

DETECCIÓN DE ONDAS DE CHOQUE MEDIANTE EL MÉTODO DE MÍNIMOS CUADRADOS MÓVILES PARA DISCRETIZACIONES DE ALTO ORDEN EN MALLAS NO ESTRUCTURADAS

Xesús Nogueira^{1*}, Ignasi Colominas¹, Luis Cueto-Felgueroso²,
Fermín Navarrina¹ y Manuel Casteleiro¹

GMNI—Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería
Departamento de Métodos Matemáticos y de Representación
E.T.S. de Ingenieros de Caminos Canales y Puertos
Universidade da Coruña
e-mail: xnogueira, icolominas, fnavarrina, casteleiro@udc.es
web: <http://www.caminos.udc.es/gmni>

2: Department of Civil and Environmental Engineering
Massachusetts Institute of Technology
77 Massachusetts Ave., Cambridge, MA 02139, USA
e-mail: lcueto@mit.edu,

Palabras clave: Shock-capturing , Mallas no estructuradas, Métodos numéricos de alto orden

Resumen.

En este trabajo se presenta una técnica de detección de ondas de choque basada en Mínimos Cuadrados Móviles (Moving Least Squares (MLS)) aplicable a cualquier tipo de mallas. Esta técnica se aplica junto con un método de alto orden de volúmenes finitos basado también en MLS, aunque es aplicable con cualquier otro método que necesite la detección de choques. La técnica presentada es capaz de detectar las zonas de la solución en las que existen discontinuidades. De este modo, es posible activar o desactivar el limitador de pendiente evitando la limitación en zonas no necesarias, y el esquema es capaz de recuperar su orden máximo en las zonas alejadas de los choques. Se muestran ejemplos numéricos en 1D y 2D, empleando un método numérico de volúmenes finitos de alto orden también basado en aproximaciones de MLS.

1. INTRODUCCIÓN

Los métodos numéricos para la resolución de problemas de dinámica de fluidos requieren la mayor precisión posible para resolver la mayor parte de las características del flujo. En el caso de mallas estructuradas, se han desarrollado métodos muy eficientes de muy

alto orden y con gran resolución espectral. Por otra parte, la resolución de problemas con geometrías complejas dificulta el empleo de estos métodos, y hace de gran interés el desarrollo de métodos de alto orden para mallas no estructuradas. La aparición de ondas de choque es un fenómeno frecuente en problemas de flujo compresible, que representa un problema añadido a la simulación de tales flujos.

El teorema de Godunov establece que no es posible la existencia de métodos lineales que sean monótonos y de orden mayor que uno, por lo que es necesario recurrir a técnicas especiales para la resolución de problemas en los que aparezcan fuertes gradientes, como es el caso de las ondas de choque. Entre las técnicas posibles para la resolución de choques con esquemas lineales están la introducción de disipación artificial o la construcción de métodos TVD (*Total Variation Diminishing*) [1]. Un enfoque diferente lo dan los métodos ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) y WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) [2], en los que se escoge el *stencil* que menos oscile entre todos los posibles, o una combinación convexa de ellos. En mallas no estructuradas, los métodos más utilizados para la resolución de choques son los métodos de volúmenes finitos de segundo orden con limitadores de pendiente (*slope limiters*), que han demostrado ser una técnica robusta y con resultados prácticos aceptables.

Los limitadores de pendiente limitan la reconstrucción de Taylor característica de los métodos de volúmenes finitos de orden mayor que uno. Normalmente, se han diseñado para aproximaciones de segundo orden de la siguiente forma:

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \chi_I \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (1)$$

siendo χ_I un valor entre 0 y 1 que se calcula con algún algoritmo de limitación de pendiente. La extensión más directa de esta técnica a reconstrucciones de Taylor de orden más alto consiste en utilizar el mismo valor de χ_I para limitar todas las derivadas:

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \chi_I (\nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \dots) \quad (2)$$

Sin embargo, la aplicación del coeficiente de limitación (χ_I) (desarrollado para limitar las primeras derivadas) a las derivadas de orden superior presenta problemas. Así, generalmente se produce mayor disipación y además, como se mostrará, pueden aparecer anomalías en parámetros como la entropía. Así, si se quiere utilizar este tipo de métodos con esquemas de orden elevado, es necesario introducir mejoras en las técnicas de limitación. Un posible procedimiento consiste en la utilización selectiva del proceso de limitación en aquellos puntos en los que sea necesario. En el resto de puntos se continuará con el esquema de alto orden. Este enfoque requiere el desarrollo de técnicas de detección, que indiquen los puntos en los que se activará la limitación.

Una posible vía consiste en el desarrollo de métodos que indiquen la *regularidad* de la solución. Así, el detector ha de ser capaz de indicar la presencia de fuertes gradientes, que serán los puntos en los que se aplique la limitación.

2. EL MÉTODO MLS COMO FILTRO

El desarrollo de filtros explícitos ha ganado mayor interés a medida que se desarrollaba la metodología *Large-Eddy Simulation* (LES) [3] para la simulación de flujos turbulentos. Este método se basa en la separación de escalas en el flujo, que delimita el rango de escalas que se resuelven y el rango de escalas que se modela.

La separación de escalas se puede realizar por medio de filtros explícitos. Aunque se han desarrollado filtros para mallas estructuradas con muy buenas propiedades [4], la construcción de filtros para mallas no estructuradas no ha tenido tanto éxito. El empleo del método MLS (realmente del método *Reproducing Kernel Particle Method* (RKPM)) como filtro, fue propuesto en 2000 por Wagner y Liu [5]. Así, una aproximación MLS de una variable Φ se puede considerar como un *filtrado* de paso bajo de dicha variable. La aproximación MLS de Φ en el punto I (que identificamos con el centroide de la celda correspondiente) se escribe como:

$$\overline{\Phi}_I = \sum_{j=1}^n N_{jI}(\mathbf{x}) \Phi_j \quad (3)$$

en donde n indica el número de elementos que forman el *stencil* de la celda I , N_{jI} son las funciones de forma MLS y el símbolo $\overline{}$ indica filtrado.

Con carácter general, el comportamiento de un filtro se analiza mediante su función de transferencia, esto es, un modelo matemático que indica la respuesta de un sistema frente a una señal de entrada. En el caso de un filtro numérico diseñado para LES la señal de entrada son los valores de la variable a filtrar en los nodos. La respuesta del sistema es el resultado de aplicar la aproximación de mínimos cuadrados móviles a los valores dados de la variable en los nodos. Así, la función de transferencia asociada a (3) viene dada por

$$\hat{G}(\kappa) = \sum_{j=1}^n N_{jI}(\mathbf{x}) e^{i\kappa(x_j - x_I)} \quad (4)$$

La forma de $\hat{G}(\kappa)$ va a venir determinada por el número de puntos del *stencil*, el tipo de base, y el tipo de función kernel utilizada.

A pesar de que en la bibliografía existen numerosas funciones kernel, en este trabajo se van a considerar dos, el spline cúbico y el kernel exponencial. Así, el kernel basado en un spline cúbico es, en el caso unidimensional:

$$W(s) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}s^2 + \frac{3}{4}s^3 & s \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2-s)^3 & 1 < s \leq 2 \\ 0 & s > 2 \end{cases} \quad (5)$$

con $s = |x - x'|/h$, siendo h la longitud de suavizado (o de *smoothing*), mientras que el kernel basado en una exponencial truncada tiene la siguiente expresión

$$W(s, \kappa_x) = \frac{e^{-\left(\frac{s}{c}\right)^2} - e^{-\left(\frac{h}{c}\right)^2}}{1 - e^{-\left(\frac{h}{c}\right)^2}} \quad (6)$$

con $s = |x - x'|$, $h = \max(|x - x'|)$ (esta distancia se mide en todos los puntos de la nube de vecinos), $c = \frac{h}{2\kappa_x}$. El parámetro κ_x es el parámetro de forma y x' es un punto de referencia alrededor del cual se centra la función kernel. En el caso del kernel cúbico, es recomendable definir la longitud de smoothing como $h = k * \max(|x - x'|)$. Para dos o más dimensiones, el kernel multidimensional se puede definir como el producto de los kernels unidimensionales [6, 7].

En la figura 1 se muestra la función de transferencia de los filtros obtenidos con MLS con las dos funciones kernel que son objeto de estudio en este trabajo. En dicha figura, el valor de 1 de la función de transferencia ($\hat{G}(\kappa)$) indica que la variable no es afectada por la aplicación del filtro.

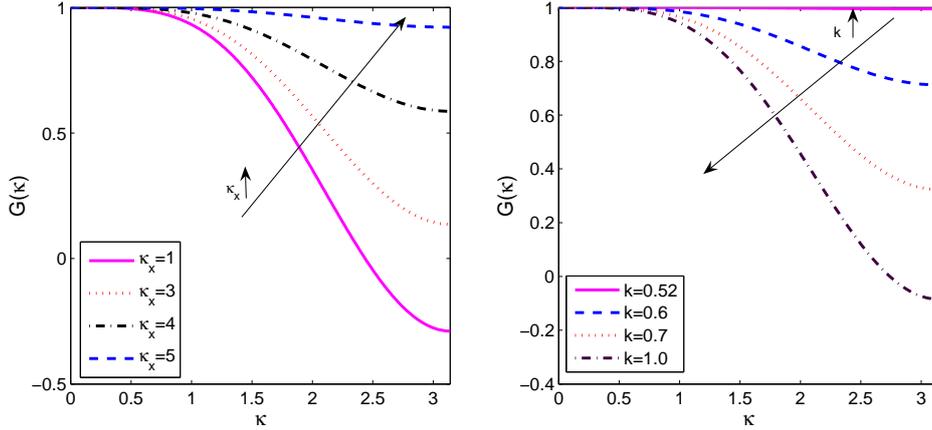


Figura 1: Función de transferencia 1D. Izquierda: kernel exponencial truncada. Derecha: kernel basado en el spline cúbico.

El kernel basado en la exponencial truncada permite un mayor control sobre la forma de la función de transferencia, a través de la elección de los valores apropiados de las funciones de forma. Esta característica se aprecia claramente en el caso de problemas multidimensionales. Simplemente haciendo diferentes los valores de κ_x y κ_y se obtienen formas muy diferentes de la función de transferencia, permitiendo filtrados diferentes según la dirección, lo cual puede ser interesante en el caso de tamaños de malla variables en cada dirección [7].

Esta misma conclusión se puede aplicar al caso de la aproximación MLS para el cálculo de las funciones de forma de la aproximación espacial. Así, escogiendo los valores de κ_x y

κ_y diferentes se obtienen kernels de diferente forma en cada dirección, lo cual puede ser útil en casos de mallas muy anisótropas.

3. APLICACIÓN DEL FILTRADO MLS A LA DETECCIÓN DE ONDAS DE CHOQUE

En la sección anterior se ha expuesto el posible uso del método MLS como filtro. A partir de él, es posible construir un indicador de regularidad, aprovechando sus propiedades multiescala. Así, una propiedad interesante de las aproximaciones MLS es su conexión con *wavelets*, donde se utiliza para estimación de error y adaptatividad [8]. Las *wavelets* se definen por medio de una función *wavelet* y una función de escala. Es posible definir una función *wavelet* a partir de las funciones de forma MLS.

Cuando se realiza una aproximación MLS:

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} u_j N_j^h(\mathbf{x}) \quad (7)$$

la solución aproximada u^h conserva todas las resoluciones y las propiedades de la solución $u(\mathbf{x})$, hasta la escala h (longitud de suavizado). Así, es posible ver a las funciones de forma MLS como la función de escala y a h como el parámetro de escala. Un valor de h más pequeño implica una solución de $u(\mathbf{x})$ de escala más fina. A continuación se expondrá cómo obtener una *función wavelet* a partir de las funciones de forma MLS.

Se considera una función $u(\mathbf{x})$, y se definen dos conjuntos de funciones de forma MLS $\mathbf{N}^h(\mathbf{x})$ y $\mathbf{N}^{2h}(\mathbf{x})$, calculados con longitudes de suavizado diferentes h y $2h$ (o con dos parámetros de forma κ_x diferentes). Se obtiene así una aproximación con escala h y otra con escala $2h$ (o escala κ_H y escala κ_L , correspondiendo el primero a la aproximación de mayor resolución y κ_L a la aproximación de menor resolución). Como hemos preferido utilizar el kernel exponencial, la exposición se realiza en términos de κ_H y κ_L . Así, el parámetro de escala de la *función wavelet* será el parámetro de forma κ . En el caso de utilizar el kernel basado en el spline cúbico sólo hay que cambiar κ_H por h y κ_L por $2h$: De este modo, las reconstrucciones MLS de \mathbf{U} con diferente nivel de resolución se escriben como;

$$\mathbf{U}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j N_j^{\kappa_H}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{U}^{\kappa_L}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j N_j^{\kappa_L}(\mathbf{x}) \quad (8)$$

en donde se recuerda que la aproximación de escala κ_H se corresponde con la aproximación de alta resolución, y la aproximación de escala κ_L se corresponde con la aproximación de baja resolución.

Así, la *función wavelet* puede escribirse como:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{N}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) - \mathbf{N}^{\kappa_L}(\mathbf{x}) \quad (9)$$

Por otro lado, la solución de escala κ_H puede escribirse como la suma de la contribución de las escalas bajas ($\mathbf{U}^{\kappa_L}(\mathbf{x})$) y la de las escalas altas ($\Psi(\mathbf{x})$):

$$\mathbf{U}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^{\kappa_L}(\mathbf{x}) + \Psi(\mathbf{x}) \quad (10)$$

siendo

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j \Phi_j(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j (\mathbf{N}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) - \mathbf{N}^{\kappa_L}(\mathbf{x})) \quad (11)$$

Asimismo, la baja escala $\mathbf{U}^{\kappa_L}(\mathbf{x})$ podría seguir siendo descompuesta empleando el mismo procedimiento.

La función $\Psi(\mathbf{x})$ actúa como un indicador de la regularidad de $U(\mathbf{x})$. Así, cuando $\Psi(\mathbf{x})$ supere cierto valor, el limitador se activará, permaneciendo desactivado en todos los demás puntos.

Este procedimiento podría ser visto como una generalización para mallas no estructuradas del filtrado selectivo basado en *wavelets* propuesto en [9] para diferencias finitas. De hecho, la operación realizada en (11) es un filtrado de paso alto.

Sin embargo, surge el problema de definir a partir de qué valor de $\Psi(\mathbf{x})$ se considera que la solución no es regular. Así, es preciso definir el *valor umbral* a partir del cual se activará el limitador. Para ello se toma la densidad como variable de referencia. En este trabajo se han considerado dos posibilidades:

1. El valor umbral se define a partir del salto máximo de la densidad en todos los puntos del *stencil* de la celda I . Así, definimos

$$T_v = C_{lc1} |\rho_{max} - \rho_{min}|_I \quad (12)$$

2. Otra posibilidad consiste en definir el valor umbral en función del gradiente de la variable de referencia en la celda I .

$$T_v = C_{lc2} |\nabla \rho|_I A_I \quad (13)$$

A_I es el tamaño (área en 2D) del volumen de control I , C_{lc1} y C_{lc2} son dos parámetros. Si $C_{lc} = 0$, entonces no hay limitación selectiva.

De este modo, el limitador de pendiente se activará cuando se verifique:

$$|\Psi_\rho| = \left| \sum_{j=1}^{n_I} \rho_j (N_j^{\kappa_H}(\mathbf{x}) - N_j^{\kappa_L}(\mathbf{x})) \right| > T_v \quad (14)$$

Esta metodología se ha aplicado a un método de volúmenes finitos de alto orden basado en MLS, (FV-MLS)[6, 7, 10]. El efecto de la limitación selectiva se muestra en las figuras 2 y 3, en donde se muestran los efectos de la elección de cada definición del valor umbral

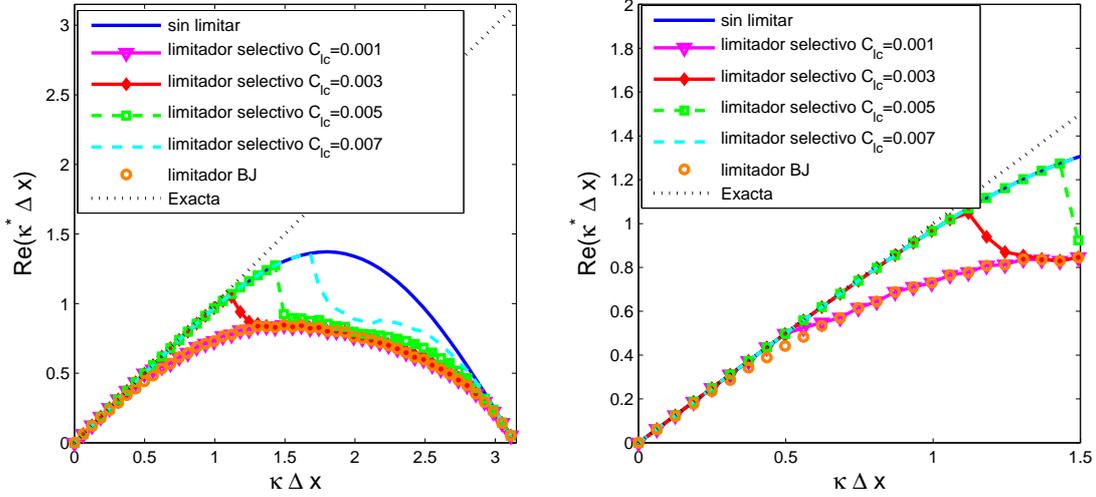


Figura 2: Dispersión del esquema FVMLS de tercer orden con limitación selectiva para diferentes valores del parámetro C_{lc} . En la figura superior se muestra el resultado utilizando como valor umbral el salto máximo de la densidad en el *stencil* de I . La figura inferior muestra un detalle de la curva. El limitador BJ se refiere al limitador de Barth y Jespersen [11].

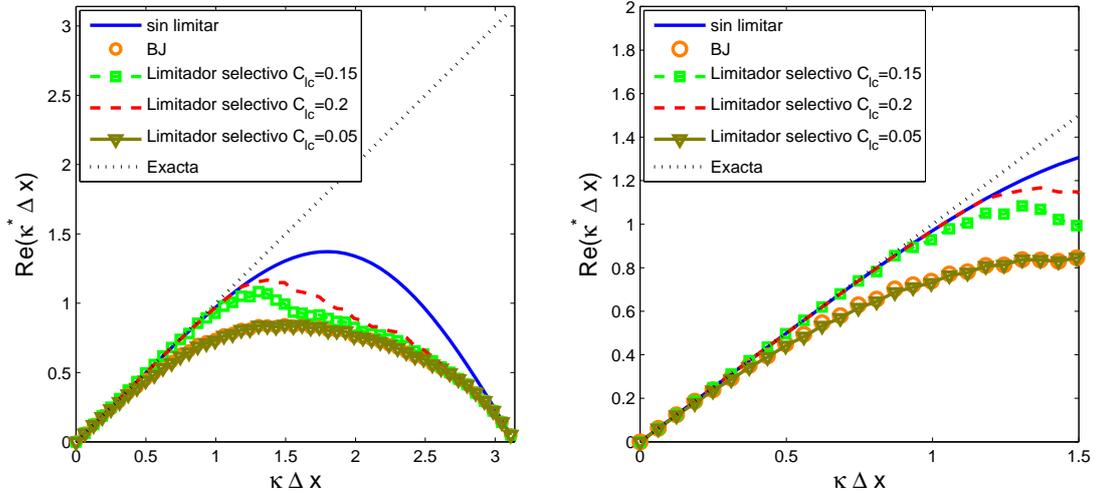


Figura 3: Dispersión del esquema FVMLS de tercer orden con limitación selectiva para diferentes valores del parámetro C_{lc} . En la figura superior se muestra el resultado utilizando la definición del valor umbral en función del gradiente. La figura inferior muestra un detalle de la curva. El limitador BJ se refiere al limitador de Barth y Jespersen [11].

y la variación del coeficiente C_{lc} sobre las propiedades de dispersión del esquema FVMLS de tercer orden.

Se observa que cuando se aplica un limitador (en este caso el de Barth y Jespersen [11]) el efecto es el de transformar las propiedades de dispersión del esquema numérico en las que tendría un esquema de menor orden. También se observa que un menor valor del

coeficiente C_{lc} hace que el esquema active el limitador para frecuencias más bajas. De este modo, un valor de $C_{lc} = 0$ equivale a activar siempre el limitador.

3.1. Pruebas de detección

En esta sección se va a comprobar si el método propuesto es capaz de detectar las irregularidades en una distribución de datos bidimensional. Esta comprobación se realizará tanto en una malla estructurada como en una no estructurada. La distribución de datos se construye a partir de la función propuesta en [12] por Abgrall y corregida en [13]. Esta función tiene como expresión:

$$u(x, y) = \begin{cases} f\left(x - \cot\sqrt{\frac{\pi}{2}}y\right) & x \leq \frac{\cos\pi y}{2} \\ f\left(x + \cot\sqrt{\frac{\pi}{2}}y + \cos(2\pi y)\right) & x > \frac{\cos\pi y}{2} \end{cases} \quad (15)$$

siendo

$$f(r) = \begin{cases} -r \sin\left(\frac{3\pi}{2}r^2\right) & r \leq -\frac{1}{3} \\ |\sin(2\pi r)| & |r| < \frac{1}{3} \\ 2r - 1 + \frac{1}{6} \sin(3\pi r) & r \geq \frac{1}{3} \end{cases} \quad (16)$$

Las isóneas de la función de Abgrall se muestran en la figura 4.

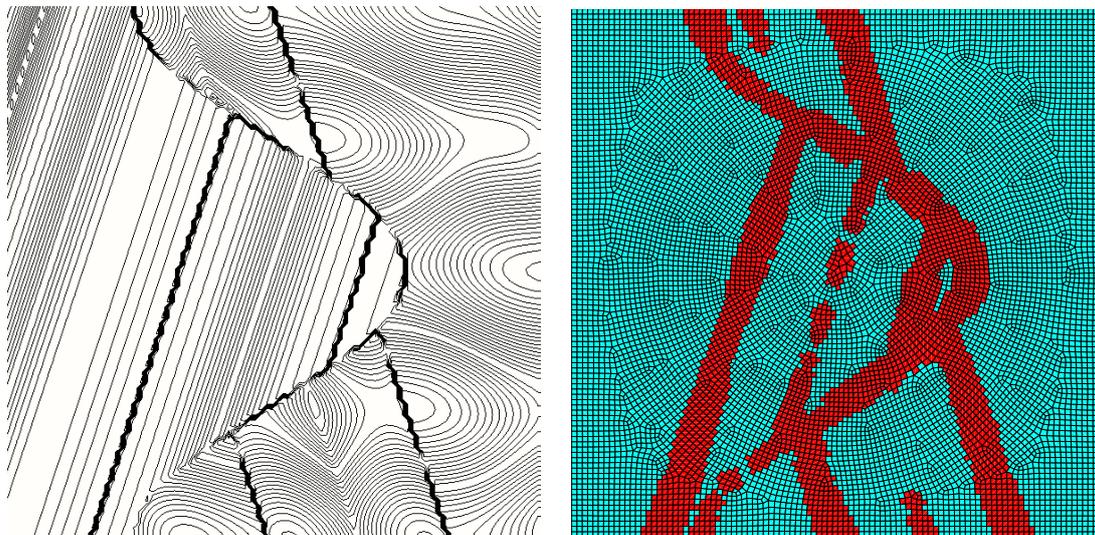


Figura 4: Isóneas de la función de Abgrall [12] definida en la ecuación (15) (izquierda). A la derecha se muestran los resultados utilizando la definición del valor umbral en función del gradiente con $C_{lc} = 0.4$ y limitando el *stencil* de la celda I en lugar de la celda I .

Aplicamos el método de detección propuesto a la función [12] en una malla no estructurada.

La experiencia con diferentes cálculos para diferentes valores de los coeficientes C_{lc} nos indica que para el caso de mallas estructuradas, la definición del valor umbral basada

en el salto de la densidad obtiene resultados menos disipativos, como se mostrará en los ejemplos. Sin embargo, en el caso de mallas no estructuradas, el método obtenido al utilizar la definición del valor umbral basada en el gradiente es más robusto.

Aun así, la experiencia ha mostrado que en algunos problemas, el método propuesto podría tener problemas de estabilidad, al no activar el algoritmo de limitación en las celdas necesarias. Para resolver este problema, cuando el método indica que el limitador debe ser activado en una determinada celda I , es necesario activarlo en todas las celdas que pertenecen al *stencil* de la celda I . Es evidente que esta aproximación va a aumentar el número de celdas en donde el limitador es activado, lo que va a tener un impacto negativo en la calidad de la aproximación. Para reducir este impacto, es necesario aumentar el coeficiente C_{lc} . Así, se propone la utilización del valor umbral basado en el gradiente con un coeficiente $C_{lc} = 0.4$ y limitando el *stencil* en lugar de la celda. La aplicación de esta metodología a la función de Abgrall (15) obtiene los resultados mostrados en la figura 4 (derecha).

3.2. Ejemplos Numéricos

3.2.1. Pruebas 1D. Problema de Shu y Osher

Como ejemplo del funcionamiento del método, se considera el caso número 8 de los problemas 1D presentados por Shu y Osher en [14]. Las ecuaciones de Euler unidimensionales se resuelven en $[-5, 5]$, con 400 celdas. Las condiciones iniciales son $(\rho, v, p) = (3.857, 2.629, 10.333)$ si $x < -4$ y $(\rho, v, p) = (1 + 0.2 \sin(5x), 0, 1)$ si $x \geq -4$. Como se ha comentado en el apartado anterior, se toma la densidad ρ como la variable de referencia para el proceso de limitación. El limitador de pendiente utilizado ha sido el de Barth y Jespersen [11], aunque es posible utilizar cualquier otro limitador diseñado para métodos de volúmenes finitos. Se ha empleado el método FV-MLS. En la figura 5 se muestran los resultados. En esta figura, la solución de referencia se ha calculado en una malla de 3200 celdas con la reconstrucción cuadrática y el limitador activo en todo el dominio.

En el caso de la limitación selectiva limitando el *stencil*, se ha tomado como valor por defecto $C_{lc2} = 0.4$. En la mayoría de los casos este valor es adecuado y permite obtener buenos resultados. Sin embargo, en algunos problemas este valor puede ser demasiado grande. Así, se observan pequeñas oscilaciones en la solución cuando se toma un valor de $C_{lc2} = 0.4$. En este caso las oscilaciones son pequeñas, pero en otros problemas podrían ser mayores. La causa de estas oscilaciones se muestra en la figura 6, donde se presentan los valores umbrales y la *función wavelet* Ψ para las diferentes opciones consideradas. Se observa que el valor de $C_{lc2} = 0.4$ da lugar a valores umbral muy elevados. Aunque el hecho de limitar en el *stencil* y no sólo en las celdas hace que el problema sea estable, es posible la aparición de oscilaciones en la solución. El problema se resuelve disminuyendo el valor del coeficiente C_{lc2} .

En este caso unidimensional, la definición del valor umbral basada en el salto y limitando en las celdas (no el *stencil*) obtiene resultados ligeramente mejores que los obtenidos me-

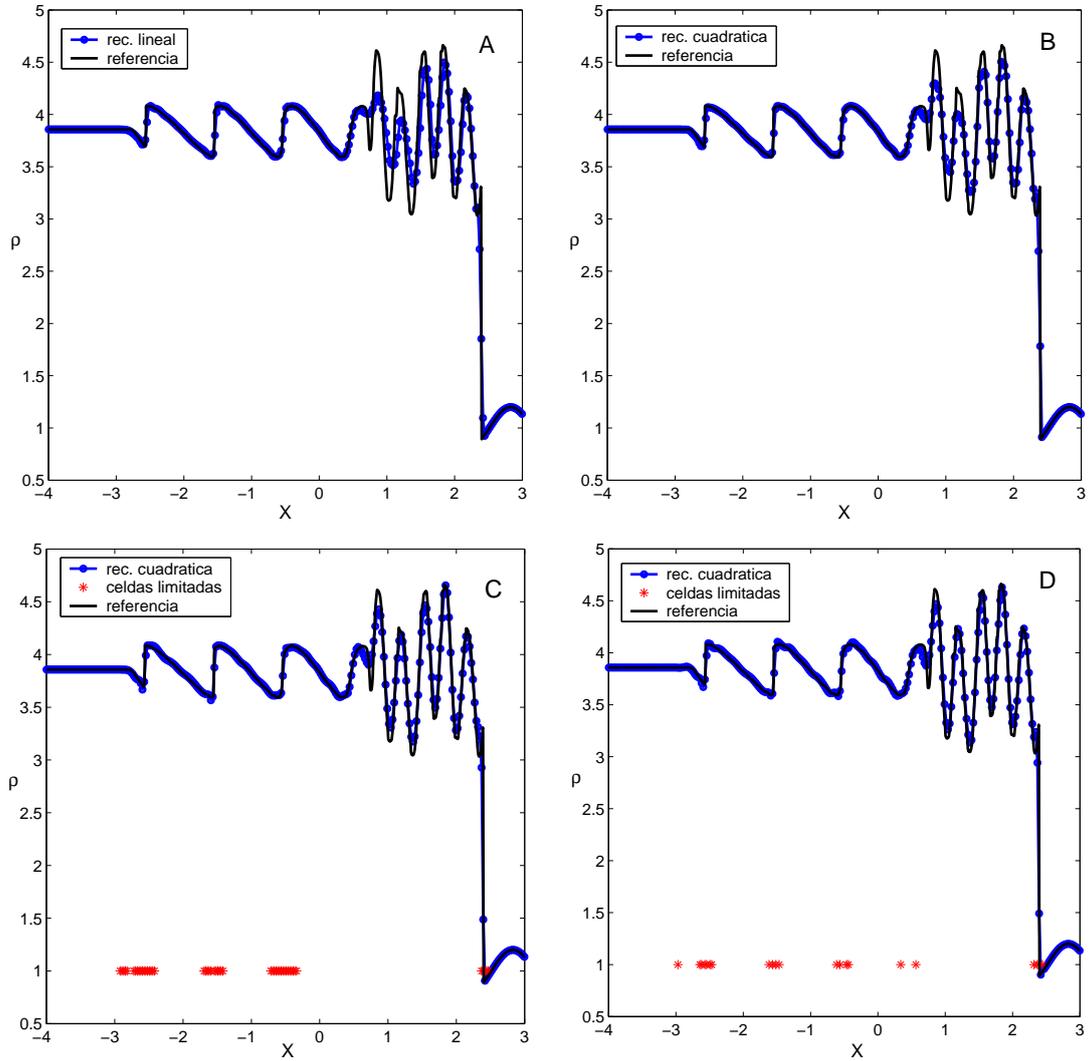


Figura 5: Problema de Shu-Osher, 400 celdas, limitador activo en todo el dominio para la reconstrucción lineal (A) y cuadrática (B). Limitación selectiva (en los puntos marcados con asterisco (*)) para la reconstrucción cuadrática con valor umbral basada en el gradiente, $C_{lc2} = 0.4$ y limitando stencils (C) y reconstrucción cuadrática con valor umbral basada en el salto, $C_{lc} = 0.04$ (D).

diante la definición basada en el gradiente. Sin embargo, en problemas multidimensionales esta opción presenta mayores problemas de estabilidad, así como una mayor sensibilidad a la elección del parámetro C_{lc1} .

Finalmente, cabe destacar que los resultados obtenidos son tan buenos como los obtenidos mediante esquemas ENO y WENO [14].

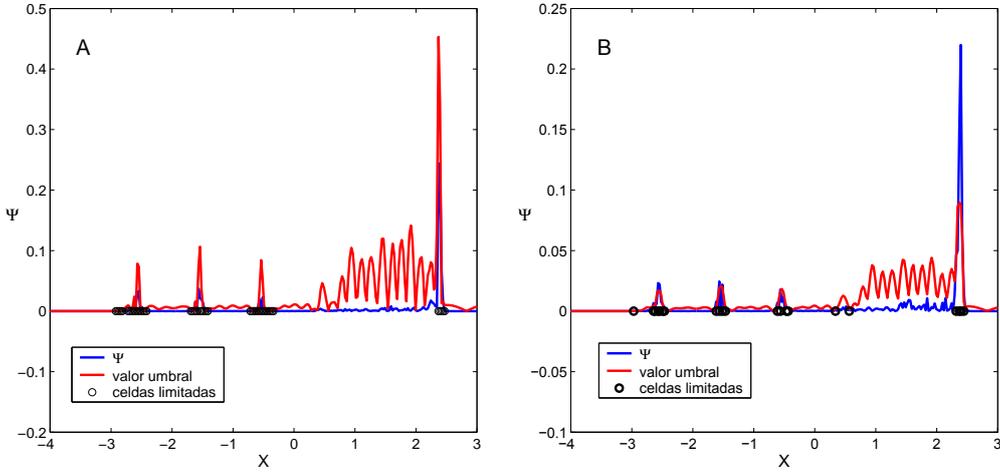


Figura 6: Problema de Shu-Osher, 400 celdas. Valores de la *función wavelet* Ψ y del valor umbral en función del parámetro C_{lc} y de su definición. (A) definición a partir del gradiente y $C_{lc2} = 0.4$. (B) definición a partir del salto y $C_{lc1} = 0.04$.

3.2.2. Pruebas 2D. Flujo subsónico alrededor de un perfil aerodinámico

La posibilidad de que un limitador de pendiente se active en zonas donde la solución es suave y no existen choques es uno de los mayores problemas que presenta esta técnica, ya que se introduce una disipación adicional innecesaria y el orden del esquema disminuye. En este apartado se va a comprobar este efecto mediante la resolución de un flujo subsónico, y se mostrará cómo la utilización del detector basado en MLS mejora los resultados obtenidos.

Así, se va a resolver el flujo en 2D alrededor de un perfil NACA 0012. El flujo en la corriente libre viene dado por un número de Mach igual a 0.63, y un ángulo de incidencia (α) de 2° . Estas condiciones del flujo se corresponden con un flujo suave alrededor del perfil, sin aparición de choques. Los coeficientes de arrastre y de sustentación calculados mediante un método hodográfico son $C_D = 0$ y $C_L = 0.335$. La malla utilizada es de cuadriláteros con 64 elementos sobre la cuerda del perfil (en cada cara). El número total de elementos es de 5322. Se ha utilizado el limitador de Barth y Jespersen (BJ). El método FV-MLS de tercer orden con y sin detector basado en MLS ha sido empleado en los cálculos.

En la figura 7 se muestran las isolíneas correspondientes al número de Mach obtenidas en cada caso, y las celdas en donde el limitador está activo. Se observa que el limitador BJ está activo en algunas celdas pese a la ausencia de choques en la solución. De este modo, se introduce una disipación adicional que no es necesaria para la estabilidad del esquema numérico, y que provoca anomalías en las curvas de número de Mach cerca de la superficie del perfil. Se observa que con la utilización del detector basado en MLS estas anomalías desaparecen. En el cuadro 1 se muestran los valores obtenidos de los coeficientes de arrastre y de sustentación. La mejora obtenida al utilizar el detector basado en MLS es evidente.

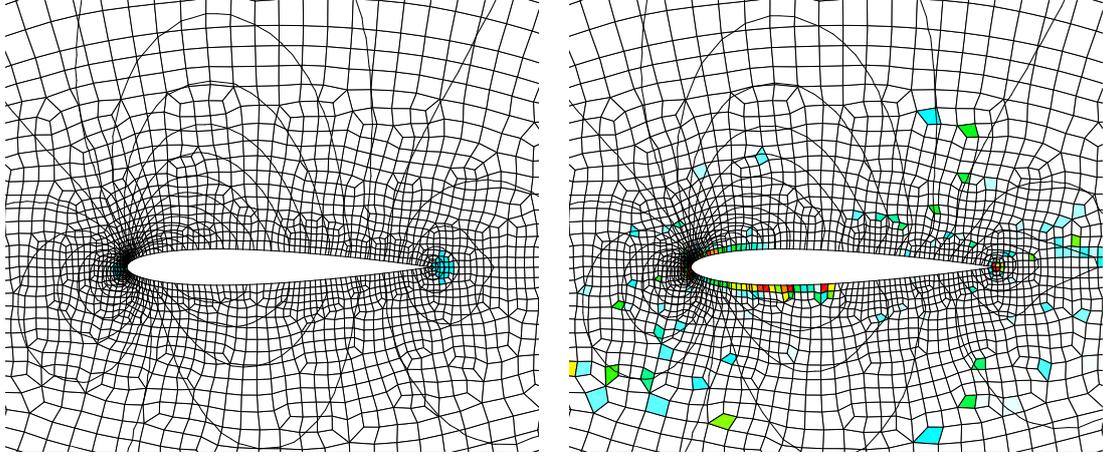


Figura 7: Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0.63$, $\alpha = 2$. A la izquierda se muestran las celdas donde el limitador está activo (sombreadas). A la derecha se muestran las celdas en los que el limitador BJ está limitando ($\chi \neq 1$), un valor rojo indica un valor de $\chi = 0$, es decir esquema de primer orden, mientras que un color azul indica un valor de χ próximo a uno. Se muestran además las isolíneas de número de Mach. Claramente se aprecian las anomalías en las curvas de nivel cerca de la superficie del contorno causadas por la utilización del limitador. Cuando se utiliza el detector basado en MLS, estas anomalías desaparecen.

Esquema	C_L	C_D
Cálculos teóricos	0.335	0
BJ tercer orden	0.318	5.29E-03
BJ tercer orden limitación selectiva	0.328	1.24E-03
Total	2704	1681

Cuadro 1: Flujo subsónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0.63$, $\alpha = 2$. Coeficiente de sustentación (C_L) y coeficiente de arrastre (C_D).

Frecuentemente, el empleo de *slope limiters* impide la convergencia total del esquema, debido a que el limitador permanece activo incluso frente a errores del orden del error de máquina. Así, pequeñas variaciones de la solución en celdas adyacentes provocan su activación, y el valor del residuo se “estanca”. En la figura 8 se muestra la evolución del residuo de la densidad. En general, la utilización del detector basado en MLS permite obtener una mejora en la convergencia.

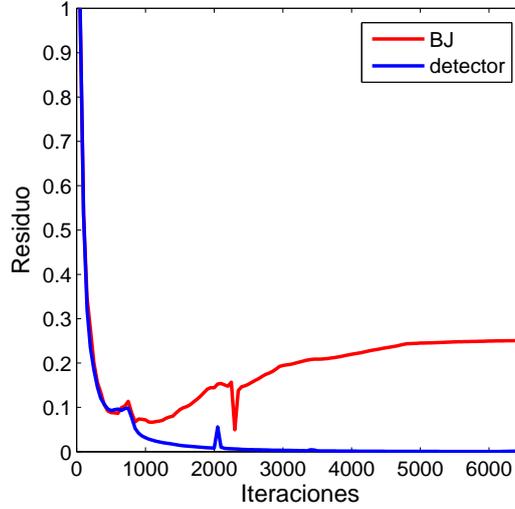


Figura 8: Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, Mach=0.63, $\alpha = 2$. Convergencia de la solución empleando el limitador BJ y con y sin el detector. Se muestra el residuo en la densidad.

3.3. Pruebas 2D. Flujo transónico alrededor de un perfil aerodinámico

En esta sección se calcula el flujo transónico alrededor de un perfil NACA 0012. En el primer caso, el flujo en la corriente libre viene dado por un número de Mach igual a 0.8, y un ángulo de incidencia (α) de 1.25° .

La malla utilizada es de cuadriláteros con 64 elementos sobre la cuerda del perfil (en cada cara). El número total de elementos es de 5322. Al igual que en el caso anterior se ha utilizado el limitador de Barth y Jespersen (BJ). El problema se ha resuelto utilizando el método FV-MLS de cuarto orden con limitación selectiva en el *stencil*. El valor de los parámetros de forma del kernel exponencial es $\kappa_x = \kappa_y = 1$ para la aproximación espacial. Para la detección, la función de forma de $\kappa_H - escala$ se calcula con $\kappa_x = \kappa_y = 6$ y la de $\kappa_L - escala$ con $\kappa_x = \kappa_y = 1$. Se ha utilizado limitación selectiva en el *stencil* con $C_{lc2} = 0.4$.

En la figura 9 (izquierda) se muestran los contornos del número de Mach y las celdas donde el limitador BJ está activado (sombreadas). En estas celdas el algoritmo de limitación seleccionado se aplica de la manera habitual. La figura también muestra (derecha) las celdas en donde el coeficiente del limitador BJ está limitando, es decir, aquellas celdas en donde ($\chi \neq 1$). En esta figura, un valor rojo indica un valor de $\chi = 0$, es decir esquema de primer orden, mientras que un color azul indica un valor de χ próximo a uno. Se observa que el limitador BJ está activo en la mayor parte de las celdas adyacentes al perfil, pese a la inexistencia de choques en esos puntos.

Con la limitación selectiva, la reconstrucción de alto orden se recupera en las celdas adyacentes al contorno aguas arriba y aguas abajo del choque principal, ya que el limitador está desactivado. Este efecto se muestra en la figura 10, en donde se representa el valor

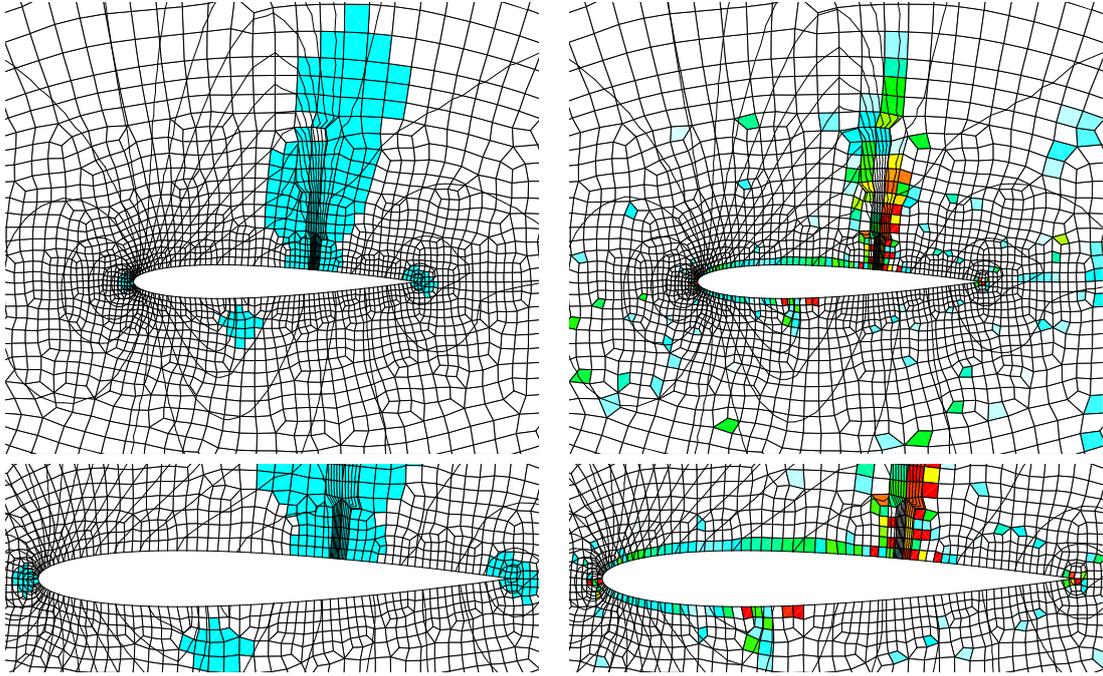


Figura 9: Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0.8$, $\alpha = 1.25$. A la izquierda se muestran las celdas donde el limitador está activo (sombreadas). A la derecha se muestran las celdas en los que el limitador BJ está limitando ($\chi \neq 1$), un valor rojo indica un valor de $\chi = 0$, es decir esquema de primer orden, mientras que un color azul indica un valor de χ próximo a uno. En la parte inferior se muestra una vista más próxima al perfil en la que se aprecia claramente que el limitador selectivo recupera el esquema de alto orden, ya que el limitador no está activo en las celdas aguas arriba y aguas abajo del choque, mientras que el limitador BJ está limitando en la mayoría de las celdas adyacentes al perfil.

de la entropía en el contorno del perfil. La generación de entropía en las zonas “suaves” de la solución puede considerarse como un indicador de la disipación del esquema. Con la aplicación de la limitación selectiva, la disminución de la entropía generada en las zonas lejanas al choque es clara. Esta reducción es mayor en la parte más regular del flujo, aguas arriba del choque fuerte. La limitación selectiva elimina además el efecto de generación negativa de entropía cuando se utiliza el mismo coeficiente χ para limitar el gradiente y las derivadas sucesivas de la reconstrucción de Taylor. Este efecto no aparece al utilizar un esquema de segundo orden FV-MLS y el limitador BJ.

Por otra parte, los coeficientes de sustentación (C_L) y de arrastre (C_D) se muestran en el cuadro 2. Se observa que los resultados obtenidos mediante la utilización de limitación selectiva están más próximos a los de referencia, obtenidos por el *Advisory Group for Aerospace Research and Development* (AGARD)[15]. La reducción en el coeficiente de arrastre C_D indica el carácter menos disipativo del esquema con limitación selectiva. Además, se observa que el esquema de cuarto orden con limitador BJ sin limitación selectiva es más disipativo que el esquema de segundo orden con el mismo limitador.

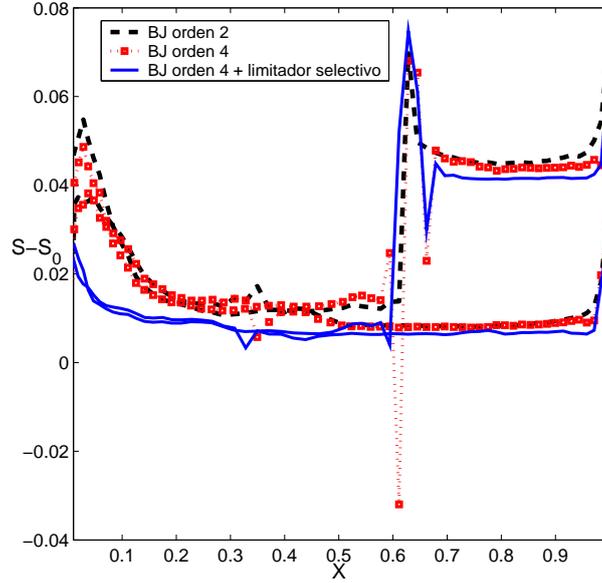


Figura 10: Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, Mach=0.8, $\alpha = 1.25$. Generación de entropía en la superficie del perfil. S_0 es la entropía en la corriente libre. La limitación selectiva reduce la generación de entropía, y este efecto es mayor aguas arriba del choque. El uso de un esquema de cuarto orden con limitación BJ no reduce la generación de entropía, y en este caso presenta el problema de generación negativa de entropía. Este comportamiento anómalo es debido al uso del mismo valor de χ para limitar todas las derivadas. La limitación selectiva resuelve este problema.

Este efecto también está relacionado con el uso del mismo coeficiente χ para limitar las derivadas de todos los órdenes.

Esquema	C_L	C_D
BJ segundo orden	0.341	2.465E-02
BJ cuarto orden	0.342	2.486E-02
BJ cuarto orden limitación selectiva	0.343	2.317E-02
Referencia AGARD [15]	0.347	2.221E-02
Total	2704	1681

Cuadro 2: Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, Mach=0.8, $\alpha = 1.25$. Coeficiente de sustentación (C_L) y coeficiente de arrastre (C_D) para diversos esquemas

En la figura 11 se muestra el coeficiente de presión (C_p) para diversos esquemas, y se

compara con una solución de referencia obtenida en una malla más fina de 12243 volúmenes de control con 128 celdas colocadas sobre cada cara del perfil, mediante un esquema FV-MLS de segundo orden y limitador BJ.

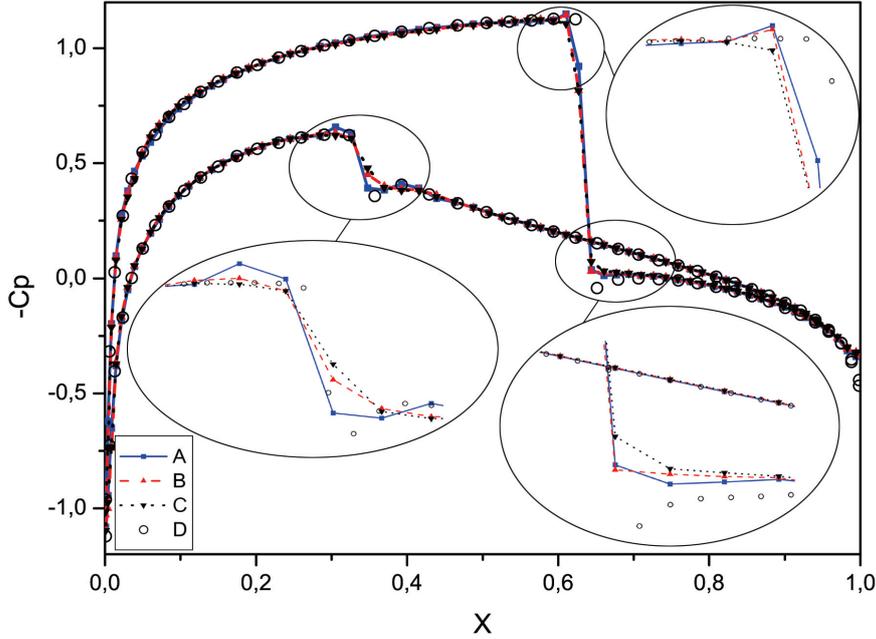


Figura 11: Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, Mach=0.8. Coeficiente de presión para diferentes esquemas y zoom de las zonas de choque. (A) Esquema FV-MLS de cuarto orden con limitación selectiva. (B) Esquema FV-MLS de cuarto orden con limitador BJ. (C) Esquema FV-MLS de segundo orden con limitador BJ. (D) Solución de referencia utilizando un esquema FV-MLS de segundo orden y limitador BJ en una malla más fina. Algunos puntos de la solución de referencia se han eliminado por claridad en la representación en la figura no ampliada.

En este caso, utilizando la limitación selectiva en el *stencil* con $C_{le2} = 0.4$ no se aprecian oscilaciones en la solución. A diferencia del caso unidimensional, el empleo de la definición del valor umbral basada en el salto de la densidad de referencia, no obtiene buenos resultados. En particular, el valor de $C_{le1} = 0.04$ es inestable, y las oscilaciones que aparecen dan lugar a densidades negativas que detienen la simulación. Es necesario tomar el valor del coeficiente como $C_{le1} = 0.01$. Para valores mayores la solución presenta oscilaciones alrededor del choque. Si se procede a limitar el *stencil*, la solución obtenida es más disipativa que en el caso del valor umbral basado en el gradiente ($C_L = 0.345$, $C_D = 0.0246$). Estos resultados, junto con el hecho de que el rango de variación de los valores del parámetro C_{le2} es menor (0.2 – 0.4 frente a 0.001 – 0.004) hacen que se recomiende la utilización del valor umbral basado en el gradiente.

3.3.1. Pruebas 2D. Interacción choque vórtice

En este caso se presenta la interacción entre un choque y un vórtice. Este tipo de interacción puede ocurrir en muchas situaciones de interés práctico. Así, puede producirse en vehículos supersónicos cuando los vórtices creados por la parte delantera del vehículo se desplazan por convección hacia la parte trasera. En este tipo de vehículos es frecuente la formación de ondas de choque en la zona de popa, en la entrada de los sistemas de toma de aire o sobre la superficie del vehículo. Así, estos vórtices interactúan con las ondas de choque formadas en el flujo. Además del interés del estudio de esta interacción para un mejor diseño de las condiciones de operación de los vehículos, es importante para la reducción del ruido generado por motores tipo jet. Otros campos donde es esencial el estudio de este tipo de interacción es en el diseño de palas de helicóptero operando a velocidades supersónicas y en la mejora de la mezcla en cámaras de combustión supersónicas [16].

La configuración de este problema es la siguiente: un vórtice es transportado por una corriente supersónica hacia un choque plano estacionario. Cuando el vórtice alcanza el choque, éste se deforma. La deformación del choque depende de la “fortaleza” relativa del choque y el vórtice. El dominio de cálculo es un rectángulo $[0, 4] \times [-1, 1]$. El choque es estacionario y plano, y separa una región de flujo supersónico aguas arriba del choque (-), de otra región de flujo subsónico aguas abajo del choque (+). Está situado en $x = 0.5$. Las condiciones aguas arriba del choque son:

$$\rho_s^- = 1 \quad (17)$$

$$p_s^- = 1 \quad (18)$$

$$M_s^- = 1.2 \quad (19)$$

siendo $M_s^- = u_s^- / \sqrt{\gamma}$. Las condiciones aguas abajo del choque se obtienen a partir de las relaciones para un choque plano normal [17].

El vórtice se define asumiendo un vórtice de Taylor con entropía uniforme y constante del siguiente modo:

$$u_0(x, y) = -v_{max} \frac{y - y_{v0}}{r_v} \exp\left(\frac{1 - \xi^2}{2}\right), \quad v_0(x, y) = v_{max} \frac{x - x_{v0}}{r_v} \exp\left(\frac{1 - \xi^2}{2}\right) \quad (20)$$

$$\rho_0(x, y) = \left[1 - \frac{\gamma-1}{2} M_v^2 \exp(1 - \xi^2)\right]^{\frac{1}{\gamma-1}}, \quad p_0(x, y) = \frac{\rho_0(x, y)^\gamma}{\gamma}$$

en (20) $\xi = \sqrt{(x - x_{v0})^2 + (y - y_{v0})^2} / r_v$. Además, el radio del vórtice es $r_v = 0.075$ y el vórtice se coloca inicialmente en $(x_{v0}, y_{v0}) = (0.25, 0)$. El número de Mach del vórtice se define como $M_v = v_{max} / c_s^- = v_{max} / \sqrt{\gamma}$, siendo v_{max} la máxima velocidad de rotación del vórtice que indica la fuerza del vórtice y c es la velocidad del sonido. En este ejemplo se ha tomado $M_v = 0.4$, que corresponde a un vórtice de fuerza moderada.

El problema se resuelve en una malla de 200×200 elementos en la región $[0, 2] \times [-1, 1]$. La región $[2, 4] \times [-1, 1]$ es una capa absorbente para evitar reflexiones a la salida del dominio. Se ha utilizado el esquema de detección con limitación en el *stencil* con la definición del valor umbral basada en el gradiente y con un coeficiente $C_{lc2} = 0.4$.

La fluctuación de presión acústica permite analizar la generación de sonido producida por la interacción del vórtice con el choque. Esta magnitud se define como $p' = (p - p_s^+)/p_s^-$, estando de este modo medida respecto a la presión no perturbada tras el choque (p_s^+) y normalizada con respecto a la presión no perturbada antes del choque (p_s^-). En la figura 12 se muestra la evolución de la fluctuación de presión acústica para diferentes instantes de tiempo adimensional $\tau = (t - t_0)c_s^+/r_v$. El valor de $\tau = 0$ se corresponde con el paso del centro del vórtice por $x = 0.5$. Con esta definición tienen sentido tiempos adimensionales negativos.

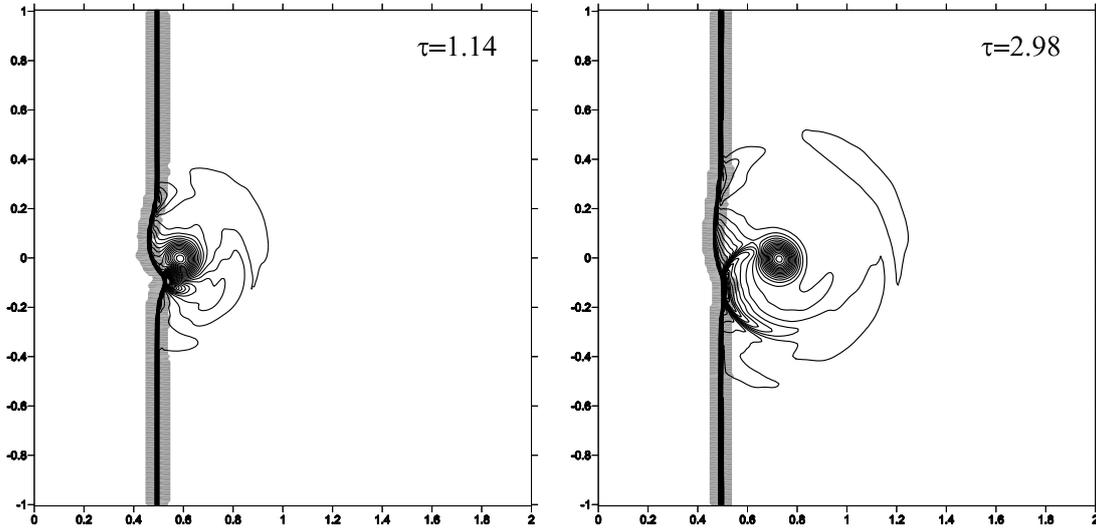


Figura 12: Interacción choque-vórtice. La figura representa el valor de la fluctuación de presión acústica para diferentes tiempos adimensionales $\tau = (t - t_0)c_s^+/r_v$. El tiempo adimensional $\tau = 0$ se corresponde con el paso del centro del vórtice a través del choque. En gris están marcadas las celdas en las que el detector permite que se active el limitador. Se observa cómo el detector es capaz de seguir la evolución del choque.

Con este ejemplo se muestra que la aplicación del detector basado en las propiedades multiescala de la aproximación MLS es capaz de detectar un choque no estacionario. El esquema mantiene el orden alto, salvo en las proximidades del choque. En la figura 12 se aprecia la deformación del choque tras ser atravesado por el vórtice. Esta deformación es captada por el detector, que es capaz de seguir la evolución del choque. Aunque se ha utilizado una malla más gruesa que las empleadas habitualmente en este tipo de estudios, los resultados concuerdan de forma muy satisfactoria con los obtenidos por otros autores (véase [18]).

4. Conclusiones

Se ha mostrado el uso de la aproximación MLS como detector de ondas de choque. La utilización del detector propuesto mejora los resultados obtenidos mediante el uso de un limitador de pendiente. Así, se ha visto que mientras que la utilización de un limitador de pendiente reduce el orden del esquema debido a que diferencias del orden del error de máquina entre celdas pueden activar el limitador, incluso aunque no haya choques presentes en el flujo, el uso del detector basado en MLS permite recuperar el orden máximo del esquema numérico. Además, permite mejorar la convergencia del método numérico, debido al menor número de celdas en las que el limitador está activo. Se han resuelto diversos casos tanto en una como en dos dimensiones. Los resultados obtenidos con el detector en problemas con choques son muy buenos, y son comparables a los obtenidos por métodos ENO y WENO. Además, la metodología propuesta presenta una gran ventaja: su validez y sus buenos resultados en mallas no estructuradas, en donde los métodos ENO no son competitivos. Se ha calculado un caso de un choque no estacionario, consistente en la interacción entre un vórtice y una onda de choque normal. Se ha comprobado que el detector propuesto es capaz de seguir la evolución del choque, mostrando su capacidad para ser utilizado en casos de choques no estacionarios.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo ha sido parcialmente financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia (proyectos nº #DPI2006-15275 y #DPI2007-61214), y cofinanciada con fondos FEDER y la Secretaría Xeral de I+D de la Consellería de Innovación, Industria y Comercio de la Xunta de Galicia (# PGDIT06TAM11801PR).

REFERENCIAS

- [1] Leveque, R. J., *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhauser Verlag, Basel, 1990.
- [2] Harten, A., Engquist, B., Osher, S., Chakravarthy, S., Uniformly high order essentially nonoscillatory schemes, III, *Journal of Computational Physics*, 71:231-303, 1987.
- [3] Sagaut, P., *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows. An introduction*, Third edition, Berlin: Springer Verlag, 2005.
- [4] Lele, S. K., Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution, *Journal of Computational Physics* 103:16-42, 1992.
- [5] Wagner, G. J. and Liu, W. K., Turbulence simulation and multiple scale subgrid models, *Computational Mechanics*, 25:117-136, 2000.

- [6] Cueto-Felgueroso, L., Colominas, I., Nogueira, X., Navarrina, F., Casteleiro, M., Finite volume solvers and Moving Least-Squares approximations for the compressible Navier-Stokes equations on unstructured grids, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:4712-4736, 2007.
- [7] Nogueira, X., Formulaciones de Mínimos Cuadrados Móviles y de Volúmenes Finitos de alto orden para la simulación numérica de flujos compresibles, Tesis Doctoral, Universidade da Coruña, 2009.
- [8] Liu, W. K, Hao, W., Chen, Y., Jun, S., Gosz, J., Multiresolution Reproducing Kernel Particle Methods, *Computational Mechanics*, 20:295-309, (1997).
- [9] Sjögren, B., Yee, H. C., Multiresolution wavelet based adaptive numerical dissipation control for high order methods, *Journal of Scientific Computing*, 20:211-255, 2004.
- [10] Nogueira, X., Cueto-Felgueroso, L., Colominas, I., Gómez, H., Navarrina, F., Casteleiro, M., On the accuracy of Finite Volume and Discontinuous Galerkin discretizations for compressible flow on unstructured grids, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, DOI: 10.1002/nme.2538, 2009.
- [11] Barth, T. J., Jespersen, D. C., The design and application of upwind schemes on unstructured meshes, *AIAA paper-89-0366*, 1989.
- [12] Abgrall, R., On Essentially Non-Oscillatory Schemes on Unstructured Meshes: Analysis and Implementation, *Journal of Computational Physics*, 114:45-58, 1994.
- [13] Ollivier-Gooch, C. F., Quasi-ENO Schemes for Unstructured Meshes Based on Unlimited Data-Dependent Least-Squares Reconstruction, *Journal of Computational Physics*, 133:6-17, 1997.
- [14] Shu, C.-W., Osher, S., Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes II, *Journal of Computational Physics*, 83:32-78, 1989.
- [15] AGARD AR-211, Test Cases for Inviscid Flow Fields, AGARD, 1985
- [16] Smart, M. K., Kalkhoran, I. M., Popovic, S., Some aspects of streamwise vortex behavior during oblique shock wave/vortex interaction, *Shock Waves*, 8:243-255, 1998.
- [17] White, F. M., Fluid Mechanics, Boston: McGraw-Hill Science Engineering, 1976.
- [18] Grasso, F., Pirozzoli, S., Shock-Wave-Vortex Interactions: Shock and Vortex Deformations, and Sound Production, *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 13:421-456, 2000.