/\sigma$	$\xi\Delta t/\sigma$	$e^{\eta\Delta t}$
Aproximado	Ξ	$E/k\Delta x$	Ξ	$e^{\sigma E}$

Tabla 4.3: Relaciones de dispersión y difusión para los métodos analítico y aproximado.

A continuación se presentan dos ejemplos de esquemas que sirven para validar el método aproximado por medio de la comparación con el analítico.

4.3.4. Validación de un esquema lineal: UWC3-ADER3

Para validar el método numérico aproximado de un esquema lineal, del que por lo tanto se conoce el resultado analítico, se añadirán a los resultados obtenidos en la Figura 4.4 los calculados mediante la DFT, siguiendo las relaciones recogidas en la Tabla 4.3.

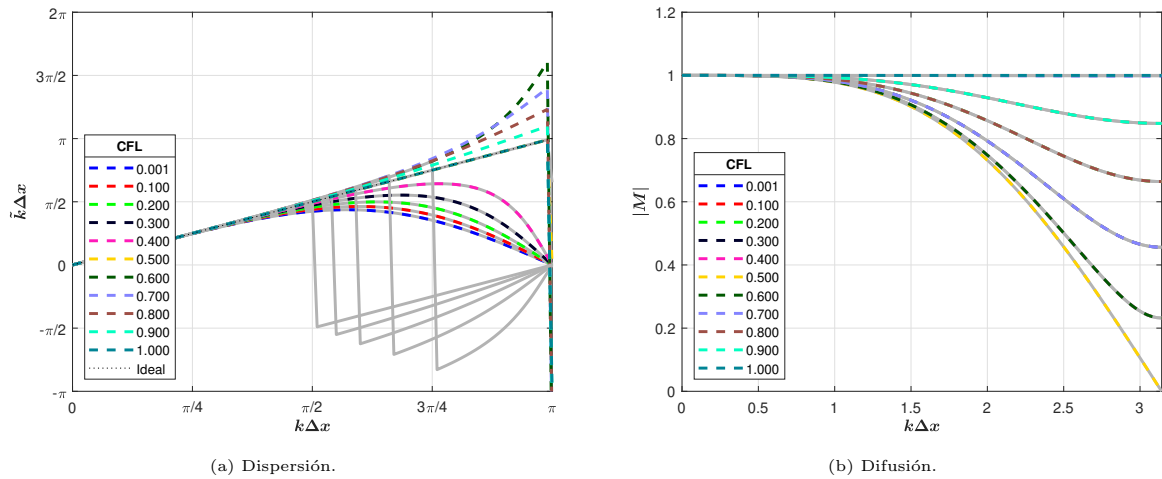


Figura 4.14: Análisis y comparación de dispersión y difusión del esquema discreto completo UWC3-ADER3.

En ellas se puede apreciar una concordancia casi perfecta entre los métodos analítico y numérico aproximado. De esta manera se valida el método numérico para llevar a cabo el mismo análisis sobre los esquemas no lineales.

4.3.5. Validación de un esquema semidiscreto no lineal: WENO5

Para validar el análisis de un esquema no lineal, como es el WENO5, no se cuenta con una descripción analítica de la difusión y dispersión numérica del esquema. En este caso, se hará uso de resultados recogidos en literatura para validar el procedimiento [17].

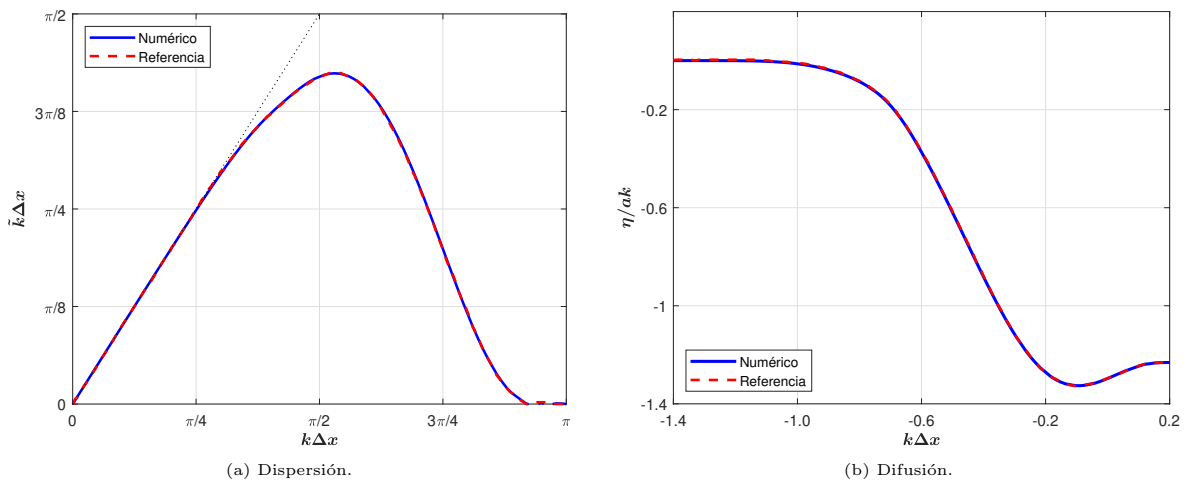


Figura 4.15: Validación del esquema semidiscreto WENO5 con datos de [17].

En la Figura 4.15 se muestra una concordancia muy alta entre ambos conjuntos de datos. En

la comparación de la difusión ha sido necesario representar E y no $E/k\Delta x$ como se indicaba en la Tabla 4.3, debido a que los datos proporcionados por la bibliografía venían así recogidos.

4.3.6. Análisis aproximado y comparación de los métodos WENO y UWC

Una vez enteramente validado el análisis de von Neumann aproximado se propone un primer ejemplo semidiscreto sobre once esquemas diferentes, a saber: FOU, UWC3, WENO3, UWC5, WENO5, UWC7, WENO7, UWC9, WENO9, UWC11, WENO11.

La Figura 4.16 muestra los resultados. El esquema que antes se separa de la línea de dispersión ideal es el FOU y el que más tarda en hacerlo es el UWC11. Los esquemas WENO de diferentes órdenes se separan antes de la línea que marca la tendencia ideal que sus UWC análogos en orden. En cuanto a la difusión, de nuevo se obtiene el mismo resultado: el que mejor característica muestra es el UWC11, pues es el que más tarde y menos difunde y el FOU es con diferencia el más difusivo.

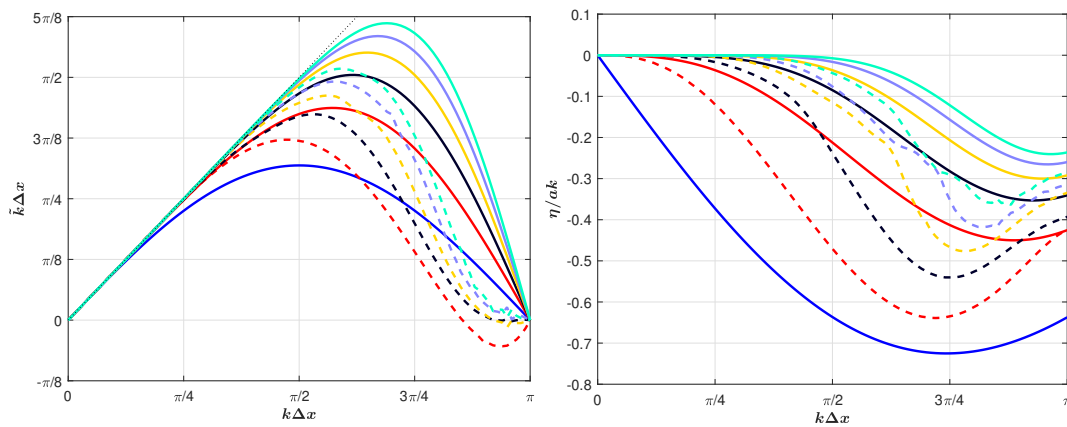


Figura 4.16: Dispersión y difusión para los esquemas FOU (—), UWC3 (—), WENO3 (- -), UWC5 (—), WENO5 (- -), UWC7 (—), WENO7 (- -), UWC9 (—), WENO9 (- -), UWC11 (—) y WENO11 (- -); tendencia ideal de la dispersión (.....).

Es la región lineal de la curva la que aporta información sobre la capacidad resolutive del esquema, ya que en dicha región el error dispersivo es casi nulo. Para ello se establece el criterio del 1%, que determina el rango de valores de longitud de onda ($k\Delta x$ en nuestro caso) en el que la propagación se lleva a cabo con precisión [27] [31].

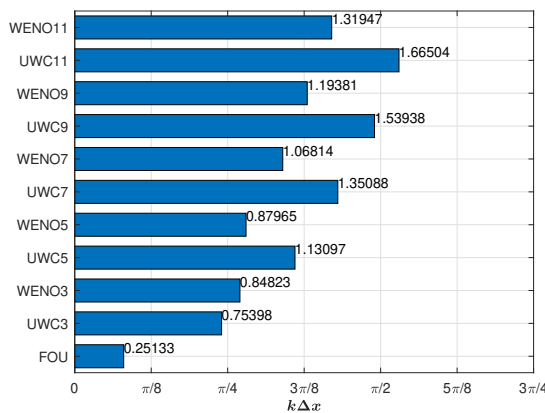


Figura 4.17: Rango de valores de $k\Delta x$ por debajo del 1% de error relativo.

Esquema	$k\Delta x_{1\%}$	$ \eta/ak $
FOU	0.25133	0.10941
UWC3	0.75398	0.02880
WENO3	0.84823	0.13039
UWC5	1.13097	0.01974
WENO5	0.87965	0.02225
UWC7	1.35088	0.01381
WENO7	1.06814	0.01869
UWC9	1.53938	0.01219
WENO9	1.19381	0.01276
UWC11	1.66504	0.01020
WENO11	1.31947	0.01233

Tabla 4.4: Difusión correspondiente a los valores $k\Delta x_{1\%}$ de los cinco esquemas considerados.

La Figura 4.17 muestra los rangos de $k\Delta x$ resultantes de este criterio aplicado a los once esquemas anteriores. El rango más amplio lo presenta el esquema UWC11, como ya se predijo;

y el menor, el FOU. Para órdenes superiores a 3, los esquemas no lineales WENO dispersan antes que sus UWC análogos en orden. Esto no sucede con el WENO3 y el UWC3, pues el primero presenta un $k\Delta x_1\%$ ligeramente mayor que el segundo. En la Figura 4.16 no se aprecia, pero, a pesar de que el WENO3 se separa antes de la tendencia lineal, la curva de dispersión de UWC3 pasa por encima de la del WENO3 y llega antes al 1% en dispersión. Cuando la dispersión aumenta por encima de este 1% interesa que el esquema introduzca difusión numérica suficiente como para atenuar las fluctuaciones de mayor frecuencia que en otro caso se resolverían con un error dispersivo importante. Esta difusión numérica haría el papel de un modelo de mezcla para las escalas pequeñas. Interesa por lo tanto que la difusión sea la mayor posible a partir de este umbral. Es posible saber la difusión correspondiente a estos valores umbral $k\Delta x_1\%$, que se recoge en la Tabla 4.4.

En este caso es el WENO3 el más difusivo a partir de su $k\Delta x_1\%$, pues presenta un valor mayor en magnitud que el resto de esquemas. Por otro lado, los esquemas más amplios en rango difunden un orden de magnitud por debajo del WENO3. Otro esquema que cuenta con una gran difusión a partir de su $k\Delta x_1\%$ es el FOU, pero su rango de $k\Delta x$ es mucho menor. En la Figura 4.18 se muestran los valores de $k\Delta x_1\%$ y sus difusiones correspondientes agrupadas por tipo de esquema, lineal (UWC) o no lineal (WENO). En ambos la tendencia es semejante: el valor de la dispersión $k\Delta x_1\%$ aumenta conforme aumenta el orden del esquema; asimismo, la difusión $|\eta/ak|$ disminuye con el orden. Sin embargo, como se recoge en la Tabla 4.4, los valores de $k\Delta x_1\%$ son menores en los WENO (a excepción del WENO3), mientras que los de $|\eta/ak|$ no presentan muchas diferencias.

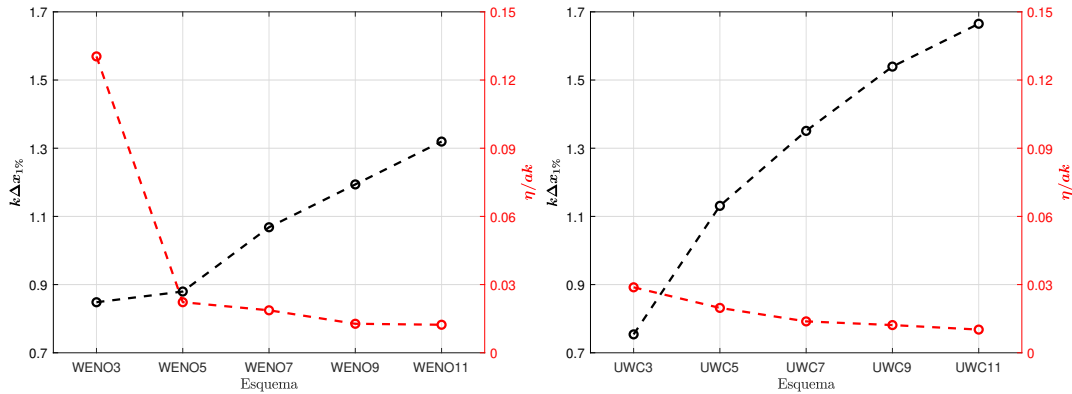


Figura 4.18: Dispersión debida al criterio del 1% y su difusión correspondiente para los esquemas (a) WENO y (b) UWC.

4.3.7. Comparación de los esquemas WENO3-ADER3 y WENO3-RK3

Se lleva a cabo a continuación una comparación de la dispersión y la difusión generadas por los esquemas ADER3-WENO3 y RK3-WENO3. Los resultados se muestran en la Figura 4.19, donde la línea discontinua representa al RK3-WENO3 y la continua al ADER3-WENO3.

En la característica de dispersión se puede constatar un comportamiento más homogéneo en el esquema RK3-WENO3. Éste, a pesar de ello, se mantiene más alejado del ideal. El esquema ADER3-WENO3 tiende al ideal conforme aumenta el CFL de 0.001 a 0.5 y de nuevo de 0.5 a 1.0.

En cuanto a la difusión, la relaciones son diferentes para cada esquema. El ADER3-WENO3 presenta simetría respecto a 0.5, solapándose los valores 0.2 con 0.8 y 0.4 con 0.6. Sin embargo, el RK3-WENO3 aumenta la difusión conforme aumenta el valor del CFL.

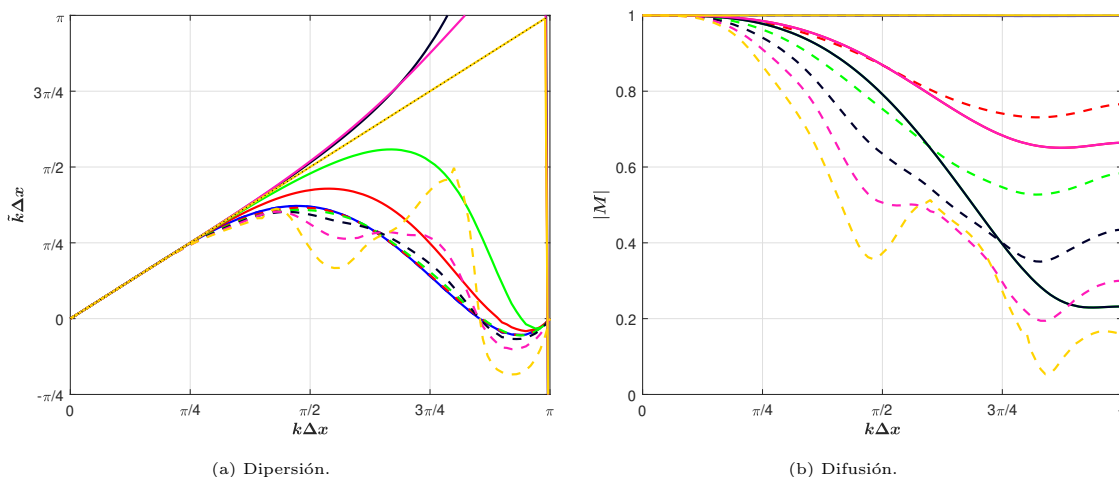


Figura 4.19: Comparación del esquema WENO3-ADER3 con $\sigma = 0.001$ (—), $\sigma = 0.2$ (—), $\sigma = 0.4$ (—), $\sigma = 0.6$ (—), $\sigma = 0.8$ (—) y $\sigma = 1.0$ (—) y el esquema WENO3-RK3 con $\sigma = 0.001$ (- -), $\sigma = 0.2$ (- -), $\sigma = 0.4$ (- -), $\sigma = 0.6$ (- -), $\sigma = 0.8$ (- -) y $\sigma = 1.0$ (- -); tendencia ideal de la dispersión (.....).

4.3.8. Criterio del 1% en dispersión y difusión aplicado al esquema completo

Se va a aplicar el criterio del 1% sobre esquemas basados en la integración temporal del método Runge-Kutta de tercer orden, con diferentes combinaciones de discretizaciones espaciales y distintos órdenes en éstas, a saber: FOU, UWC3-RK3, UWC5-RK3, UWC7-RK3, WENO3-RK3, WENO5-RK3 y WENO7-RK3. Este análisis está motivado por encontrar una herramienta que sirva para analizar las cascadas energéticas calculadas sobre la ecuación de Burgers en el siguiente capítulo.

Además de en el problema semidiscreto, que no depende del número de Courant-Friedrichs-Levy, σ , el criterio del 1% es aplicable al problema completamente discreto, de manera que el parámetro σ es otro valor que variar en esta exploración. Asimismo, además del valor de $k\Delta x_{1\%}$ en dispersión también se va a calcular el valor de $k\Delta x_{1\%}$ para la difusión; y se hallarán los valores de los errores relativos en difusión cuando se calcule el error al 1% en dispersión, $k\Delta x_{1\%}^{disp}$, y en dispersión cuando se calcule en difusión, $k\Delta x_{1\%}^{diff}$.

4.3.8.1. Errores relativos en dispersión y difusión según el número CFL y el esquema

En primer lugar se presenta un análisis de sensibilidad general respecto de σ al cálculo de estos valores de $k\Delta x_{1\%}$ para los distintos esquemas superpuestos. En la Figura 4.20 se presentan estos resultados.

En la gráfica de la izquierda, Figura 4.20a, se muestra el error en difusión que supone la $k\Delta x_{1\%}$ en dispersión. Los resultados no presentan una clara tendencia en conjunto. Por un lado tenemos aquellos esquemas que crecen para todos los valores de σ , a saber: UWC3-RK3, WENO3-RK3 y WENO5-RK3 (situándose el WENO3-RK3 muy por encima en valores de error que los otros dos para todos los valores de σ). Por otro lado, los otros cuatro esquemas muestran cambios de tendencia en algún punto, cada uno con sus propias particularidades. UWC5-RK3, UWC7-RK3 y WENO7-RK3 crecen hasta un punto máximo para luego disminuir; pero, mientras que el máximo de UWC7-RK3 se encuentra en $\sigma = 0.5$, los otros dos esquemas lo sitúan en $\sigma = 0.7$. El error relativo del FOU para valores centrales de σ desciende bruscamente para luego volver a aumentar.

En general se puede destacar de este análisis que existe una tendencia clara de ascenso

del error conforme aumenta σ al menos hasta valores en torno a $\sigma = 0.5$ (sin tener en cuenta el esquema FOU) y que para $\sigma > 0.5$ algunos esquemas invierten la tendencia, eso sí, manteniéndose siempre en valores del error relativo mayores que los de $\sigma < 0.5$.

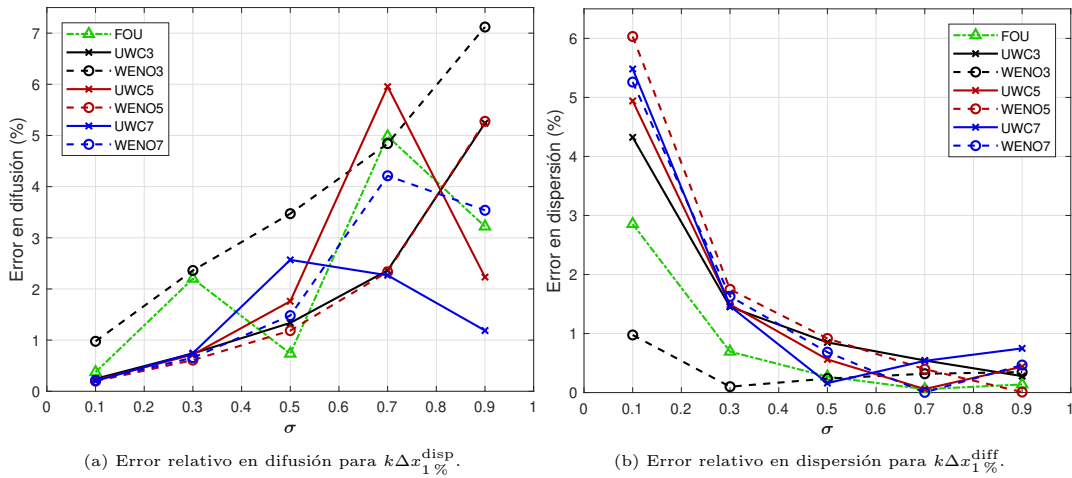


Figura 4.20: Errores relativos en difusión y dispersión para todos los esquemas.

La tendencia general del error relativo en dispersión para $k\Delta x_1^{\text{diff}}$ queda mucho más clara: conforme aumenta σ , este error disminuye. La Figura 4.20b muestra con claridad cómo hasta $\sigma = 0.5$ desciende el error abruptamente. Para $\sigma > 0.5$ algunos esquemas hacen continuar descendiendo el error ligeramente y otros suponen un leve repunte, pero todos los valores quedan por debajo del 1%.

4.3.8.2. Errores relativos en dispersión y difusión según el refinamiento

Interesa también ver cómo afecta la resolución en el cálculo aproximado del análisis de von Neumann, dicha resolución viene dada por la ecuación (4.52). Para ello, por medio del esquema UWC3-RK3, se ha analizado la convergencia de los resultados (error en difusión y dispersión para las correspondientes $k\Delta x_1\%$) con el refinamiento de malla (aumentando N). Se calculan los resultados con tres valores de $\sigma = 0.1, 0.5$ y 0.9 .

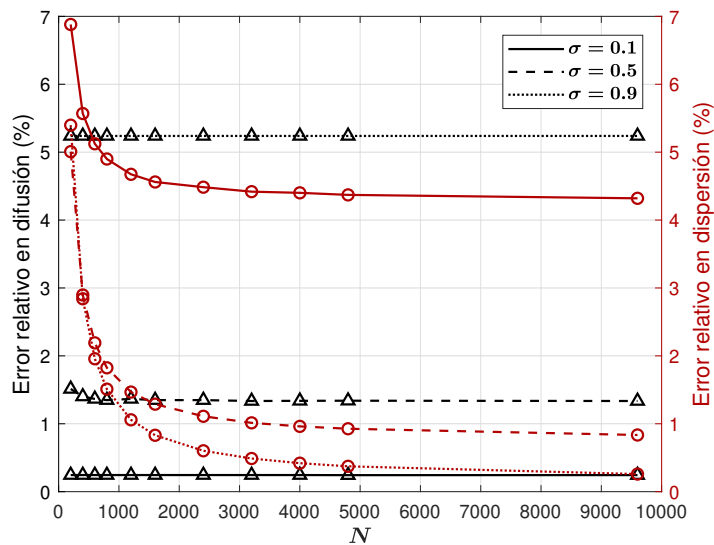


Figura 4.21: Errores relativos en difusión y dispersión distintos valores de N ; donde el negro (—) se corresponde con el error relativo en difusión y el granate (—), con el error relativo en dispersión.

La Figura 4.21 recoge los resultados de la convergencia de los errores relativos en difusión y dispersión para tres valores del refinamiento de malla, que son $N = 4096$, 8192 y 16384 .

Se muestran todos juntos porque hay dos tendencias muy marcadas independientes de σ : mientras que el error en difusión se mantiene aproximadamente constante con independencia del número de celdas, el error en dispersión disminuye de forma pronunciada desde valores bajos hasta aproximadamente $N = 4000$, valor entorno al cual se observa el inicio de la región asintótica de convergencia.

La simulación numérica de la cascada energética de la ecuación de Burgers (Sección 5) se resolverá con valores del número de celdas mayores que 4000, concretamente $N = 4096$, 8192 y 16384 . Así que se puede suponer que el refinamiento no será un factor relevante en el análisis y no se tendrá en cuenta su posible efecto. Por lo tanto, se utilizarán los valores de $k\Delta x_{1\%}^{disp}$, $k\Delta x_{1\%}^{diff}$ y sus respectivos errores obtenidos para $N = 8192$. Estos valores se recogen en las Tablas F.1 - F.7 del apéndice F diferenciadas según el esquema numérico; y se representan en las Figuras F.1 y F.2 del mismo apéndice. El nivel en ordenadas de ambos errores viene determinado por el valor de σ . En el caso de la difusión aumenta conforme aumenta σ y en el caso de la dispersión sucede lo contrario, pues para valores menores de σ el error es mayor. Esto confirma la conclusión general extraída en la sección anterior sobre las tendencias para cada error en función de σ .

Capítulo 5

Resolución numérica de la ecuación de Burgers

5.1. Ecuación de Burgers

La ecuación desarrollada por Burgers en 1948 [5] viene dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (5.1)$$

donde $u = u(x, t)$ es la variable transportada y, asimismo, la velocidad de transporte y ν , la viscosidad cinemática. Esta ecuación sirve como analogía unidimensional compresible de las ecuaciones de Navier-Stokes, ecuaciones que rigen la mecánica de fluidos, pues representa de manera simplificada la dinámica convectiva de Navier-Stokes incompresible y ofrece además información valiosa sobre algunas de las propiedades de la turbulencia [19]. Considerando algunas modificaciones de la ecuación (5.1) que se detallan en este capítulo, dicha ecuación se puede utilizar para representar una analogía unidimensional del movimiento turbulento. Conociendo las semejanzas y las diferencias entre la ecuación de Burgers y el sistema de ecuaciones de Navier-Stokes se puede utilizar la primera para comprender el movimiento turbulento de manera simplificada, en última instancia permitiendo el análisis de esquemas numéricos para la resolución de turbulencia. Los resultados obtenidos para esta ecuación pueden servir de guía en el diseño de esquemas numéricos más sofisticados.

Para comenzar, es necesario recordar que el análisis de este trabajo se centra en la resolución de la dinámica convectiva de las ecuaciones; por tanto, trabajaremos bajo la hipótesis de un infinito número de Reynolds, es decir, una viscosidad cinemática despreciable. Consecuentemente, el término viscoso se anula y se obtiene la ecuación de Burgers homogénea

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (5.2)$$

Una de las principales diferencias que presenta Burgers respecto de Navier-Stokes afecta al transporte de la turbulencia. El término convectivo de la ecuación, $u \frac{\partial u}{\partial x}$, hace evolucionar el campo fluctuante de la variable transportada hasta formar una colección de ondas de choque. En otras palabras, reduce el caos inicial en lugar de aumentarlo, reduciendo así la turbulencia. Los fuertes gradientes de velocidad a través de estos choques provocan la transferencia de energía de las longitudes de onda más grandes a las más pequeñas en el rango inercial. El espectro energético asociado a esta transferencia de energía se relaciona con el número de onda según [5]

$$E(k) \sim k^{-2} \quad (5.3)$$

Caber recordar que el espectro de turbulencia de Navier-Stokes, para números de Reynolds

altos, conduce a un rango inercial de escalas cuyo espectro energético es el propuesto por la hipótesis de Kolmogorov [18, 35] y derivado en el Capítulo 2, con una pendiente de $-5/3$. Por lo tanto, es necesario introducir una fuente de excitación que evite la aparición de grandes choques y permita el establecimiento de un régimen turbulento. Una manera de hacerlo es mediante un término de forzamiento $S(x, t)$ que redistribuya la energía y genere turbulencia en un rango determinado del espectro. En el caso de la ecuación de Burgers no homogénea, el término fuente propuesto actúa como este término generador de turbulencia. Por un lado, en los números de onda donde actúa el término fuente se produce una región del espectro energético con pendiente $-5/3$; por otro lado, en los números de onda en los que no actúa la pendiente será -2 . Así la ecuación de Burgers queda

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = S(x, t), \quad (5.4)$$

donde el flujo tiene la forma $f = \frac{u^2}{2}$.

El término $S(x, t)$, propuesto en [4, 6, 31], permitirá una adecuada adaptación del espectro energético a la pendiente $-5/3$.

El problema de estudio concreto considerado en este trabajo se describe en la siguiente sección. Sea el problema de valor inicial y de contorno para la ecuación (5.4)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = S(x, t) \\ u(x, 0) = 1 \\ u(x_a, t) = u(x_b, t) \end{cases} \quad (5.5)$$

donde $u = u(x, t) \in \mathcal{C} \subseteq \mathbb{R}^+$, siendo \mathcal{C} es el subconjunto de valores relevantes de u . Las coordenadas temporal y espacial son t y x , respectivamente. La solución se calculará en el dominio temporal $\Omega \times [0, T = 600 \text{ s}]$, donde $T \in \mathbb{R}^+$ es el tiempo de simulación y $\Omega = [x_a = -1, x_b = 1]$ es el dominio espacial, con $x_a, x_b \in \mathbb{R}$. Para evitar cualquier efecto adicional producido por los contornos en la solución, se considerarán condiciones de contorno periódicas, es decir $u(x_a, t) = u(x_b, t)$. En cuanto a la condición inicial, se dispone un valor constante $u(x, 0) = 1$ de manera que, una vez comience a actuar el forzamiento, la variable u adquiera valores en torno a la unidad, pero siempre positivos. Por lo tanto, la velocidad de propagación estará en torno a 1 y las fluctuaciones turbulentas serán de una magnitud muy inferior a 1. Cuando la solución sea suave, dado que las fluctuaciones son pequeñas, la solución se asemejará a la solución de la ecuación lineal.

Para generar el equivalente a fluctuaciones turbulentas en la ecuación de Burgers es necesario introducir energía por medio de un término fuente. De esta manera, se somete la variable transportada, u , a un forzamiento que redistribuye la energía y, como se ha mencionado, evita la aparición y prominencia de grandes choques. El forzamiento utilizado es el propuesto en [6] y seguido en [31, 26], que viene dado por

$$S(x, t) = \frac{A}{\sqrt{\Delta t}} \sum_{n=1}^{N_c} \frac{Z_n(t)}{\sqrt{\pi n}} \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right), \quad (5.6)$$

donde A es la amplitud de las fluctuaciones, cuyo valor viene propuesto en [26] y es $A = 0.04$. La dependencia que presenta este término fuente con la coordenada espacial y el tiempo no se relacionan directamente y cada una tiene un significado. Por un lado, la relación con el tiempo (5.6) queda implícita en el término aleatorio $Z_n(t)$. Esta variable sigue una distribución normal con media $\mu = 0$ y varianza $\sigma^2 = 1$ y se calcula como sigue

$$Z_n(t) = \sqrt{-2 \ln(A_n(t))} \cos(2\pi B_n(t)), \quad (5.7)$$

donde $A_n(t)$ y $B_n(t)$ son dos números aleatorios sacados de una distribución uniforme. En estas variables se encuentra la relación implícita con t . En la Figura 5.1 se muestra un ejemplo de esta distribución aleatoria utilizada, con el histograma de datos y su ajuste a la curva gaussiana.

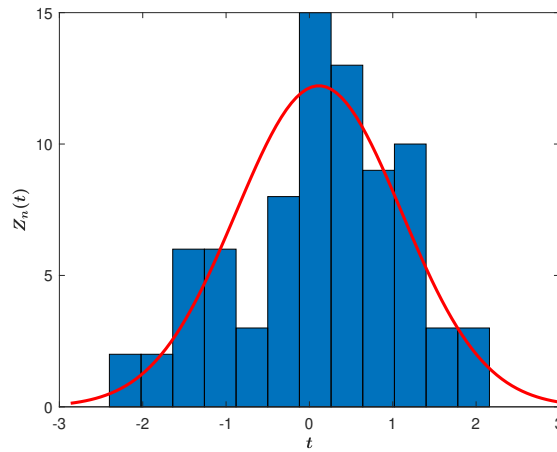


Figura 5.1: Histograma representando la distribución normal $Z_n(t)$ y su ajuste a una curva gaussiana (—).

Estos números aleatorios procedentes de la distribución normal actúan como coeficientes dentro del sumatorio del término que involucra la dependencia espacial. La función $\cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)$ depende a su vez del modo n que disponga el sumatorio. En la Figura 5.2 se visualizan los tres primeros modos superpuestos para mostrar la contribución de cada coseno.

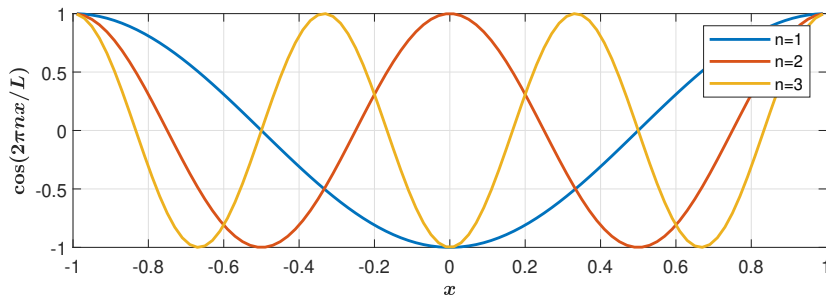


Figura 5.2: Tres primeros modos del término $\cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right)$.

En general, el término fuente resulta de una suma de modos con pesos aleatorios. De esta manera, si se excita un número bajo de modos, la forma del término fuente se asemejará más a un coseno, como se aprecia en la Figura 5.3 en la curva $N_c = 1$. Si el número de modos se sube ligeramente se preserva la forma como una envolvente ($N_c = 3$). Y en el caso de excitar una mayor cantidad de modos, en este caso $N_c = 80$, valor utilizado en los resultados de las secciones siguientes, se obtiene un resultado muy diferente respecto al coseno original.

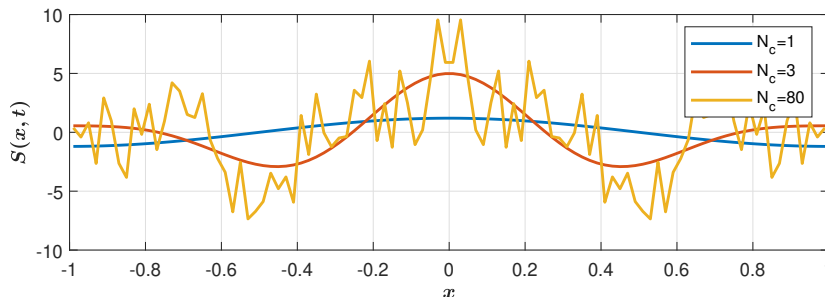


Figura 5.3: Forma del término fuente para distintos números de modos excitados.

A continuación se explica el sistema seguido para procesar los resultados obtenidos de la ecuación de Burgers con término fuente. Por acción del término fuente se generará el régimen turbulento a partir de $t = 200$ s, según [31]. Si se analiza la solución a partir de este tiempo (obteniendo el espectro energético de la solución para un tiempo t dado) se observa que la cascada energética calculada presenta un alto nivel de ruido. Para evitar este problema, se calcularán los espectros energéticos en distintos instantes (de $t = 200$ s a $t = 600$ s cada 4 s) y se promediarán. El procedimiento a seguir se esquematiza en la Figura 5.4. En primer lugar, los 100 resultados $u_j(t)$ del intervalo $t \in (200$ s, 600 s) se convierten al dominio frecuencial mediante la transformada discreta de Fourier (DFT) y se obtiene el espectro energético en cada instante temporal, U_ξ^n , donde $n = 1, \dots, 100$. El espectro energético en el dominio frecuencial se calcula como

$$E_\xi^n = \frac{(U_\xi^n)^2}{2}. \quad (5.8)$$

Así, se cuenta con 100 resultados del espectro energético estadísticamente equivalentes, que se promediarán. De esta manera, con lo cual la solución obtenida no contará con tanto ruido como las individuales.

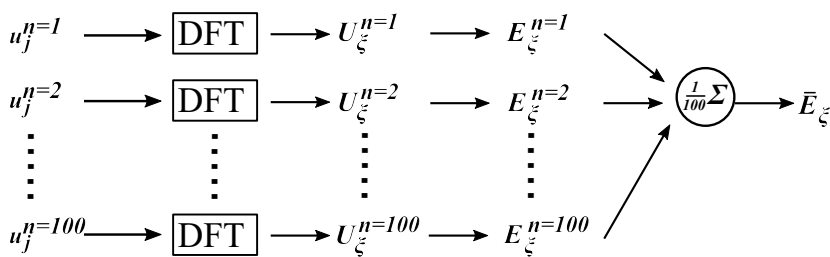


Figura 5.4: Diagrama de bloques para la obtención del espectro energético suavizado \bar{E}_ξ^n .

La resolución de este problema se recoge en la Sección 5.2. Pero primero conviene describir el tipo de forzamiento utilizado.

5.2. Resultados numéricos

El objetivo de este análisis es evaluar distintos métodos numéricos para la resolución de un flujo turbulento. A continuación se presentan resultados de la aplicación de estos métodos al problema descrito en la sección anterior realizando un análisis de sensibilidad a los distintos parámetros involucrados en el problema matemático y en el método numérico. Se han resuelto una serie de casos variando:

- número de armónicos excitados por el término fuente, con valores $N_c = 20, 40$ y 80 ;

- número de celdas en las que se discretiza el dominio, con valores $N = 4096, 8192$ y 16384 ;
- número de Courant-Friedrichs-Levy, con valores $\sigma = 0.1, 0.3, 0.5$ y 0.9 ;
- tipo de esquema numérico: UWC-RK3 y WENO-RK3;
- y orden de la discretización espacial del esquema numérico: 1, 3, 5 y 7.

La Figura 5.5 recoge un ejemplo de solución numérica obtenida mediante simulación en el tiempo final, $u(x, 600)$. Se ha calculado disponiendo un paso temporal constante, $\Delta t = 0.0001$, $N = 4096$ celdas, $N_c = 80$ modos excitados y $\sigma = 0.9$. En ella se muestran las diferencias entre las reconstrucciones espaciales WENO3 (izquierda) y WENO5 (derecha). Ambas Figuras, 5.5a y 5.5b, reflejan la misma forma de onda salvo por diferencias de poca amplitud en los altos números de onda. En las Figuras 5.5c y 5.5d se muestra un detalle de la región del dominio $0.0 \leq x \leq 0.4$ en la que se observa mejor que el esquema de orden 5 captura detalles más finos que el esquema de orden 3.

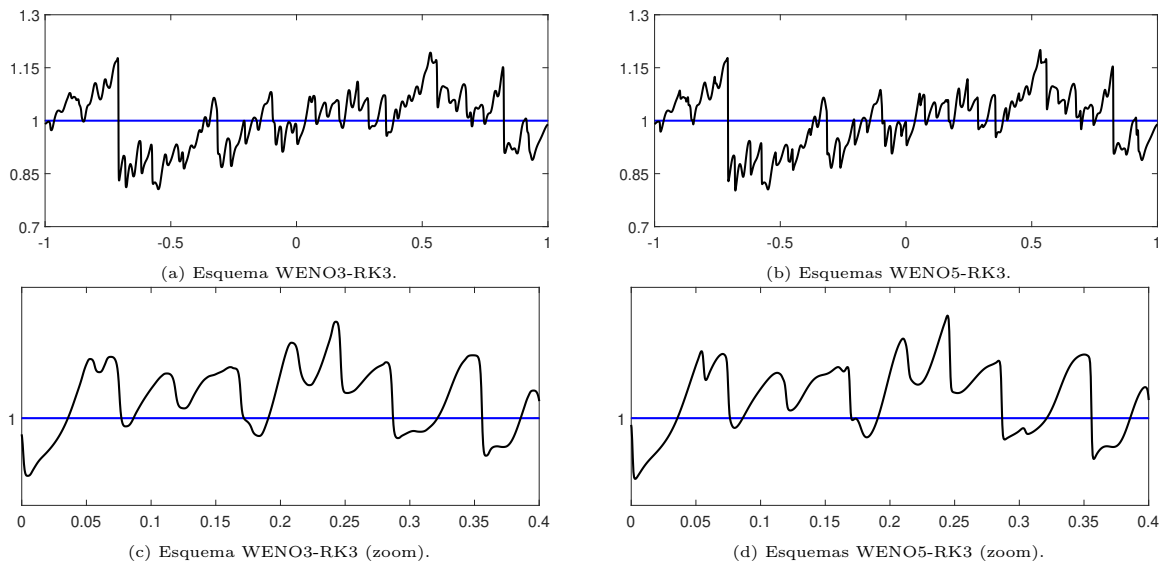


Figura 5.5: Solución $u(x, t)$ en el tiempo $t = 600$ frente a x para los esquemas WENO3-RK3 y WENO5-RK3, junto con una ampliación. Datos fijos: $\sigma = 0.9$, $N_c = 80$, $N = 8192$.

5.2.1. Sensibilidad de la solución al número de modos excitados, N_c

En este apartado se estudia la sensibilidad de la solución al número de modos excitados en la ecuación (5.6). Se considera la resolución del problema (5.5) utilizando tres configuraciones diferentes del término fuente que involucran 20, 40 y 80 modos de excitación. Las simulaciones se llevan a cabo mediante los esquemas UWC5-RK3 y WENO5-RK3. Los datos constantes utilizados en las simulaciones son: el número de celdas $N = 8192$ y $\sigma = 0.9$. En la Figura 5.6 se muestra la solución en el dominio espacial en $t = 600$ s. Se puede apreciar que, conforme aumenta el número de modos excitados por el término fuente, las líneas presentan más fluctuaciones de pequeña amplitud, es decir, para $N_c = 80$ no son tan suaves como para $N_c = 20$. Este resultado es consistente con el análisis del término fuente mostrado en la sección anterior.

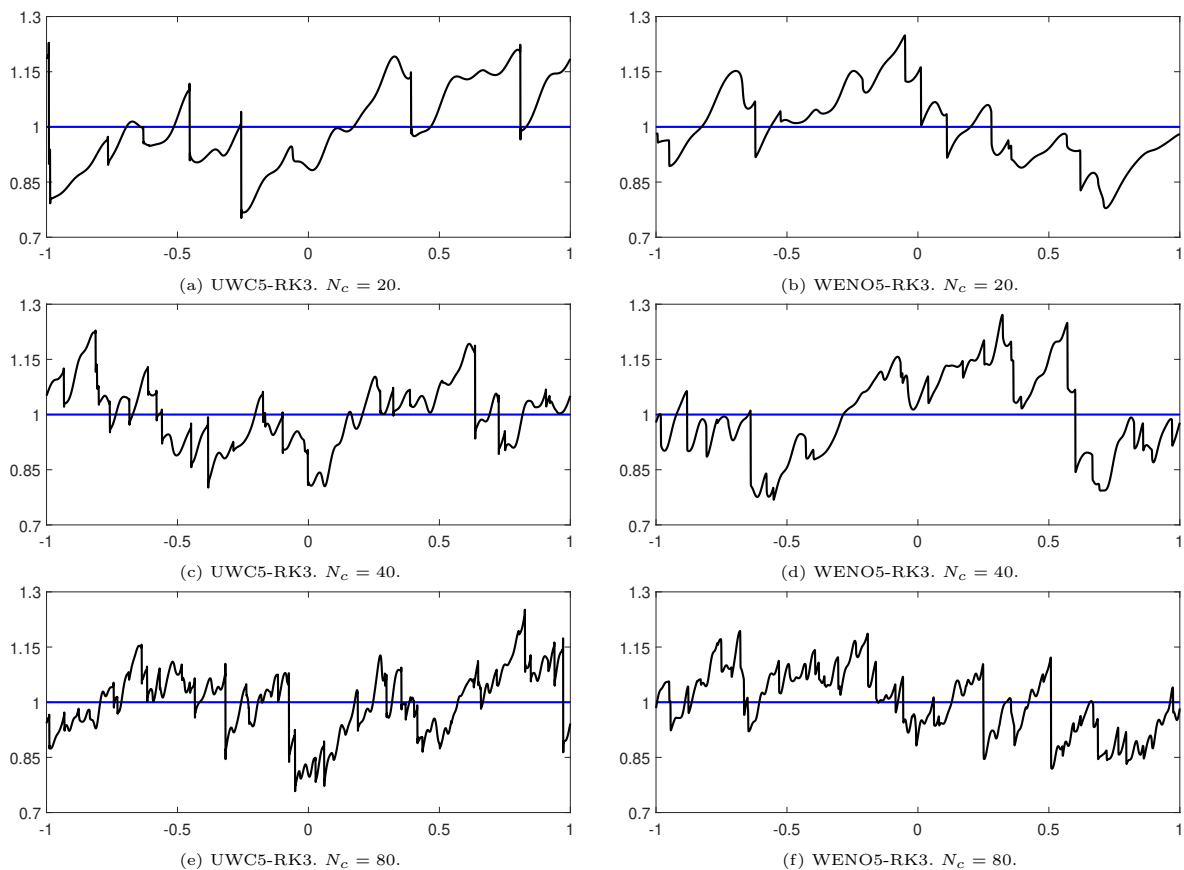


Figura 5.6: Solución $u(x, t)$ frente a x en el tiempo inicial $t = 0$ s (—) y en $t = 600$ s (—) para diferentes N_c . Datos fijos: $\sigma = 0.9$ - $N = 8192$.

En la Figura 5.7 se recogen las cascadas energéticas de los esquemas UWC5-RK3 y WENO5-RK3 con 20, 40 y 80 armónicos excitados por el término fuente. El eje horizontal de estas gráficas es el número de onda k (en escala logarítmica), el cual viene determinado por el número de celdas utilizadas en la discretización en el dominio espacial. El valor máximo de número de onda viene dado por

$$k_{\text{máx}} = \frac{N}{2}. \quad (5.9)$$

Los resultados mostrados con la línea negra (—) se corresponden con la energía cinética (en escala logarítmica) y los de la línea roja (—) se denominan espectro compensado, que representa $\log_{10}(E(k)/k^{-2})$. Este espectro compensado sirve para visualizar de manera más sencilla el adecuado ajuste a la pendiente teórica (región horizontal sin pendiente).

Las seis cascadas presentan una clara división en tres intervalos de valores de k : una primera zona que se ajusta adecuadamente a la pendiente $-5/3$, ecuación (2.17); la segunda, que se asemeja a la pendiente -2 , ecuación (5.3); y un último tramo en el que la cascada sufre una caída más brusca, asociada a la disipación de energía.

Las dos primeras zonas presentan una frontera definida por el número de armónicos excitados N_c en el término fuente. Este valor está representado en las gráficas por una línea discontinua que señala la posición de N_c en escala logarítmica. Conforme aumenta el valor de N_c se ve cómo esta frontera se desplaza hacia la derecha y asimismo lo hace el cambio de pendiente de cada una de las cascadas. Tanto para los métodos UWC como para los WENO se aprecia que la cascada, para los valores excitados por el término fuente, $0 \leq n \leq N_c$, sigue la pendiente $-5/3$ y, para valores mayores de N_c la pendiente -2 . El intervalo de números de onda con pendiente -2 disminuye cuando aumenta N_c , lo cual en este caso concreto no supone pérdida

de información, pues la disipación sucede en números de onda mucho mayores. Es decir, el inicio de la región de disipación es independiente de N_c .

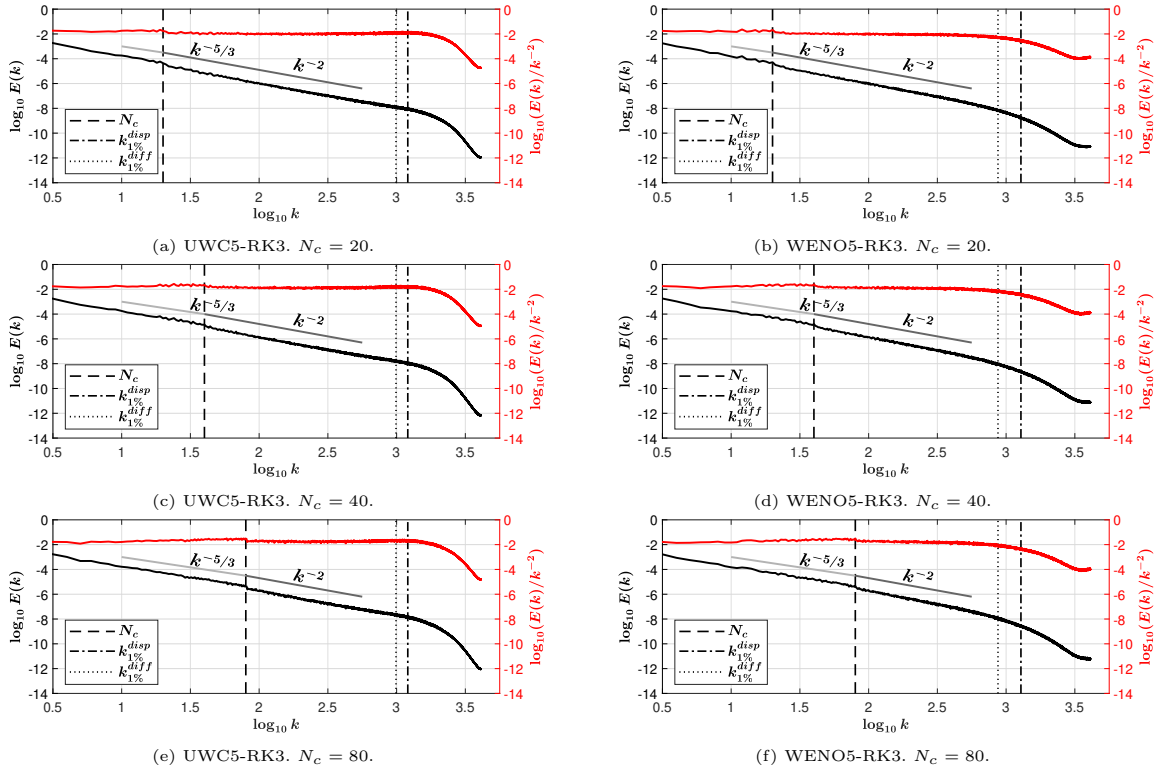


Figura 5.7: Cascadas energéticas para diferentes N_c (—) y sus espectros compensados (—). Datos fijos: $\sigma = 0.9$ - $N = 8192$.

Además de lo explicado, existen otras dos líneas verticales en las gráficas que representan los valores de números de onda obtenidos según el criterio del 1% en el análisis espectral de von Neumann. La variable $k_{1\%}^{disp}$ recoge el valor correspondiente al 1% de error en dispersión; y $k_{1\%}^{diff}$, el 1% de error en difusión. En las Tablas F.1 - F.7 del Apéndice F se recogen los valores calculados en capítulo anterior de $k\Delta x_{1\%}^{disp}$ y $k\Delta x_{1\%}^{diff}$. Para suprimir esta dependencia con la malla es necesario hacer la siguiente conversión

$$N_{1\%} = \frac{k_{1\%} N}{\pi 2}, \quad (5.10)$$

donde N es el número de celdas de la discretización.

Puesto que se ha utilizado unos mismos N y σ , estos valores son los mismos para los tres casos de UWC y para los de WENO, respectivamente, como se observa en la Figura 5.7.

5.2.2. Sensibilidad de la solución al refinamiento de malla, N

El objetivo de esta sección es analizar la sensibilidad de la solución al refinamiento de malla y si la forma de la cascada energética escala adecuadamente al refinar la malla. Para ello, se propone la resolución del problema (5.5) mediante los esquemas UWC5-RK3 y WENO5-RK3, utilizando $N = 4096, 8192$ y 16384 . En la Figura 5.8 se recogen los espectros energéticos obtenidos para estos resultados. Los valores fijos son $\sigma = 0.9$ y el número de modos excitados $N_c = 80$.

Los valores máximos de k que alcanzan las cascadas aumentan conforme aumenta N . Puesto que se dispone el mismo $N_c = 80$, la línea separa las regiones de pendientes $-5/3$ y -2 es la

misma, pero la zona inercial, correspondiente a la pendiente -2 , abarca un rango espectral mayor conforme aumenta el número de celdas.

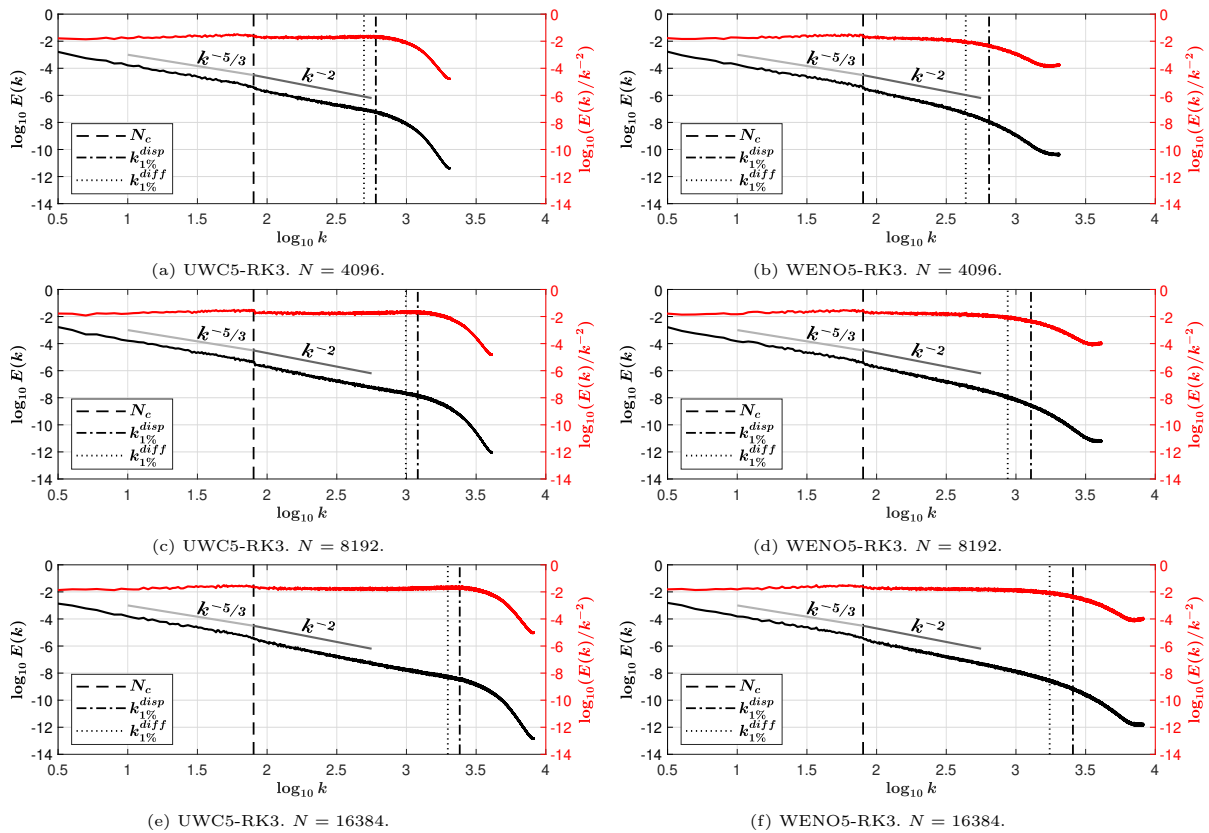


Figura 5.8: Cascadas energéticas para diferentes refinamientos. Datos fijos: $\sigma = 0.9 - N_c = 80$.

Los valores de $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$ son invariantes respecto del producto $k\Delta x$. Es por ello que en la representación de las cascadas energéticas la posición de dichos valores escala con N según la ecuación (5.10). En la Figura 5.8 se observa que $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$ se sitúan al inicio de la región de disipación, con independencia de la malla. En la Figura 5.10 se muestran además dos líneas que representan los cortes de las cascadas con $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$. Estas líneas son horizontales, de manera que se puede concluir que las posiciones de estos puntos de corte son independientes de la malla.

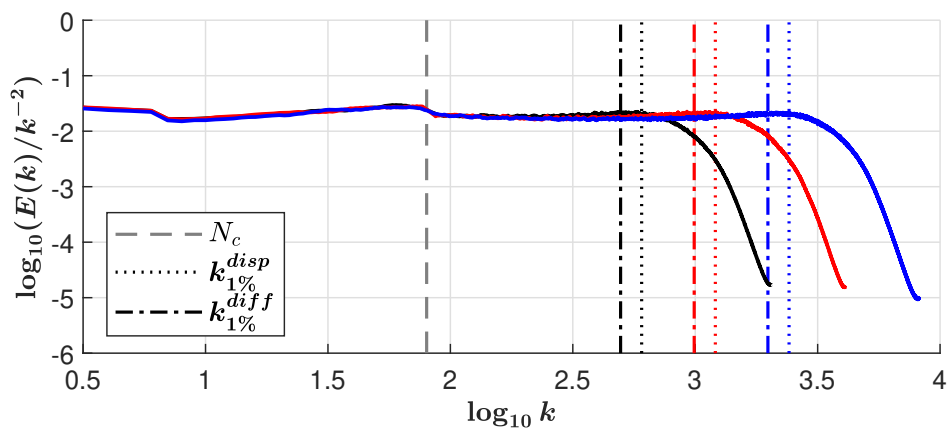


Figura 5.9: Superposición de cascadas para el esquema UWC5-RK3 de varios refinamientos: $N = 4096$ (—), $N = 8192$ (—) y $N = 16384$ (—).

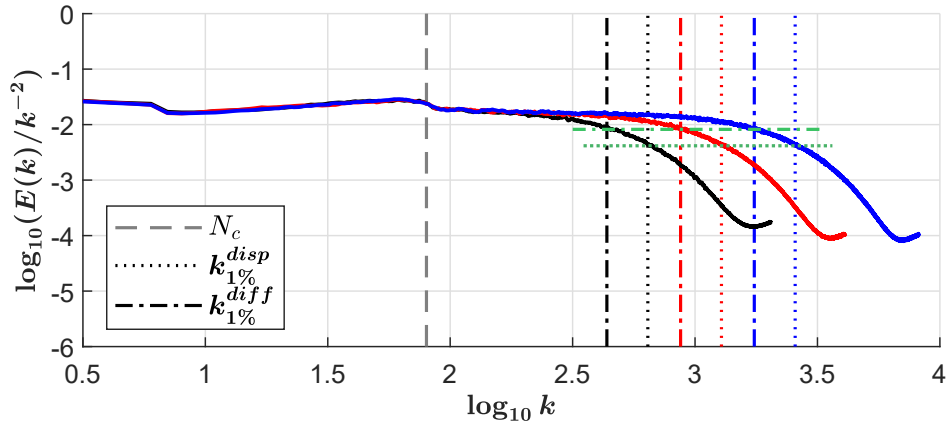


Figura 5.10: Superposición de cascadas para el esquema WENO5-RK3 de varios refinamientos: $N = 4096$ (—), $N = 8192$ (—) y $N = 16384$ (—).

Las Figuras 5.9 y 5.10 representan la superposición de las cascadas energéticas asociadas a las tres soluciones calculadas en este apartado, para los esquemas WENO y UWC. Se observa la convergencia de la solución tanto en la región inercial como en la región de excitación.

5.2.3. Comparación entre esquemas FOU, UWC y WENO

Se propone a continuación una comparación de los siete esquemas (FOU, UWC3-RK3, UWC5-RK3, UWC7-RK3, WENO3-RK3, WENO5-RK3 y WENO7-RK3) para cuatro valores del número CFL, que son $\sigma = 0.1, 0.3, 0.5$ y 0.9 , con el objetivo de evaluar su idoneidad para la resolución del problema (5.5). Las Figuras 5.11, 5.12 y 5.17 recogen las soluciones correspondientes al esquema FOU, los esquemas UWC y los esquemas WENO, para distintos valores de σ .

En lo que respecta al esquema FOU, en la Figura 5.11 se observa una elevada disipación en todo el rango inercial (números de onda superiores a N_c). En dicho rango no se alcanza la pendiente teórica para casi ningún número de onda. Esta disipación disminuye al aumentar σ , haciendo evidente que el esquema de primer orden mejora su comportamiento cuando σ se acerca a la unidad. A pesar de ello, dado que el esquema no reproduce la pendiente teórica ni para dichos valores elevados de σ , no se considera adecuado para la resolución de flujos turbulentos.

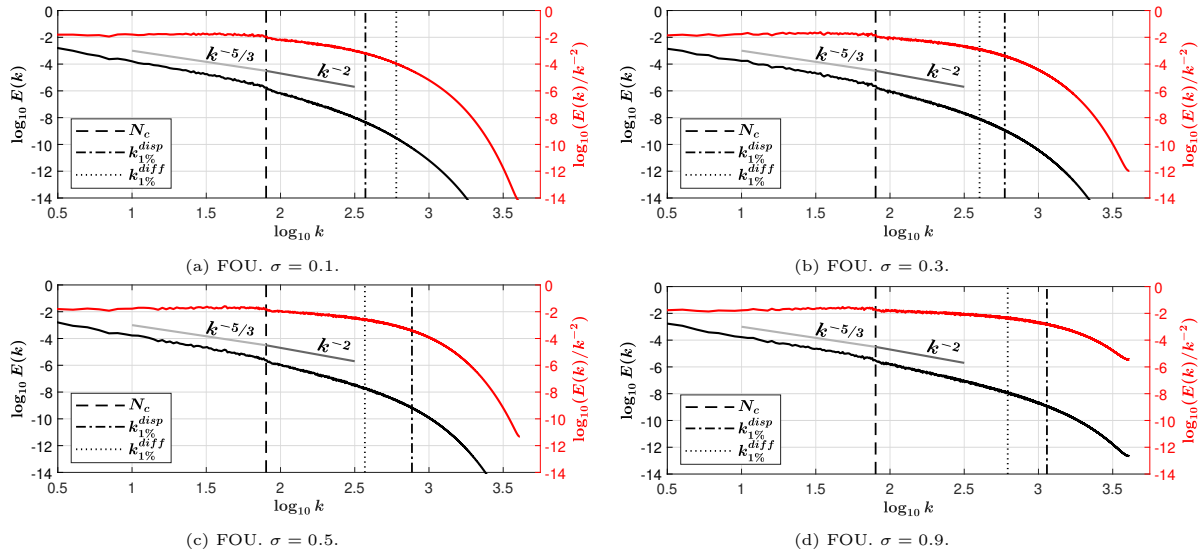


Figura 5.11: Cascadas energéticas para el método FOU con $\sigma = 0.1, \sigma = 0.3, \sigma = 0.5$ y $\sigma = 0.9$. Datos fijos: $N_c = 80 - N = 8192$.

Por otro lado, los esquemas UWC, cuya solución se presenta en la Figura 5.12, sí que son capaces de reproducir la pendiente teórica en la zona inercial en un amplio rango de números de onda. Las cascadas energéticas calculadas mediante estos esquemas presentan un apilamiento de energía en los números de onda previos a la región de disipación [28], comportamiento anómalo e indeseable. Este apilamiento aumenta su magnitud conforme se incrementa el orden del esquema numérico. Los valores de $k_{1\%}^{disp}$ para dispersión y difusión demarcan esta zona de transición.

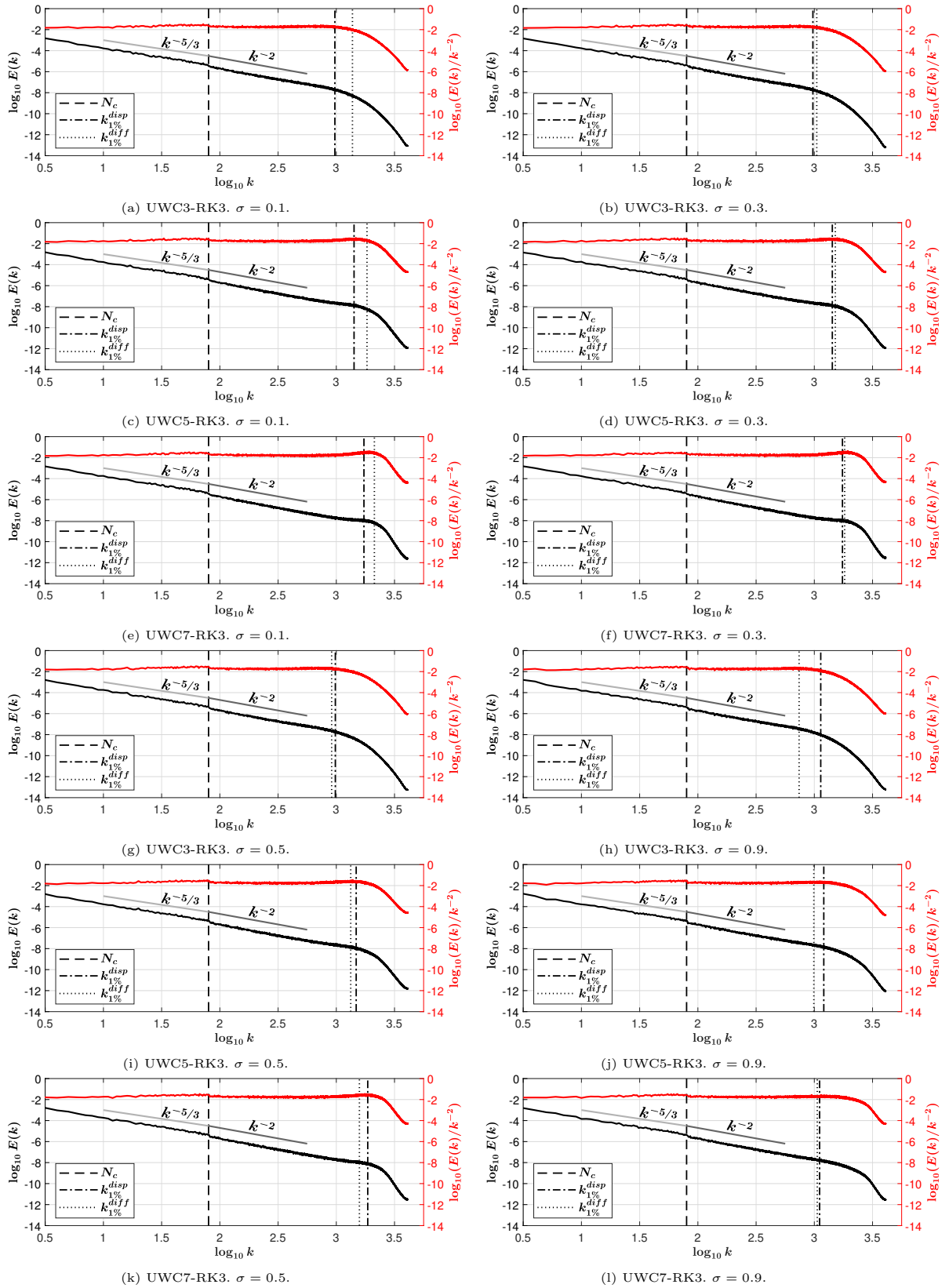


Figura 5.12: Cascadas energéticas para diferentes para métodos UWC con $\sigma = 0.1$, $\sigma = 0.3$, $\sigma = 0.3$ y $\sigma = 0.9$. Datos fijos: $N_c = 80 - N = 8192$.

Observando las cascadas energéticas de los esquemas UWC se puede apreciar que $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$ determinan aproximadamente la posición de los máximos de los apilamientos energéticos. La Figura 5.13 recoge estas comparaciones y refleja un resultado concluyente: los valores de $k_{1\%}$ calculados mediante el análisis de von Neumann representan un buen estimador de la posición del valor máximo del apilamiento en la cascada energética. Las mayores discrepancias entre la posición del máximo y de las $k_{1\%}$ las presenta el esquema UWC3-RK3, pero los otros (UWC5-RK3 y UWC7-RK3) dos esquemas muestran una mejor coincidencia entre $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$ los números de onda asociados a los máximos de apilamiento. Se observa una mejor concordancia con $k_{1\%}^{disp}$, aunque ambos criterios son buenos predictores.

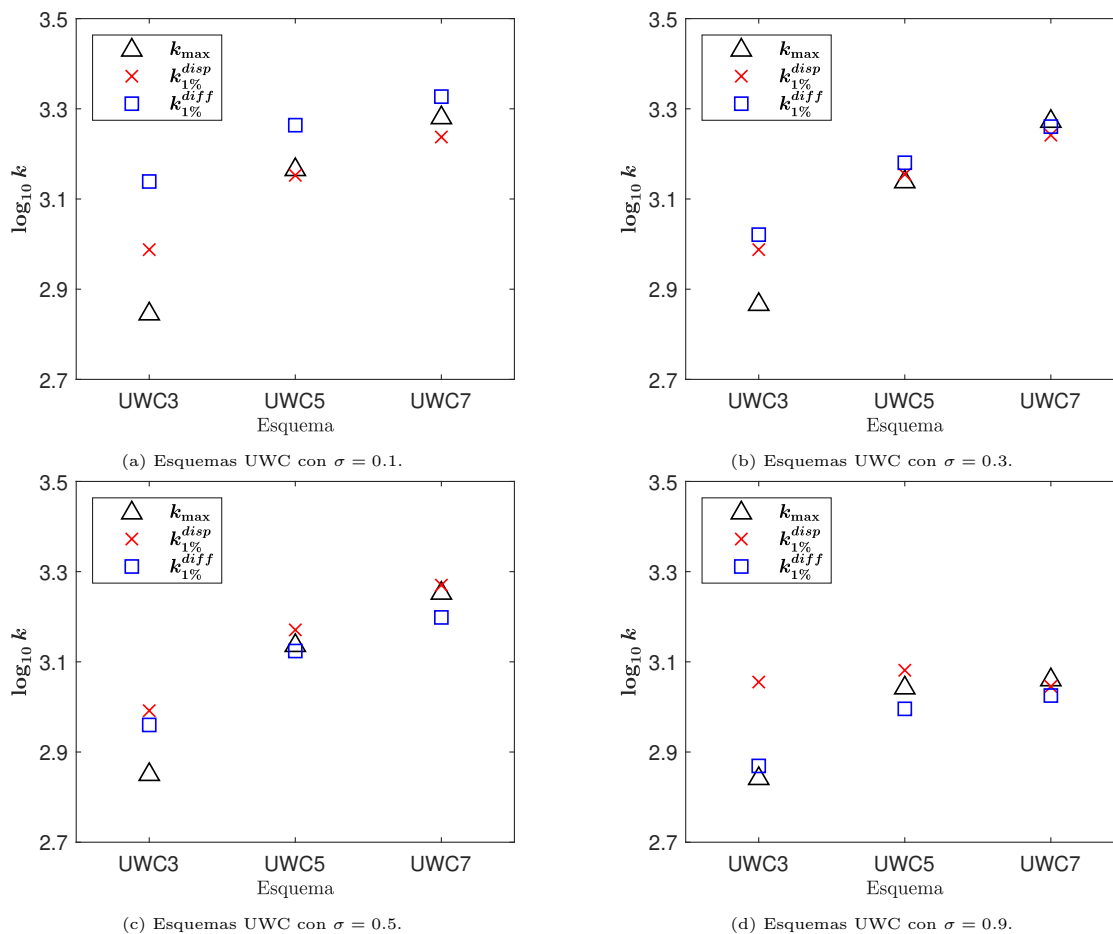


Figura 5.13: Comparación de las $k_{1\%}$ en dispersión y en difusión con las posiciones de los máximos para los esquemas UWC. Datos fijos: $N_c = 80 - N = 8192$.

La presencia del mencionado apilamiento de energía, que se encuentra en torno a las $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$, se observa con claridad analizando el espectro compensado. Comparando los resultados de las Figuras 5.12a, 5.12c y 5.12e (orden 3, orden 5 y orden 7) se aprecia que el valor del espectro compensado en los puntos correspondientes a $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$ del esquema UWC3-RK3 queda por debajo de la tendencia lineal, mientras que para los esquemas UWC5-RK3 y UWC7-RK3 estos mismos valores quedan por encima. A continuación se propone un criterio sencillo para detectar la presencia de apilamiento de energía entorno a las $k_{1\%}$:

1. hallar la pendiente numérica de la cascada χ en la zona inercial, asociada a la cascada de la solución numérica utilizando una aproximación por mínimos cuadrados. De esta manera, la dependencia del espectro energético con la pendiente es

$$E_\chi = k^{-\chi}, \quad (5.11)$$

así que, aplicando logaritmos a ambos lados de la igual se obtiene la relación lineal con la pendiente

$$\log_{10} E_\chi = -\chi \log_{10} k; \quad (5.12)$$

2. extrapolar el valor de la energía correspondiente a $k_1\%$, utilizando la recta obtenida con pendiente χ en el apartado anterior

$$E_{\chi 1\%} = E_\chi(k_1\%); \quad (5.13)$$

3. y, finalmente, calcular la diferencia entre los logaritmos en base 10 de la energía de la cascada numérica y de la energía teórica en la posición de $k_1\%$:

$$\Lambda = \log_{10} E(k_1\%) - \log_{10} E_{\chi 1\%} = \log_{10} \left(\frac{E(k_1\%)}{E_{\chi 1\%}} \right), \quad (5.14)$$

de manera que, según su signo sea positivo o negativo denotará éste la presencia o ausencia del apilamiento de energía, respectivamente. Nótese que valores de Λ cercanos a cero indican una buena correspondencia entre la cascada de la solución numérica y la teórica. Por un lado, si se obtienen valores mayores que cero, $\Lambda > 0$, la cascada numérica queda por encima de la teórica; y, por otro lado, si se obtienen valores tales que $\Lambda < 0$, la cascada numérica queda por debajo de la teórica. Así se obtiene un criterio sencillo para identificar el apilamiento.

Cabe destacar que este criterio se ha diseñado para evaluar el apilamiento de energía en torno a las $k_1\%$ tanto en dispersión como en difusión, Λ^{disp} y Λ^{diff} . En el caso de querer detectar apilamiento de energía en cualquier región, la estrategia sería diferente. Sería necesario evaluar la diferencia entre la pendiente teórica y numérica en toda la región inercial y comprobar si en algún punto se supera el valor teórico.

Los valores de energía teórica extrapolada en $k_1^{diff}\%$, así como los ajustes por mínimos cuadrados y las cascadas energéticas obtenidas en la simulación, se muestran en la Figura 5.14 a modo de ejemplo. En este caso particular, se puede apreciar que $E_\chi(k_1^{diff}\%)$ en el caso de UWC3-RK3 queda por debajo de la cascada energética ($\Lambda^{diff} < 0$), y en el de UWC7-RK3, por encima ($\Lambda^{diff} > 0$).

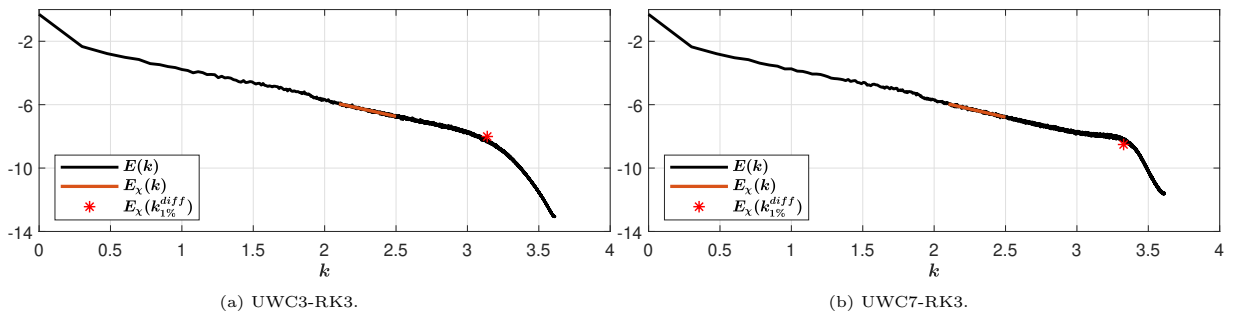


Figura 5.14: Cascadas energéticas para los esquemas UWC3-RK3 y UWC7-RK3 con los ajustes lineales y los puntos $E_\chi(k_1^{diff}\%)$. Datos fijos: $\sigma = 0.1 - N_c = 80 - N = 8192$.

En la Figura 5.15 se representan las diferencias de energía en escala logarítmica, Λ^{disp} y Λ^{diff} (calculadas mediante la ecuación (5.14)), así como $k_1^{diff}\%$ y $k_1^{disp}\%$. Se observa que en términos

generales el apilamiento de energía (medido mediante Λ) disminuye al aumentar el valor de σ . Es posible relacionar esta tendencia con el aumento del error en difusión medido en $k_{1\%}^{disp}$, también mostrado en la Figura 5.15. Un mayor error en difusión a partir de $k_{1\%}^{disp}$ implica la disipación de las fluctuaciones turbulentas que el esquema no propagaría adecuadamente. Por tanto, estas fluctuaciones se atenúan automáticamente evitando estos errores en dispersión. Es en esta situación cuando el esquema numérico hace el papel de modelo *subgrid*, como filtro implícito en las escalas pequeñas. También se observa que las diferencias en la magnitud del apilamiento entre los distintos esquemas ensayados es más acusada para valores bajos de σ .

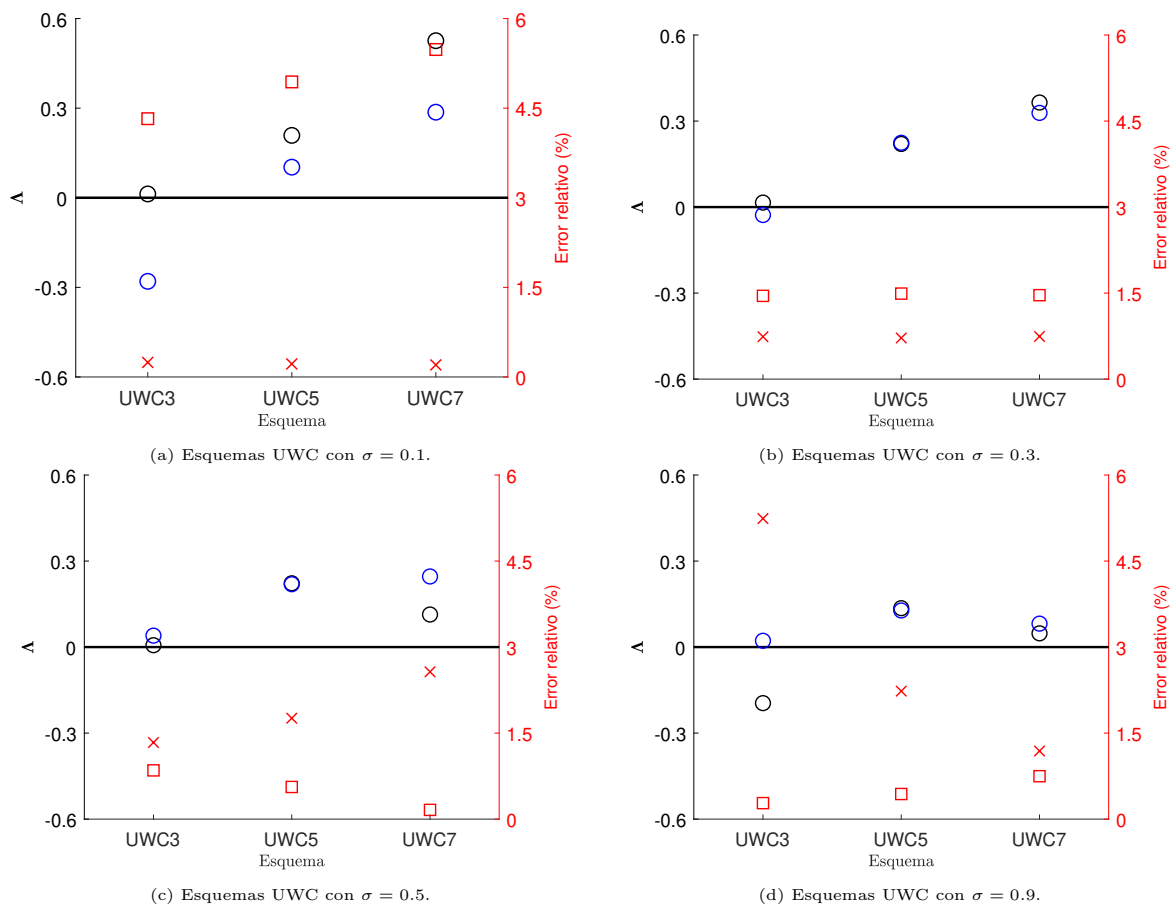


Figura 5.15: Criterio de aparición del apilamiento de energía en el esquema UWC, con $\sigma = 0.1, 0.3, 0.5$ y 0.9 . Leyenda: (—) $\Lambda = 0$, \circ Λ^{disp} , \square Λ^{diff} , \square Error en dispersión (%) y \times Error en difusión (%). Datos fijos: $N_c = 80 - N = 8192$.

Los resultados para las cascadas energéticas de las soluciones calculadas mediante los esquemas WENO-RK3 se recogen en la Figura 5.17. La principal característica que los diferencia de los obtenidos para los esquemas UWC-RK3 radica en la ausencia del apilamiento de energía que en estos se observaba. Por lo tanto, la cascada en ningún momento sobrepasa la pendiente teórica (siempre es más disipativa). Esto se corrobora con las diferencias de energía, Λ , en escala logarítmica mostradas en la Figura 5.16, que presentan en todos los casos valores negativos. Un resultado importante que se extrae de esta figura es que la cascada energética asociada a la solución numérica en $k_{1\%}^{diff}$ presenta un valor Λ^{diff} similar para los esquemas de orden 3, 5 y 7. Dicho de otro modo, según la definición de Λ^{diff} en la ecuación (5.14), el ratio entre la energía de la solución numérica y la analítica, evaluada en $k_{1\%}^{diff}$, es semejante con independencia del orden del esquema numérico. Por lo tanto, se puede concluir que este valor, $k_{1\%}^{diff}$, es un buen predictor de la posición de la región de disipación. Por otro lado, el error asociado a $k_{1\%}^{disp}$, denotado por Λ^{disp} , muestra una variación relevante de un esquema

a otro y, por tanto, este último criterio no es adecuado. Esta afirmación es coherente con la naturaleza de los métodos WENO que poseen un error en disipación predominante sobre el error en dispersión, como se observa en la Figura 5.17.

A la vista de estos resultados, se concluye que los métodos WENO pueden ser adecuados para el diseño de modelos de simulación ILES, haciendo el papel de modelo *subgrid* de disipación. Para la elección y diseño preciso del modelo, se utilizará $k_{1\%}^{diff}$ para estimar la localización de la región de disipación (a partir de la cual se realizará el filtrado automático de las escalas pequeñas). Cabe destacar que la reconstrucción WENO3 es demasiado disipativa, ya que no reproduce la pendiente teórica un amplio rango de la región inercial.

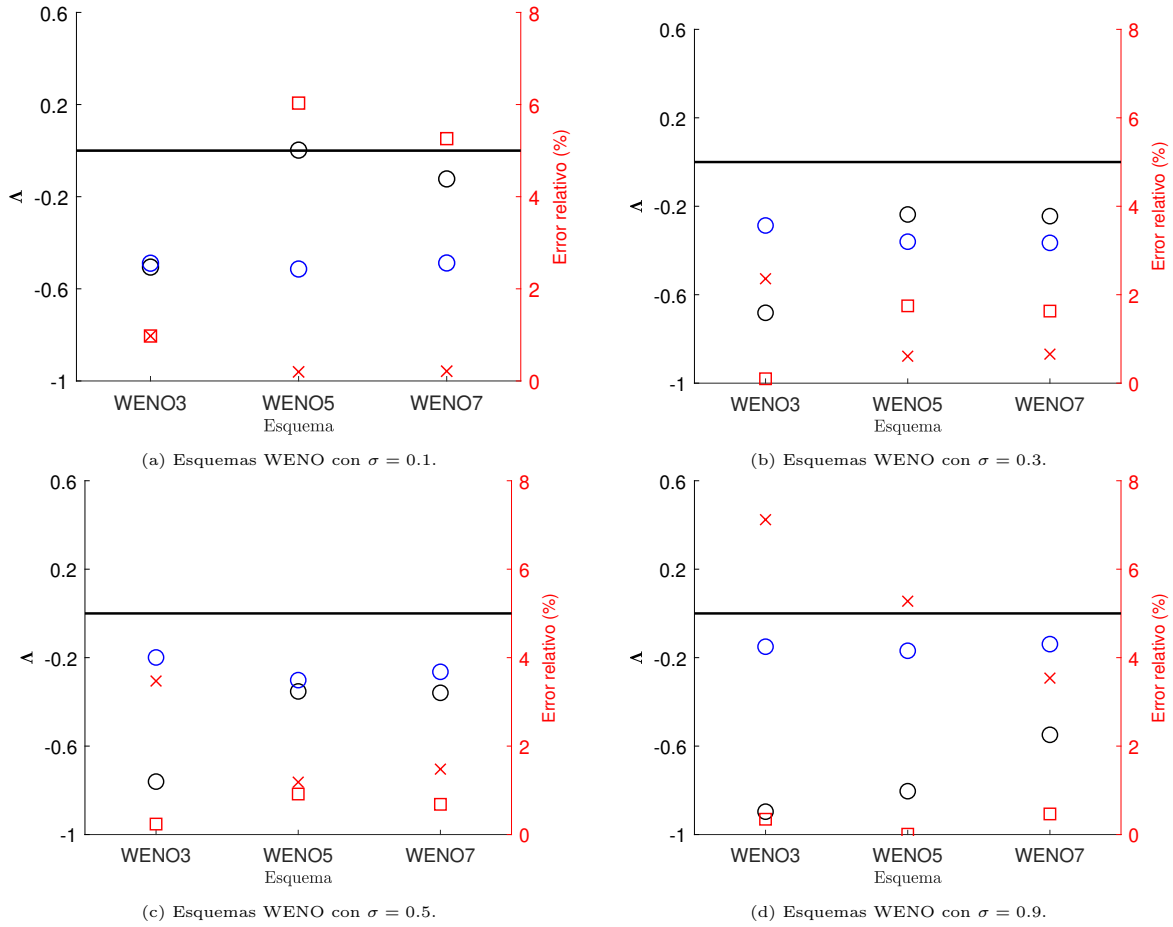


Figura 5.16: Criterio de aparición del apilamiento de energía en el esquema WENO, con $\sigma = 0.1, 0.3, 0.5$ y 0.9 . Leyenda: (—) $\Lambda = 0$, \circ Λ^{disp} , \circ Λ^{diff} , \square Error en dispersión (%) y \times Error en difusión (%). Datos fijos: $N_c = 80 - N = 8192$.

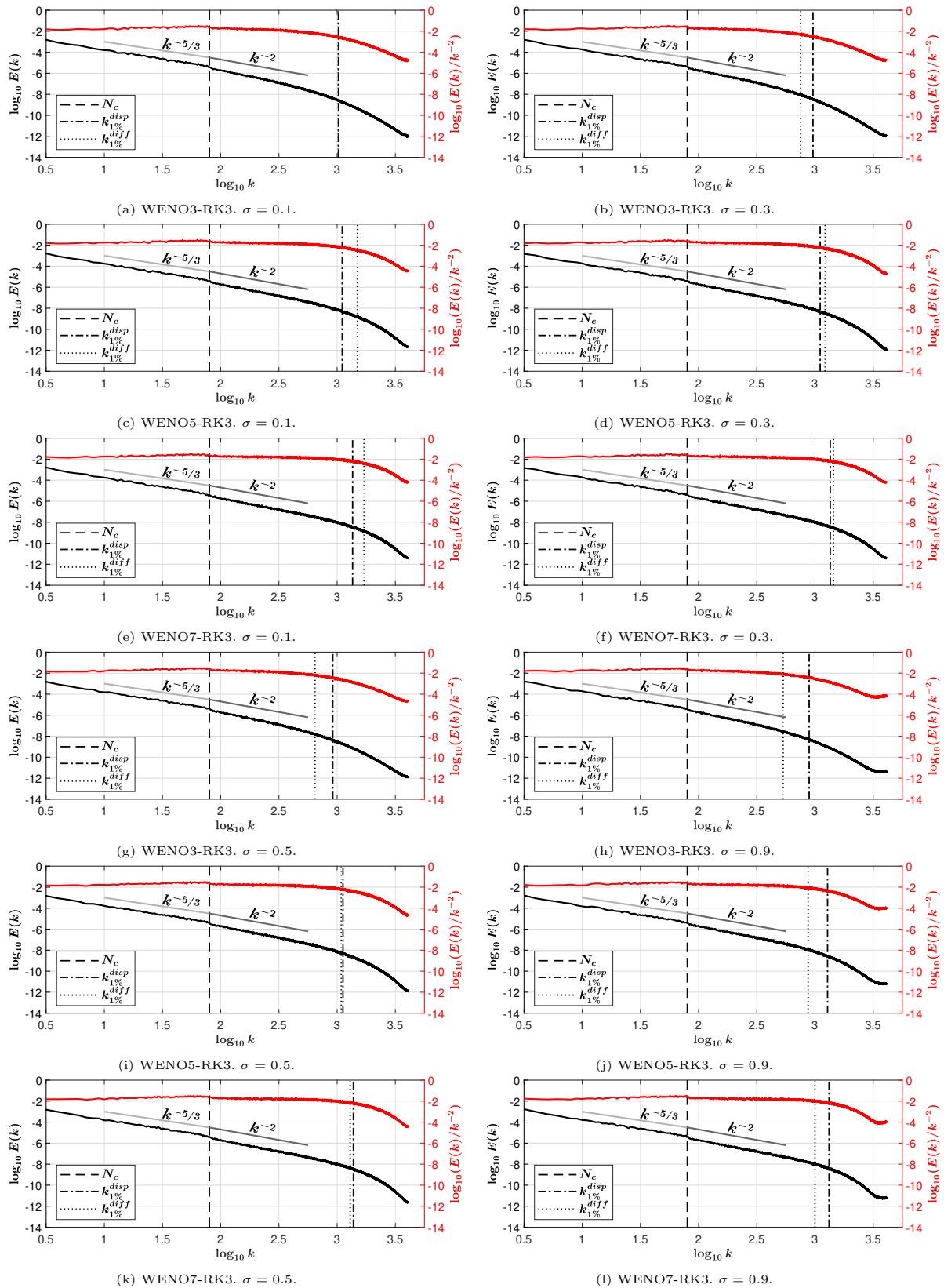


Figura 5.17: Cascadas energéticas para diferentes para métodos WENO con $\sigma = 0.1$, $\sigma = 0.3$, $\sigma = 0.3$ y $\sigma = 0.9$. Datos hijos: $N_c = 80 - N = 8192$.

Aplicación a flujos reales de aguas poco profundas

En este capítulo se explora la aplicación de los métodos previamente analizados a un problema realista que involucra un flujo de aguas poco profundas. Como se detalla en [33], los flujos de aguas poco profundas, de una gran importancia en las ciencias medioambientales, se caracterizan por una dimensión vertical, correspondiente a la profundidad del agua, también llamada calado, de mucha menor escala que las dimensiones horizontales. Debido a esto, el flujo es descrito mediante velocidades con una dependencia bidimensional en el espacio, que resultan del promediado en la vertical. Además de las fronteras sólidas que establece el cauce con el flujo, se da también la existencia de una superficie libre entre el agua y el aire. Aparecen así ondas gravitatorias superficiales que actúan como un mecanismo adicional de disipación energética. La turbulencia se manifiesta en este tipo de flujos por medio de la presencia de, por un lado, estructuras bidimensionales en las escalas grandes (mayores que el calado); y, por otro lado, estructuras tridimensionales en las escalas pequeñas (menores que el calado) que intervienen en los procesos de transferencia y disipación de energía. El espectro energético consta de dos regiones bien separadas asociadas una a la cascada 2D en las escalas grandes y otra a la cascada 3D en las pequeñas. En la Figura 6.1 se muestra una cascada energética compuesta por las dos regiones de este problema. En la región de resolución, en el caso de escoger un esquema numérico tipo UWC, se pueden generar soluciones indeseadas debidas al apilamiento de energía que introduce este esquema. Por esta razón, como se ha concluido en el anterior capítulo, es más conveniente el uso de esquemas tipo WENO que introducen difusión numérica en números de onda anteriores al cambio de región del espectro energético.

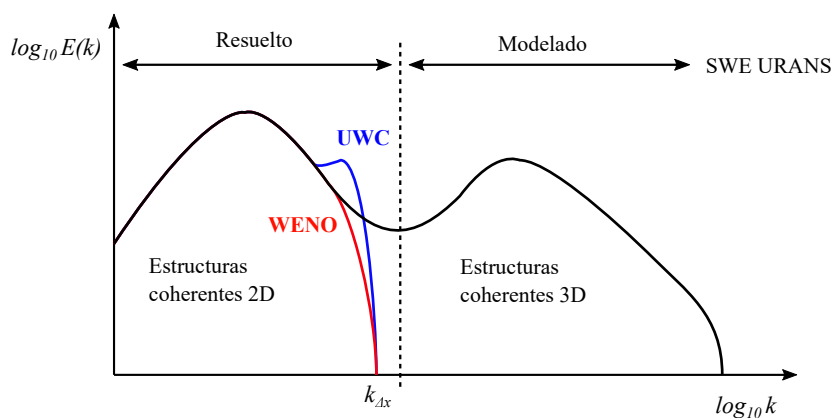


Figura 6.1: Representación del espectro energético del flujo de aguas poco profundas con las dos regiones de estructuras coherentes 2D y 3D. Figura adaptada de [33].

En este trabajo se afronta la resolución del problema del flujo real de aguas poco profundas

por medio de un modelo similar al DA-URANS (depth-averaged unsteady-RANS), presentado en [33]. Esta metodología se centra en resolver las escalas grandes, que contienen las grandes estructuras turbulentas horizontales (vórtices coherentes 2D), por medio de una aproximación de alto orden de la solución numérica; y en modelar el efecto de la turbulencia de pequeña escala (3D) utilizando un término extra de disipación. A esta metodología también se le puede denominar DA-LES [15]. A pesar de las analogías con los métodos LES, la metodología DA-URANS (o DA-LES) no se puede considerar puramente LES, ya que utiliza variables promediadas en la vertical.

El método numérico escogido para la reconstrucción espacial de alto orden es un método WENO de orden 3, mientras que la integración temporal se realizará mediante ADER. Cabe destacar que se ha comprobado que la diferencia entre RK y ADER para este tipo de flujos no es relevante, siendo más decisivo el método de reconstrucción espacial.

Gracias al análisis espectral y a las conclusiones obtenidas con la ecuación de Burgers con término fuente, se espera que el método WENO permita construir un modelo ILES de turbulencia para la parte bidimensional del espectro. Debido a esto, se propone prescindir del modelo SGS que es habitualmente utilizado por otros autores [33]. Por otro lado, la parte tridimensional del espectro, Figura 6.1, no se puede resolver mediante las ecuaciones de aguas poco profundas, ya que éstas sólo consideran movimientos en el plano horizontal y, por tanto, será necesario modelarla. El método utilizado se denomina DA-ILES, complementado con un modelo algebraico de turbulencia para los fenómenos tridimensionales.

6.1. Definición del caso de estudio y su modelo matemático

En [30] se analiza un caso de transporte de soluto pasivo (fluoresceína) en un flujo de aguas poco profundas. Los datos experimentales fueron medidos en un canal de metacrilato y rectangular de 6 m de largo por 0.24 m de ancho, un esquema detallado del canal se muestra en la Figura 6.2, y recogen la concentración de soluto en una sección transversal del canal frente al tiempo. El soluto es vertido al flujo principal cuando éste se encuentra en régimen estacionario desde una cavidad lateral por medio de la apertura de una compuerta hidráulica.

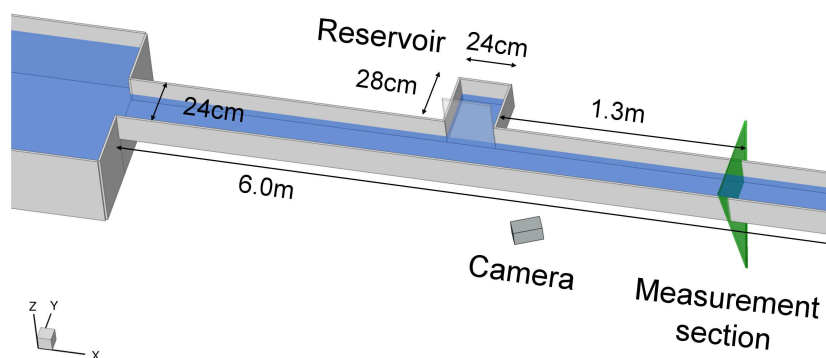


Figura 6.2: Representación del canal utilizado en la experimentación en [30] del laboratorio del área de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Zaragoza.

El número de Reynolds, definido en (2.1), se puede calcular de la siguiente manera. Por un lado, la velocidad promedio del flujo, u , se puede hallar a partir de

$$u = \frac{Q}{A}, \quad (6.1)$$

donde Q es el caudal, cuyo dato es aportado en [30] y tiene un valor de $Q = 2.46\text{ m}^3/\text{h}$, y

donde A es el área mojada, la cual, sabiendo que la anchura del canal es de 24 cm y el calado de 1.6 cm , tiene un valor de $A = 38.4 \text{ cm}$. Con estos valores, la velocidad promedio toma el valor $u = 625 \text{ m/h}$. Por otro lado, el radio hidráulico, D , se calcula como el cociente del área mojada, $A = 38.4 \text{ cm}^2$ por el perímetro mojado, $P = 27.2 \text{ cm}$, que resulta $D = 1.4117 \text{ cm}$. Por último, la viscosidad cinemática del agua a temperatura ambiente toma un valor de $\nu = 1.0034 \text{ mm}^2/\text{s}$. Finalmente, el número de Reynolds que se obtiene es $Re = 2442.66$. Puesto que el número de Reynolds obtenido cumple $Re = 2442.66 > 1800$, el flujo es considerado plenamente turbulento (este criterio se establece en [35] para flujos en canales abiertos).

A continuación se presenta el modelo matemático para el problema de estudio basado en [30], tanto para el soluto como para el flujo de aguas poco profundas. Las ecuaciones para flujos bidimensionales de aguas poco profundas vienen descritas por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\mathbf{G}(\partial \mathbf{U})}{\partial y} = \mathbf{S} + \mathbf{D} \quad (6.2)$$

donde x e y son las coordenadas cartesianas, t es el tiempo. El vector de variables conservadas $\mathbf{U} = \mathbf{U}(x, y, t)$ tiene la forma

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} h \\ hu \\ hv \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

con h la profundidad del agua y u y v las velocidades promedio vertical del flujo en las direcciones x e y respectivamente. Los flujos físicos en las direcciones x e y son respectivamente

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} hu \\ hu^2 + \frac{1}{2}gh^2 \\ huv \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} hv \\ hvu \\ hv^2 + \frac{1}{2}gh^2 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

con $g \in \mathbb{R}$ la aceleración de la gravedad.

El término fuente \mathbf{S} incluye los efectos derivados de la pendiente del lecho, \mathbf{S}_z , y de la rugosidad del mismo, \mathbf{S}_f , que tienen la forma

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_f = \begin{pmatrix} 0 \\ -gh \frac{\partial z_b}{\partial x} \\ -gh \frac{\partial z_b}{\partial y} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -c_f u \sqrt{u^2 + v^2} \\ -c_f v \sqrt{u^2 + v^2} \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

donde z_b es la altura del lecho, de manera que $\frac{\partial z_b}{\partial x}$ y $\frac{\partial z_b}{\partial y}$ son las pendientes del mismo en las direcciones x y y , respectivamente; y donde c_f es el coeficiente de fricción calculado a partir de la formulación de Manning

$$c_f = \frac{gn^2}{h^{1/3}}, \quad (6.6)$$

donde n es el coeficiente semiempírico de Manning.

El término de difusión \mathbf{D} se puede calcular por medio de la aproximación de Boussinesq [20] como sigue

$$D_i = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[h\nu_e \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right], \quad (6.7)$$

donde la viscosidad ν_e se puede descomponer en la suma de viscosidad cinemática, ν , debida a la difusión molecular, y viscosidad turbulenta, ν_t . Es habitual descomponer este término como sigue

$$\nu_t = \sqrt{(\nu_t^h)^2 + (\nu_t^v)^2}, \quad (6.8)$$

donde ν_t^h es la componente horizontal, relacionada con la disipación turbulenta de las estructuras coherentes en escalas grandes (2D), y donde ν_t^v es la componente vertical, relacionada con la disipación en las escalas pequeñas (3D).

La actuación de la componente horizontal, debido principalmente a los gradientes de velocidad horizontal, no se contempla en la resolución del ejemplo que se propone en este capítulo, debido a que su papel es realizado por la reconstrucción espacial tipo WENO, como se ha visto en las conclusiones del capítulo anterior. Por ello, se anulará este término: $\nu_t^h = 0$. En cuanto a la componente vertical, generada por la fricción con el lecho, viene dada por

$$\nu_t^v = \lambda U^* h \quad (6.9)$$

donde λ es un coeficiente empírico y $U^* = \sqrt{c_f(u^2 + v^2)}$ es la velocidad cortante con el fondo. La hidrodinámica del problema está descrita por las ecuaciones de aguas poco profundas en 2D, a pesar de que el flujo real sea 3D, por lo que es necesario introducir un modelo que represente los efectos de la turbulencia tridimensional en las pequeñas escalas. La dinámica del soluto viene descrita por la ecuación del transporte promediada en la vertical

$$\frac{\partial (h\phi)}{\partial t} + \frac{\partial (h\phi u)}{\partial x} + \frac{\partial (h\phi v)}{\partial y} = \nabla (\mathbf{K}\nabla\phi), \quad (6.10)$$

donde ϕ es la concentración promedio vertical de soluto y \mathbf{K} es el tensor de dispersión-difusión, cuyo modelo tiene la siguiente forma

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_L & 0 \\ 0 & K_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_L h U^* & 0 \\ 0 & \epsilon_T h U^* \end{pmatrix}, \quad (6.11)$$

con ϵ_L y ϵ_T son los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal, respectivamente, que reciben en [30] los siguientes valores

$$\begin{aligned} \epsilon_L &= 5.93 \\ \epsilon_T &= 0.15 \end{aligned} \quad (6.12)$$

6.2. Análisis de los resultados numéricos

La Figura 6.3 muestra el resultado de medir la concentración de soluto promediada en la vertical (según la escala de colores) distribuida en la sección transversal (eje de ordenadas) frente al tiempo (eje de abscisas).

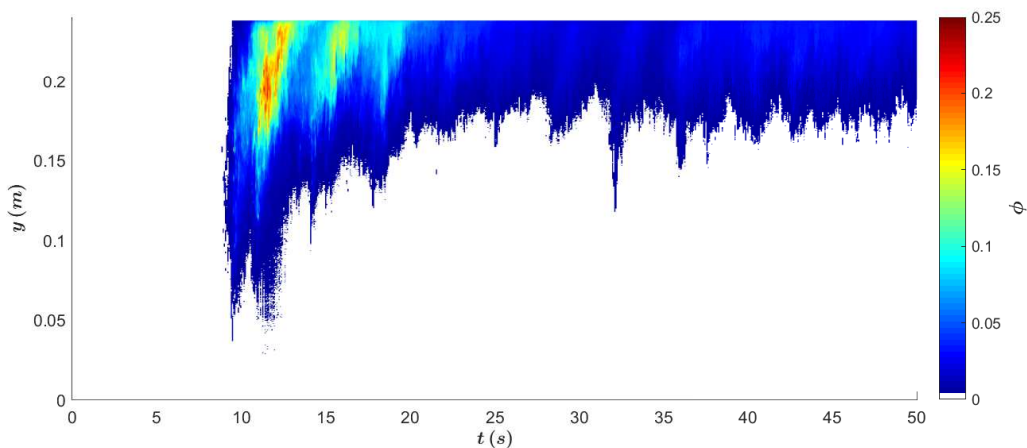


Figura 6.3: Resultado experimental del problema recogido en [30].

En primer lugar se propone un ejemplo de simulación sin difusión en el soluto ($\epsilon_L = 0$ y $\epsilon_T = 0$). La Figura 6.4 muestra estos resultados, en la que se puede observar que la distribución de concentración del soluto no alcanza tanta extensión como en los resultados experimentales de la Figura 6.3. Se aprecia que los niveles de concentración son muy altos, alcanzando los valores máximos en casi toda su extensión, lo cual es debido a la ausencia de difusión. La resolución del soluto sin modelo de mezcla para los fenómenos tridimensionales no arroja soluciones parecidas a las medidas experimentalmente, por lo que queda patente la necesidad de modelar el efecto de la turbulencia de pequeña escala (3D) también para el soluto, como se ha mencionado anteriormente.

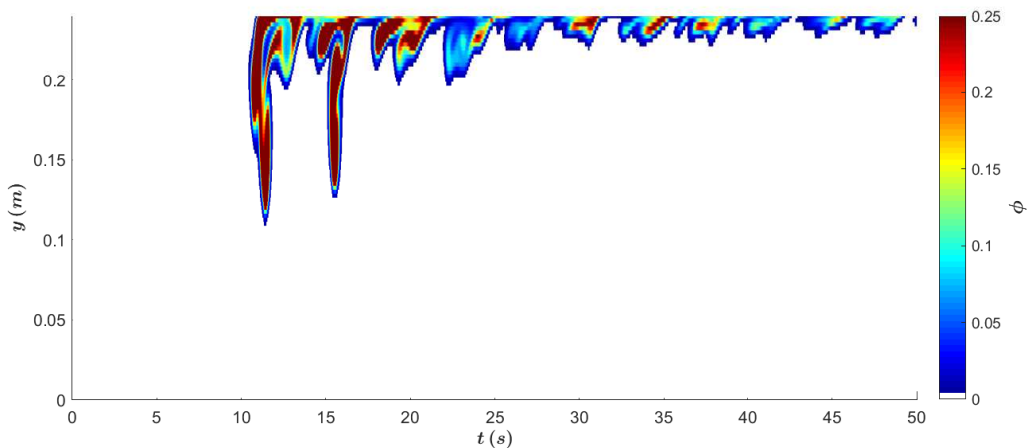


Figura 6.4: Resultado numérico del problema propuesto en [30]. Coeficientes de dispersión: $\epsilon_L = 0.0$ y $\epsilon_T = 0.0$.

Asumida esta necesidad de dar valores no nulos a los coeficientes de dispersión del soluto, se dispone en primer lugar $\epsilon_L = 1.0$ y $\epsilon_T = 1.0$. El resultado, mostrado en la Figura 6.5, presenta una distribución de concentración de soluto más parecida a la experimental que en el caso de dispersión nula. La magnitud de esta distribución es mayor en la dispersión transversal, y . Esto es debido a que los valores ideales del coeficiente de difusión transversal son menores según [30], así que en el siguiente caso se bajará su valor. En torno a los tiempos $t = 10$ s y $t = 15$ s se presentan formas más alargadas y rectas en que las que muestra la Figura 6.3.

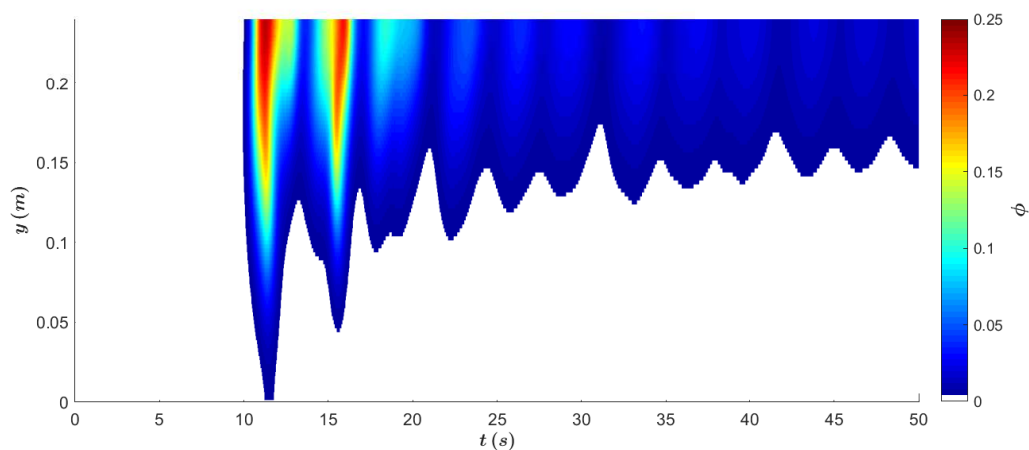


Figura 6.5: Resultado numérico del problema propuesto en [30]. Coeficientes de dispersión: $\epsilon_L = 1.0$ y $\epsilon_T = 1.0$.

En el siguiente caso se disponen los valores de los coeficientes de difusión propuestos en [30], a saber $\epsilon_L = 5.93$ y $\epsilon_T = 0.15$. Debido a esta disminución del valor del coeficiente de difusión transversal, se ha reducido la amplitud de la concentración en la sección transversal, como se puede apreciar en la Figura 6.6. Sin embargo, la amplitud en y de la concentración es menor que la medida experimentalmente, así que se podría optar por un valor del coeficiente de difusión transversal entre el dispuesto en este ejemplo y el del anterior, es decir, $0.15 \geq \epsilon_T \geq 1.0$. La concentración en los lugares en los que presentan mayores valores es más alta que en el caso experimental, por lo tanto convendría bajar el valor del coeficiente de difusión longitudinal.

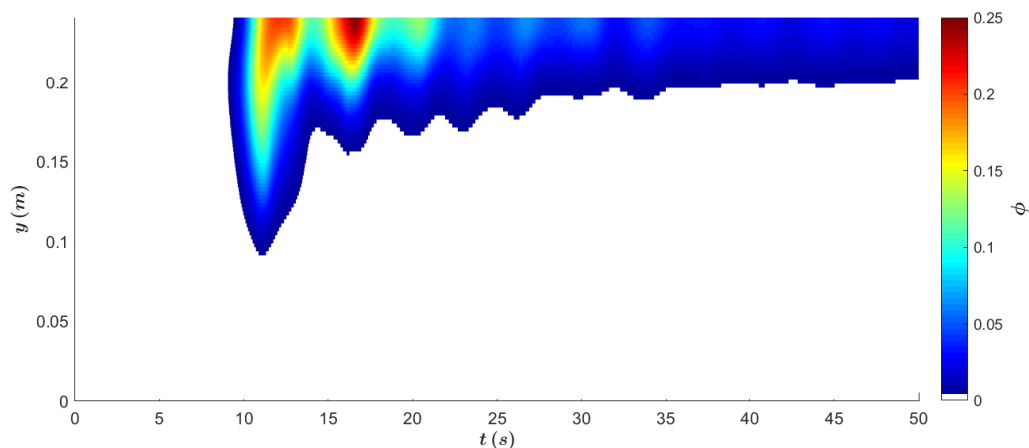


Figura 6.6: Resultado numérico del problema propuesto en [30]. Coeficientes de dispersión: $\epsilon_L = 5.93$ y $\epsilon_T = 0.15$.

Subiendo el valor del coeficiente de difusión hasta $\epsilon_T = 0.5$, como se muestra en la Figura 6.6, se reducen los niveles de la concentración hasta resultados semejantes a los datos experimentales de la Figura 6.3. Sin embargo, en este caso se obtienen valores ligeramente inferiores de concentración en los máximos. Asimismo, aparecen regiones de concentración intermedia para valores del tiempo $t \geq 20$ s que no se corresponden con los resultados experimentales.

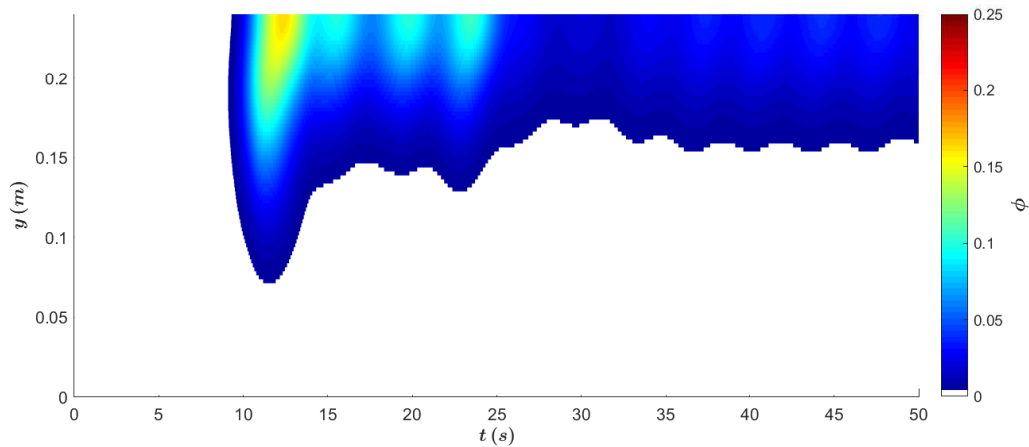


Figura 6.7: Resultado numérico del problema propuesto en [30]. Coeficientes de dispersión: $\epsilon_L = 5.93$ y $\epsilon_T = 0.5$.

En este tipo de flujos de aguas poco profundas, a pesar de ser modelados bidimensionalmente, existen fenómenos tridimensionales que afectan de manera relevante a la dinámica del problema. Por ejemplo, en los instantes inmediatamente posteriores a la apertura de la compuerta que guarda el soluto en la cavidad lateral se genera una rotura de presa transversal a la dirección del canal. Estos fenómenos pueden generar aceleraciones no despreciables en la dirección vertical, debido a lo cual se les denomina no hidrostáticos. Las ecuaciones de aguas poco profundas proponen un modelo hidrostático del flujo que no recoge este tipo de fenómenos. En consecuencia, la importancia para una resolución más precisa de este tipo de flujos no recae en el cálculo riguroso de los vórtices 2D sino en el modelado de fenómenos subgrid, así como estos otros fenómenos (presión no hidrostática, efectos dispersivos de propagación de ondas, etc.), que actualmente no representan los términos convectivos de las ecuaciones en (6.2).

Capítulo 7

Conclusiones

Aprendizaje personal

Al término de este trabajo conviene hacer una síntesis del conocimiento consolidado y del aprendizaje nuevo obtenido en su realización. En primer lugar, y siguiendo un orden coherente con el texto, ha sido necesario generar un conocimiento sobre turbulencia para afrontar de manera eficaz la realización del mismo. Con este motivo, se han explorado de manera teórica las características y la problemática básicas de la turbulencia por medio de la consulta bibliográfica, extendida tanto a libros de formación académica como a artículos de investigación científica. Se han asentado conocimientos sobre resolución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales en 1D, a saber: ecuación lineal advectiva y ecuación de Burgers; así como sobre resolución numérica de sistemas hiperbólicos no lineales, concretamente, las ecuaciones de aguas poco profundas.

Con el fin de llevar a cabo la programación de esquemas numéricos de alto orden de manera satisfactoria y útil para el objetivo del trabajo, se ha ampliado el conocimiento acerca del método de discretización de volúmenes finitos. Se ha afrontado, por un lado, la reconstrucción espacial de alto orden con esquemas tipo WENO y UWC y, por otro lado, la integración temporal de las ecuaciones diferenciales mediante métodos de tipo ADER y Runge-Kutta hasta lograr el desarrollo de un código de simulación eficaz y versátil que abarca los órdenes 1, 3, 5 y 7 para la reconstrucción espacial de los tipos UWC y WENO, y los órdenes 1, 2 y 3 para la integración temporal de tipo Runge-Kutta. Este programa ha sido preparado para resolver tanto la ecuación lineal advectiva como la ecuación de Burgers y, para su realización, se ha utilizado el lenguaje de programación C. Asimismo, ha sido conveniente el uso de herramientas de resolución numérica en paralelo (OpenMP) para optimizar el tiempo de computación (en algunos casos se han reducido tiempos del orden de una semana a tiempos del orden de varias horas). Estas técnicas de cálculo han promovido la familiarización con la computación de alto rendimiento y el uso de servidores de cálculo (en particular, se ha utilizado un cluster de cálculo del CSIC).

En el análisis espectral de von Neumann ha sido necesario el desarrollo explícito completo de los esquemas utilizados. En cuanto al análisis espectral aproximado ha sido necesaria la escritura de programas en Matlab en los que se trabaja en el dominio frecuencial por medio de herramientas como la transformada discreta de Fourier (DFT). También se ha preparado un programa en Matlab para el análisis de los resultados numéricos de la ecuación de Burgers y la representación de las cascadas energéticas.

Conclusiones generales

El objetivo fundamental de este trabajo ha sido analizar el comportamiento de algunos esquemas numéricos para distintos números de onda, con la finalidad de evaluar su adecuación

a la resolución de flujos turbulentos. Para ello, se han estudiado las características dispersiva y difusiva de los esquemas FOU, UWC y WENO, potenciales candidatos para la resolución de turbulencia.

El análisis espectral se ha realizado mediante un método aproximado basado en la DFT. Primero, ha sido necesario analizar la convergencia de este método para determinar el número mínimo de puntos con los que discretizar el espacio $k\Delta x = [0, 2\pi]$ que permita obtener una solución en la región asintótica. Se observó que eran necesarios al menos $N = 4000$ puntos. Por otro lado, también ha sido necesario validar este método mediante resultados analíticos proporcionados por el análisis tradicional de von Neumann para un esquema lineal.

Este análisis aproximado ha permitido analizar el comportamiento de los esquemas FOU, UWC y WENO para distintos números de onda. El denominado criterio del 1%, que se basa en un error del 1% en dispersión/difusión permite determinar el rango del espectro adecuadamente resuelto para cada uno de ellos. Con este criterio se han extraído los valores $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$. Se ha analizado la dependencia de estos valores respecto al número de Courant-Friedrichs-Levy, σ , y, en términos generales, se ha observado que el error en difusión y el error en dispersión asociados a dichos números de onda aumenta y disminuye respectivamente. También se ha obtenido una clasificación de la estabilidad de los diferentes esquemas según el valor de σ .

Una vez analizadas las características de los esquemas numéricos a utilizar, estos se han puesto a prueba mediante la resolución de un problema no lineal unidimensional que emula el comportamiento de la turbulencia para comprobar algunas de sus características propias. Este problema se modela mediante la ecuación de Burgers. Debido a las particularidades de esta ecuación, ha sido necesario introducir un término fuente en la ecuación que aportara un nivel de energía constante, al cual se le puede asociar la producción de las fluctuaciones turbulentas. Se ha utilizado la DFT para trabajar en el dominio frecuencial, permitiendo así el cálculo del espectro energético de la solución.

Atendiendo a los resultados, en primer lugar, se han comprobado cuestiones básicas esperadas desde el punto de vista teórico. Por un lado, el término fuente excita fluctuaciones mediante un conjunto de modos cuyo máximo viene determinado por N_c , así que se ha comprobado variando este valor que los cambios de pendiente de la cascada seguían estos valores máximos de excitación. Por otro lado, se ha demostrado que la forma de la cascada energética escala adecuadamente al refinar la malla, cuyos valores máximos de resolución de k coincidían como era deseado con el número de celdas utilizadas. Una vez comprobados estos fundamentos, se han analizado los resultados según el esquema utilizado. En el caso de los esquemas tipo FOU, la disipación es muy elevada, de manera que son incapaces de reproducir la cascada energética teórica en el rango inercial, aunque para valores grandes de σ mejora. Los métodos UWC se caracterizan por presentar apilamientos energéticos al final de la zona inercial, un efecto indeseable en la resolución de flujos turbulentos. Se ha comprobado que las posiciones de los valores de máximo apilamiento energético vienen adecuadamente determinadas por los valores de $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$. En general, el apilamiento disminuye para valores mayores de σ , ya que la difusión aumenta. Por último, se observa que los esquemas tipo WENO no presentan apilamiento. A través de la comparación de los resultados numéricos y el análisis espectral, se concluye que $k_{1\%}^{diff}$ es un buen predictor de la posición de la región de disipación, puesto que presenta valores de Λ^{diff} semejantes para WENO3-RK3, WENO5-RK3 y WENO7-RK3. Así que los métodos WENO pueden ser adecuados para el diseño de modelos de simulación ILES, haciendo el papel de modelo subgrid de disipación a partir del valor predictivo de $k_{1\%}^{diff}$.

Estas conclusiones se han puesto en práctica en la última parte del trabajo, mediante la resolución de un flujo real turbulento con transporte de soluto, utilizando el modelo matemático de las ecuaciones de aguas poco profundas. En este tipo de flujos la turbulencia es predominantemente bidimensional, pero existe una componente tridimensional de pequeña escala.

Este movimiento tridimensional, que no puede ser resuelto por las ecuaciones de aguas poco profundas, requiere un modelado. Esto se hace evidente en los resultados numéricos que se obtienen cuando se prescinde de dicho modelo, ya que presentan distribuciones de concentración de soluto muy elevadas y localizadas (insuficiente difusión), en comparación con las de los datos experimentales. Siguiendo la metodología ILES, se prescinde del modelo SGS en la parte bidimensional de las escalas grandes, puesto que su efecto lo suplirá el esquema WENO. Con unos valores adecuados de los coeficientes de difusión (obtenidos de la bibliografía) se pueden reproducir satisfactoriamente los datos experimentales. Por lo tanto, cabe concluir que la importancia principal para una precisa resolución de flujos de aguas poco profundas no reside tanto en el cálculo riguroso de los vórtices 2D, sino en la modelización de los fenómenos no resueltos a nivel de celda. Para mejorar las capacidades predictivas del modelo, además sería de utilidad considerar fenómenos no hidrostáticos y dispersivos.

Aportaciones

A continuación se presenta una lista que recoge las aportaciones derivadas de la realización de este trabajo, comenzando por las conclusiones más relevantes:

- los esquemas tipo WENO son adecuados para el diseño de modelos de simulación ILES, puesto que la disipación numérica del esquema actúa como modelo subgrid;
- el valor $k_{1\%}^{diff}$ predice adecuadamente el comienzo del rango de números de onda a partir del cual los esquemas WENO introducen disipación numérica;
- asimismo, los valores $k_{1\%}^{disp}$ y $k_{1\%}^{diff}$ predicen apropiadamente las posiciones de los máximos de los apilamientos energéticos que sucede en los métodos UWC;
- en flujos reales de agua resueltos por medio de las ecuaciones de aguas poco profundas, que modelan el flujo bidimensionalmente, es necesario también un modelado de las componentes tridimensionales de pequeña escala para representarlos adecuadamente;
- con las conclusiones anteriores se ha adaptado un modelo de simulación de alto orden para las ecuaciones de aguas poco profundas, utilizando la metodología ILES. Se ha reproducido un experimento de laboratorio que involucra el transporte transitorio de un soluto en un canal.

En segundo lugar se lista una serie de programas desarrollados para el análisis espectral y para la resolución de la ecuación de Burgers. Estos códigos se pueden encontrar en un repositorio digital en la siguiente dirección web: <https://github.com/navasmontilla/burgulence>.

- Código `analisisespectralalgebraico.m`: programa en lenguaje Matlab con el que se lleva a cabo el análisis espectral de von Neumann analítico sobre los esquemas:
 - UWC3-ADER1, • UWC1-RK2, • y FOU.
 - UWC3-ADER2, • UWC3-RK2,
 - UWC3-ADER3, • UWC3-RK3

Este código requiere además las funciones:

- `plotcombined.m`, • `plotnotpolar.m`
- `plotmaximum.m`, • `y plotpolar.m`
- `plotnotpolar.m`, • `distinguishable_colors.m`.

Este último programa `distinguishable_colors.m` ha sido desarrollado por Timothy E. Holy (2010-2011).

- Código `analisisespectralaproximado.m`: programa en lenguaje Matlab con el que se lleva a cabo el análisis espectral de von Neumann aproximado sobre los esquemas:
 - UWC3-ADER3,
 - UWC5-ADER5,
 - UWC7-ADER7,
 - UWC9-ADER9,
 - WENO3-ADER3,
 - WENO5-ADER5,
 - WENO7-ADER7,
 - WENO9-ADER9,
 - UWC3-RK3,
 - UWC5-RK3,
 - UWC7-RK3,
 - WENO3-RK3,
 - WENO5-RK3,
 - WENO7-RK3
 - y FOU.

- Código `WENO7-RK3.c`: programa en lenguaje C preparado para resolver las ecuaciones lineal advection y de Burgers unidimensionales por medio de los esquemas:
 - UWC3-RK3,
 - UWC5-RK3,
 - UWC7-RK3,
 - WENO3-RK3,
 - WENO5-RK3,
 - WENO7-RK3
 - ó FOU.

En el fichero de texto `data.txt` se escriben las variables que deben ser leídas por el programa general para seleccionar el tipo de problema en el siguiente orden:

- número de celdas, N ,
- número de Courant-Friedrichs-Levy, σ ,
- tiempo total de simulación,
- ecuación a resolver: 1 para la lineal advection, 2 para la de Burgers,
- presencia del término fuente: 0 para ausencia, 1 para presencia,
- orden del esquema Runge-Kutta: 1, 2 ó 3,
- orden de la discretización espacial: 1, 3, 5 ó 7,
- tipo de discretización espacial: 1 para UWC, 2 para WENO
- y número de modos excitados por el término fuente, N_c .

Además, se ha escrito un código externo en C, denominado `vectoraleatorio.m`, para generar números aleatorios, que siguen una distribución normal, y que sean leídos por el código general y así acelerar los cálculos de éste.

- Código `analisisenergetico.m`: programa en lenguaje Matlab para calcular el espectro energético de las soluciones de la ecuación de Burgers y representar las cascadas energéticas derivadas de estos. Este programa calcula también los errores Λ^{disp} y Λ^{diff} en las cascadas energéticas.

Para cerrar los comentarios que merece esta revisión en términos conclusivos del trabajo caben todavía unas últimas líneas. Se ha buceado en profundidad en aspectos básicos de los

esquemas numéricos planteados. Se han comprobado propiedades de los mismos por medio de diferentes métodos con el fin de conocer sus limitaciones y sus ventajas. Por medio de la variación de determinados parámetros propios de los esquemas se ha probado su sensibilidad, analizando detalladamente su reacción para clasificar mediante criterios bien definidos el comportamiento de cada esquema. Todo esto ha sido motivado por la idea más amplia de poder utilizarlos de manera plenamente consciente y experimentada. Los flujos reales están determinados por características y fenómenos físicos muy complejos (como el caso trabajado de la turbulencia), de manera que su descripción matemática y la posterior traducción de ésta al lenguaje de programación demandan recursos particulares y diferentes de los esquemas utilizables. Debido a esto, y aunque las resoluciones obtenidas por medio del análisis de los esquemas numéricos pueden no tener una gran relevancia cuando se afrontan problemas de flujos reales, resulta del todo aconsejable este conocimiento tan específico, detallado y profundo de los esquemas numéricos que se propone en el presente trabajo para resolver los problemas de la manera más eficaz, eficiente y segura.

Bibliografía

- [1] ALHAWWARY, M. - WANG, Z. J. (2018) *Fourier analysis and evaluation of DG, FD and compact difference methods for conservation laws. Journal of Computational Physics*, 373 (2018), 835-862.
- [2] ANDERSON, D. A. - TANNEHILL, J. C. - PLETCHER, R. H. (1967) *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Washington, USA: Hemisphere Publishing Corporation.
- [3] ANDERSON, J. D. (1995) *Computational Fluid Dynamics*. New York, USA: McGraw-Hill, Inc.
- [4] BEC, J. - KHANIN, K. (2007) *Burgers turbulence. Physics Reports* 447 (2007), 1-66.
- [5] BURGERS, J. M. (1948) *A Mathematical Model Illustrating the Theory of Turbulence. Advances in Applied Mechanics*, 1 (1948), 171-199.
- [6] CHEKHLOV, A. - YAKHOT, V. (1994) *Kolmogorov turbulence in a random-force-driven Burgers equation. Physical Review E* 52.5 (1995), 5681-5684.
- [7] COSTA, A. S. N. - ARAÚJO, J. M. - COHEN, N. - LUCENA, L. S. - VISWANATHAN, G. M. (2014) *High frequency energy cascades in inviscid hydrodynamics. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 399 (2014), 137-146.
- [8] COURANT, R. - FRIEDRICHS, K. - LEWY, H. (1947) *On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics. IBM Journal of Research and Development*, vol. 11, no. 2 (March 1967), 215-234.
- [9] CRANK, J. - NICHOLSON, P. (1947) *A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 43(1), (1947), 50-67.
- [10] DAVIDSON, P. A. (2004) *Turbulence: An Introduction for Scientists and Engineers*. New York, USA: Oxford University Press.
- [11] FRISCH, U. - BEC, J. (2001) *Burgulence. Lesieur M., Yaglom A., David F. (eds) New trends in turbulence Turbulence: nouveaux aspects. Les Houches - Ecole d'Ete de Physique Theorique*, vol 74., Springer, Berlin, Heidelberg.
- [12] GARCÍA, A. L. (2000) *Numerical Methods for Physics*. New Jersey, USA: Prentice Hall.
- [13] GIRIMAJI, S. S. - ZHOU, Y. (1995) *Spectrum and energy transfer in steady Burgers turbulence*. Hampton, USA: Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA.
- [14] GODUNOV, S. K. (1959) *A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics*, en *Mat. Sb. (N.S.)*, 1959, Volume 47(89), Number 3, 271-306.

- [15] HINTERBERGER, C. - FRÖHLICH, J. - RODI, W. (2007) *Three-Dimensional and Depth-Averaged Large-Eddy Simulations of Some Shallow Water Flows* *Journal of Hydraulic Engineering (2007)* 133, 857-872.
- [16] HIRSCH, C. (2007) *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Oxford, Great Britain: Elsevier.
- [17] JIA, F. - GAO, Z. - DON, W. S. (2013) *A Spectral Study on the Dissipation and Dispersion of the WENO Schemes*. *Journal of Scientific Computing*, vol. 63, (2014).
- [18] KOLMOGOROV, A. N. (1941) *The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds Numbers*. *Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 434, No. 1890, Turbulence and Stochastic Process: Kolmogorov's Ideas 50 Years On (Jul. 8, 1991), pp. 9-13.
- [19] KRAICHNAN, R. H. (1968) *Lagrangian-History Statistical Theory for Burgers' Equation*. *Phys. Fluids* 11, 265 (1968), 265-277.
- [20] KUNDU, P. K. (1990) *Fluid Mechanics*. San Diego, California, USA: Academic Press, Inc.
- [21] LESIEUR, M. (1990) *Turbulence in Fluids*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic Publishers.
- [22] LEVEQUE, R. J. (2002) *Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- [23] LEVEQUE, R. J. (1992) *Numerical Methods for Conservation Laws*. Basel, Switzerland: Birkhäuser Verlag.
- [24] LIU, X. - OSHER, S.; CHAN, T. (1994) *Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes*. *Journal of Computational Physics* 115 (1994), 200-212.
- [25] LOVE, E. - RIDER, W. J. (2013). *On the convergence of finite difference methods for PDE under temporal refinement*. *Computers and Mathematics with Applications* 66 (2013), 33-40.
- [26] MANZANERO, J. (2016) *Dispersion-diffusion analysis for variable coefficient advection problems, with application to alternative DG formulations and under-resolved turbulence*. (Tesis de maestría) Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España.
- [27] MANZANERO, J. - RUBIO, G. - FERRER, E. - VALERO, E. (2018). *Dispersion-Dissipation Analysis for Advection Problems with Nonconstant Coefficients: Applications to Discontinuous Galerkin Formulations*. *SIAM Journal on Scientific Computing*. 40 (2018). A747-A768. 10.1137/16M1101143.
- [28] MAULIK, R. - SAN, O. (2016). *Evaluation of explicit and implicit LES closures for Burgers turbulence*. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 327 (2016).
- [29] MONTECINOS, G. (2015) *Analytic solutions for the Burgers equation with source terms*.
- [30] MORALES-HERNÁNDEZ, M. - MURILLO, J. - GARCÍA-NAVARRO, P (2019). *Diffusion-dispersion numerical discretization for solute transport in 2D transient shallow flows*. *Environmental Fluid Mechanics (2019)* 19: 1217-1234.

- [31] MOURA, R. C. - SHERWIN, S. J. - PEIRÓ, J. (2015) *Linear dispersion-diffusion analysis and its application to under-resolved turbulence simulations using discontinuous Galerkin spectral/hp methods*. *Journal of Computational Physics*, 298 (2015), 695-710.
- [32] NAVAS-MONTILLA, A. (2018) *Accurate simulation of shallow flows using arbitrary order ADER schemes and overcoming numerical shockwave anomalies* (Tesis doctoral) Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España.
- [33] NAVAS-MONTILLA, A. - JUEZ, C. - FRANCA, M. J. - MURILLO, J. (2019) *Depth-averaged unsteady RANS simulation of resonant shallow flows in lateral cavities using augmented WENO-ADER schemes*. *Journal of Computational Physics*, 395 (2019), 511-536.
- [34] PIROZZOLI, S. (2006) *On the spectral properties of shock-capturing schemes*. *Journal of Computational Physics*, vol. 219, (2006), 489-497.
- [35] POPE, S. B. (2000) *Turbulent Flows*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- [36] RICHTMYER, R. D. - MORTON, K. W. (1967) *Difference Methods for Initial Value Problems*. London, United Kingdom: Interscience Publication J.Wiley & Sons.
- [37] RUTHERFORD, J. C. (1994) *River Mixing*. Chichester, United Kingdom: John Wiley and Sons Ltd.
- [38] SAN, O. - KARA, K. (2015) *Evaluation of Riemann flux solvers for WENO reconstruction schemes: Kelvin-Helmholtz instability*. *Computers & Fluids*, 117 (2015), 24-41.
- [39] SHU, C.-W. (1998) *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, in *Advanced Numerical Approximation of Non-linear Hyperbolic Equations*, edited by B. Cockburn, C. Johnson, C.-W. Shu, and E. Tadmor, Lect. Notes in Math. Springer-Verlag, Berlin/New York, 1998 Vol. 1697.
- [40] SMAGORINSKY, J. (1963) *General circulation experiments with the primitive equations*, *Monthly Weather Review*, vol. 91 (1963), 99-164.
- [41] SMITH, S. W. (1994) *The Scientist and Engineer's Guide to Digital Signal Processing*. San Diego, USA: California Technical Publishing.
- [42] TENNEKES, H. - LUMLEY, J. L. (1972) *A first course in turbulence*. Cambridge, USA: MIT Press Design Department.
- [43] TITAREV, V. A. - TORO, E. F. (2002) *ADER: Arbitrary High Order Godunov Approach*. *Journal of Scientific Computing*, Vol. 17 (2002), Nos. 1-4.
- [44] TSINOBER, A. (2001) *An Informal Introduction to Turbulence*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic Publishers.
- [45] TSUI, Y. (1991) *A study of upstream-weighted high-order differencing for approximation to flow convection*. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 13, (1991), 167-199.
- [46] ZHAO, S. - LARDJANE, N. - FEDJOUN, I. (2014) *Comparison of improved finite-difference WENO schemes for the implicit large eddy simulation of turbulent non-reacting and reacting high-speed shear flows*. *Computers & Fluids*, vol. 95, (2014), 74-87.

