



Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica
Dinámica de Fluidos Computacional

Taller 01 – Sem II / 2023

Puntos importantes:

- El informe final del taller deberá ser elaborada en \LaTeX (o usando Jupyter Notebook)
- El informe DEBERÁ incluir referencias bibliográficas (este punto es **MUY IMPORTANTE**).
- Códigos computacionales generados y usados deberán incluirse en la entrega virtual.
- Códigos deberán ser incuidos en el reporte como anexos

Condiciones para envío de taller:

Fecha de entrega: Domingo 15 de Octubre de 2023

Condiciones de entrega:

1. Proceso de entrega del taller (informe en PDF y códigos): Carga de UN SOLO archivo ZIP, con toda la información relevante, antes de las 23:59 del Domingo 15 de Octubre de 2023.
2. Todos los archivos deberán enviarse en UN SOLO ARCHIVO COMPRIMIDO. El archivo deberá nombrarse con el siguiente formato: <Apellido>_Taller01CFD-2023-S02.zip, donde <Apellido> hace referencia al primer apellido del autor del informe.

Caso 1. Exactitud de esquemas de diferencias finitas (30 %)

Utilice esquemas de diferencias finitas uniformes de 1°, 2°, y 4° orden de exactitud, para determinar los valores de primera y segunda derivada de la función mostrada en ecuación (1):

$$f(x) = (1.1 \cos(\kappa_1 x) - 1.3 \sin(\kappa_2 x)) \exp[-\kappa_0 x^2] \quad (1)$$

en donde $x \in \{-\pi, \pi\}$ y las constantes están definidas de acuerdo con las siguientes relaciones:

$$\kappa_0 = \frac{2}{3}, \quad \kappa_1 = \frac{5}{3}, \quad \kappa_2 = 3\kappa_1$$

Use como valor de tamaño de malla máximo un valor constante igual a $\Delta x_{\max} = \frac{\pi}{6}$. Complemente los esquemas propuestos con diferencias finitas asimétricas para la determinación de las derivadas en las fronteras.

Objetivos y actividades

Para este caso usted debe:

1. Presentar la metodología de obtención de los siguientes esquemas de diferencias finitas para la primera derivada:
 - Obtener y emplear un esquema de segundo orden mediante cualquiera de las técnicas presentadas en clase (o la suya propia!)
 - Utilizar el esquema de cuarto orden compacto presentado en Lele (1992).
2. Escribir un programa en **Python** para investigar la exactitud de los esquemas estudiados en función de un tamaño de malla (Δx), y de la precisión computacional usada.
3. Calcular el error bajo norma L_2 de cada diferencia finita en el intervalo $x \in [-\pi, \pi]$ como función del número de puntos utilizados.
4. Construir gráficos de tasas de convergencia. Use escalas logarítmicas para revelar el orden de exactitud de cada esquema usado, como se ilustra en Figura 1a y Figura 1b.
5. Hacer análisis de tasa de convergencia de esquemas para segunda derivada: (i) Generación de código, (ii) Realización de pruebas numéricas, y (iii) Construcción de gráficos de error. Usar el mismo rango indicado anteriormente, $x \in [-\pi, \pi]$. SOLO USAR ESQUEMAS DE PRIMER Y SEGUNDO ORDEN PARA ESTE PUNTO.

Nota: Para el cálculo de las segundas derivadas utilice el concepto de matrices de diferenciación. Por lo anterior NO es necesaria la derivación teórica de ninguno de los esquemas numéricos.

Lo que se debe reportar

Es importante que en su informe usted:

1. Presente la metodología de obtención del esquema de segundo orden para la primera derivada
2. Indique explícitamente el esquema de cuarto orden usado para la primera derivada
3. Construya gráficos apropiados para presentar el análisis de precisión/exactitud de cada esquema
4. Discuta el comportamiento de los errores de truncamiento y redondeo vs tamaño de malla
5. Incluya los códigos fuente de sus programas en el envío electrónico

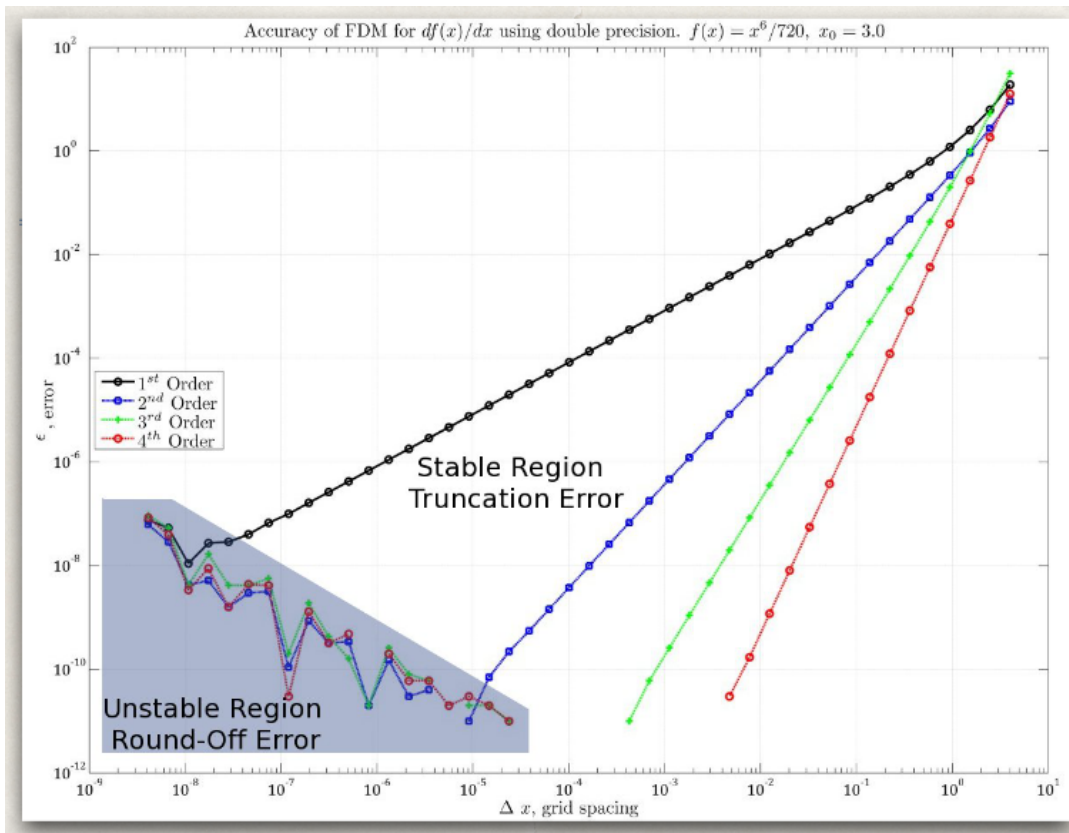
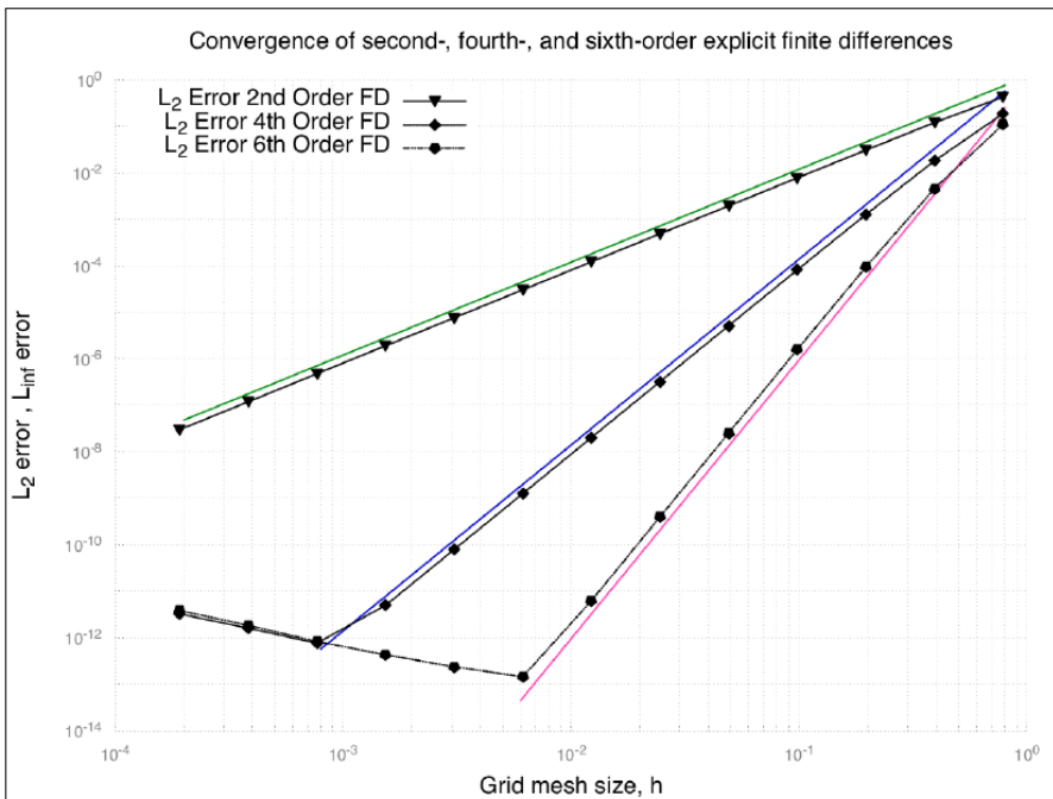
(a) Error absoluto de esquemas de Diferencias Finitas en función de Δx (b) Error absoluto medido con norma L_2 en función de Δx (indicado como h en el gráfico)

Figura 1: Ejemplo de análisis de errores y precisión de esquemas de diferencias finitas.

Caso 2. Transporte difusivo y decaimiento de contaminantes (30 %)

Las ríos y cuencas fluviales son, en muchos sitios, fuentes naturales de agua potable que son usadas para consumo humano. La habilidad para monitorear de manera precisa la concentración de un contaminante en tales fuentes hídricas es de vital importancia. Algunas dificultades adicionales surgen cuando se considera que el contaminante puede decaer y formar otro compuesto o contaminante diferente, lo cual puede ocurrir en escalas temporales características generalmente "pequeñas". Las concentraciones variantes en el tiempo de los contaminantes pueden ser modeladas por ecuaciones de advección-difusión-reacción.

En este caso se deben determinar los perfiles de concentración de dos contaminantes en un río. Uno de los contaminantes (P) decae gradualmente hacia un contaminante más estable (Q). Ambas sustancias obedecen a una evolución de advección-difusión. Ambos contaminantes son transportados advectivamente a una velocidad constante u , aunque también presentan difusión espacial dada por un coeficiente de difusión $D(x)$ NO contante en el espacio. El sistema se puede describir con el siguiente conjunto de ecuaciones de advección, difusión, reacción:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial P}{\partial x} \right] - u \frac{\partial P}{\partial x} - \tau P + S \quad (2)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial Q}{\partial x} \right] - u \frac{\partial Q}{\partial x} + \tau P \quad (3)$$

donde t es el tiempo, x es la variable espacial (unidimensional), $D(x)$ es el coeficiente de difusión, u es la velocidad del flujo (transporte advectivo), τ es una tasa de decaimiento del reactivo P (y transformación en reactivo Q), y $S(x)$ representa una posible fuente volumétrica. Tanto el coeficiente de difusión, como la tasa de generación (fuente), se pueden asumir suaves y no-negativas. Igualmente será válido asumir que la velocidad v es non-negativa en todo el dominio de transporte de los contaminantes.

El dominio de análisis x está definido por el intervalo $x \in [0, L]$. Las condiciones de frontera para P y Q en $x = 0$ son de tipo Fourier, y definidas como,

$$\left(D \frac{\partial P}{\partial x} - vP \right) \Big|_{x=0} = \left(D \frac{\partial Q}{\partial x} - vQ \right) \Big|_{x=0} = 0 \quad (4)$$

en tanto que las condiciones de frontera en el extremo de la derecha se pueden asumir como condiciones de Dirichlet, y definidas como: $P(L) = c$, $Q(L) = c$, donde c es un valor constante. Los valores de parámetros y constantes tales como L , τ , c y u son específicos de cada caso analizado, y podrán asumirse como conocidos. Perfiles de $D(x)$ y $S(x)$ también se asumirán como conocidos y deberán ser leídos de archivos de entrada.

En este caso, usted debe realizar un estudio numérico de los perfiles de P y Q a lo largo de x en función del tiempo, usando esquemas de diferencias finitas centradas no-uniformes, y obtener los perfiles finales cuando el sistema alcance estado estable.

Objetivos y actividades - Etapa I

Etapla I: Implementar un código computacional que permita estudiar los perfiles de P y Q , usando esquemas de diferencias finitas centradas No-uniformes (NuCFDS). Se propone usar la siguiente metodología:

1. Generar expresiones adimensionales de las ecuaciones (2) y (3)
2. Formular esquemas discretos para las expresiones adimensionales usando NuCFDS acopladas con Crank-Nicolson^a
3. Escribir un código en **Python** para determinar los perfiles de P y Q
4. El código deberá leer desde un archivo externo los siguientes parámetros:
 - L : La longitud total del dominio en x
 - N_x : El número de nodos totales de la malla computacional
 - u : La velocidad de transporte advectivo (velocidad del flujo de transporte)
 - τ : La constante de decaimiento de P
 - c : El valor de P y Q en $x = L$
5. El código obtendrá los perfiles de $D(x)$ y $S(x)$ como valores nodales de un archivo llamado **perfilesDS.dat**. Este archivo deberá tener dos columnas y N_x filas. La primera columna corresponderá a los valores de D y la segunda a S .
6. El código deberá producir un archivo llamado **perfilesPQ.dat**, el cual contendrá N_x filas y tres columnas; Las columnas 1, 2 y 3 corresponderán a los valores de x , P y Q en cada nodo, respectivamente y dados en forma dimensional.

^aSe sugiere usar un planteamiento Crank-Nicolson modificado, con una primera etapa usando Euler-Forward, para evitar recurrir a procesos de solución implícita matricial.

Objetivos y actividades - Etapa II

Etapla II: Realizar un estudio paramétrico de la influencia de diferentes configuraciones de malla y coeficientes de entrada en el comportamiento de los contaminantes P y Q .

1. Usar las mismas distribuciones espaciales $D(x)$ y $S(x)$ de la *Etapla I*.
2. Realizar experimentos numéricos con al menos tres mallas diferentes
 - Construir curvas de P y Q vs t para al menos cinco posiciones espaciales
 - Construir curvas de P y Q vs x para al menos cinco instantes temporales.
3. Realizar experimentos numéricos para tres combinaciones diferentes de c , τ , y u
4. Analizar y discutir:
 - Efecto del tamaño de malla y/o presencia/ausencia de oscilaciones numéricas artificiales
 - Efecto de variaciones de parámetros adimensionales identificados

Lo que se debe reportar

1. Presentar la metodología de obtención de los esquemas de diferencias finitas usados
2. Construir gráficos apropiados para presentar la solución y el análisis de cada caso
3. Discutir efecto del tamaño de malla y posible presencia de oscilaciones numéricas
4. Presentar una discusión general sobre el uso de los esquemas numéricos utilizados
5. Presentar una discusión general del fenómeno y del efecto de los parámetros considerados.

Caso 3. Transporte difusivo en dominio bi-dimensional (40 %)

Una de las versiones más simples de las ecuaciones de Navier-Stokes es el modelo de transporte convectivo en dos dimensiones, de una sustancia idealmente inviscida. El modelo matemático de este caso generalizado de transporte se puede escribir, considerando un término fuente en cada dirección y para flujo incompresible, como:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = S_x(x, y, t) \quad (5)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = S_y(x, y, t) \quad (6)$$

donde t es el tiempo, x y y son coordenadas espaciales (cartesianas), u y v las componentes de velocidad en x, y , y los términos S_x y S_y representan campos escalares por unidad de masa que actúan como fuentes de momentum en las direcciones x y y respectivamente.

Se desea estudiar el comportamiento de un campo de flujo modelado con las ecuaciones (5) y (6), con términos fuente definidos como:

$$S_x(x, y, t) = 2 \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{\kappa_x} - \frac{(y - y_0)^2}{\kappa_y}\right) \sin(2\omega t) \quad (7)$$

$$S_y(x, y, t) = 2 \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{\kappa_y}\right) \cos(0.3\omega t) \quad (8)$$

en un dominio rectangular definido como $\Omega = \{(x, y) | 0 \leq x \leq 5\pi, 0 \leq y \leq \pi\}$, con $x, y \in \mathbb{R}$, y con condiciones de frontera tipo Dirichlet dadas por:

$$u = 1, v = 1 \text{ para } \begin{cases} x = 0, x = 5\pi \\ y = 0, y = \pi \end{cases} \quad (9)$$

Considere que las condiciones iniciales del problema están definidas como,

$$u(x, y), v(x, y) = \begin{cases} 2, & \text{para } (x, y) \in (\pi, 3\pi/2) \times (\pi/3, 2\pi/3) \\ 1, & \text{en todo el resto del dominio } \Omega \end{cases} \quad (10)$$

Objetivos y actividades - Etapa I

Etapla I: Diseñar e implementar un código computacional que permita resolver el campo de flujo usando esquemas de diferencias finitas centradas uniformes (UCFDS) de cuarto orden de precisión. Se propone usar la siguiente metodología:

1. Generar expresiones adimensionales de las ecuaciones (5) y (6)
2. Formular esquemas discretos para las expresiones adimensionales, usando UCFDS de cuarto orden.
3. Acoplar la formulación espacial con un esquema de integración temporal de segundo orden. Se sugiere usar un planteamiento Crank-Nicolson modificado, con una primera etapa usando Euler-Forward, para evitar recurrir a procesos de solución implícita matricial.
4. Implementar la formulación desarrollada en Python
5. El código deberá leer desde un archivo externo los siguientes parámetros:
 - κ_x, κ_y : parametros de ajuste espacial de S_x y S_y
 - N_x, N_y : El número de nodos totales de la malla computacional
 - Δt : El tamaño de paso de tiempo
 - x_0, y_0 : Coordenadas de posición de las fuentes S_x y S_y
 - ω : Frecuencia angular de oscilación temporal
 - Valores de los factores de escalamiento usados para la adimensionalización

Objetivos y actividades - Etapa II

Etapla II: Realizar un estudio paramétrico del comportamiento de u y v en función del tamaño de malla, de los parámetros κ_x, κ_y , y ω . A continuación se propone una metodología de trabajo a seguir.

1. Realizar experimentos numéricos y mostrar las soluciones del esquema implementado para una combinación dada de κ_x, κ_y , y ω .
 - Construir curvas de u y v vs t , para al menos cinco posiciones espaciales
 - Construir perfiles de u y v vs x , en tres coordenadas y diferentes, para al menos cinco instantes temporales.
2. Realizar experimentos numéricos para diferentes combinaciones de $N_x, N_y, \kappa_x, \kappa_y$, y ω con el fin analizar y discutir:
 - Efecto del tamaño de malla
 - Efecto de los parámetros de dispersión espacial de S_x y S_y
 - Efecto de oscilaciones de "baja" frecuencia.

Lo que se debe reportar

En su informe usted debe:

1. Presentar la metodología de obtención del esquema final de diferencias finitas usado
2. Construir gráficos apropiados para presentar la solución y el análisis de cada caso
3. Discutir efecto del tamaño de malla y posible presencia de oscilaciones numéricas
4. Presentar una discusión general del fenómeno y del efecto de los parámetros considerados.

Referencias

- [1] S. K. Lele, «Compact finite difference schemes with spectral-like resolution,» *Journal of Computational physics*, vol. 103, n.º 1, págs. 16-42, 1992.