

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ingeniería

**Implementación de la Versión Tridimensional del  
Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática y su  
Aplicación al Estudio de Fluxos Complejos**

Tesis presentada para optar al título de Ingeniera Mecánica en la Universidad de Buenos Aires

**Maite Rodriguez Muñiz**

Director: Dr. Alejandro Daniel Otero

Lugar de trabajo: Grupo de Investigaciones en  
Sistemas Energéticos Primarios,  
Departamento de Energía,  
Facultad de Ingeniería.

Buenos Aires, 2023.

## Resumen

En el marco de la mecánica de los fluidos computacional, la presente tesis expone la nueva implementación tridimensional del método de la Ecuación Laplaciana Cinemática, que se basa en una formulación híbrida velocidad–vorticidad de las ecuaciones de Navier Stokes en su forma conservativa. Se implementa numéricamente el método en el lenguaje de programación `python`, utilizando la interfaz a la biblioteca PETSc<sup>1</sup>. Esta biblioteca está específicamente diseñada para la resolución de problemas numéricos en entornos de alto desempeño, mediante cómputo paralelo. Para la discretización espacial se utiliza el método de los elementos espectrales (Patera, 1984; Karniadakis et al., 1991). Esta técnica permite una discretización de orden variable, factible de ser llevada hasta alto orden y posee convergencia espectral, es decir, mayor que la dada por elementos de un orden fijo cualquiera. Para la solución de la evolución temporal se utilizan algoritmos de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE solvers). Ambas discretizaciones son desarrolladas junto con la explicación de la implementación realizada y la configuración del ambiente de trabajo.

La validación se realiza en contraste con los resultados analíticamente conocidos como: el desarrollo de una capa límite sobre una placa plana infinita, desarrollado en Bachelor (2000), y el problema de vórtices de Taylor–Green, descripto en Taylor y Green (1937). Con este último se estudia la convergencia espectral en la discretización espacial del método, la convergencia espectral de los operadores diferenciales, y se verifica la evolución temporal. Al mismo tiempo, para validar las condiciones de borde de no deslizamiento (no-slip) se contrasta contra soluciones experimentales 3D de Žunić et al. (2000) del problema de la cavidad, donde el flujo está forzado por el deslizamiento de la tapa. Además, se exponen resultados con diferentes condiciones de borde, que fuerzan el flujo en la cavidad de diversas maneras y cavidades con distintas geometrías.

---

<sup>1</sup><https://www.mcs.anl.gov/petsc/>

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>4</b>
1.1. Objetivos y organización de la tesis . . . . .	5
<b>2. Método de elementos finitos</b>	<b>7</b>
2.1. Introducción . . . . .	7
2.2. Elementos Espectrales . . . . .	16
2.2.1. Elementos espectrales unidimensionales . . . . .	16
2.2.2. Elementos espectrales en 3 dimensiones . . . . .	20
<b>3. Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática (KLE)</b>	<b>24</b>
3.1. Introducción . . . . .	24
3.2. Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática . . . . .	26
3.3. Solución espacial de la velocidad . . . . .	27
3.4. Evolución temporal del flujo . . . . .	30
<b>4. Implementación Tridimensional del Método KLE</b>	<b>34</b>
4.1. Discretización de la solución espacial . . . . .	34
4.2. Discretización de la solución temporal . . . . .	37
4.3. Implementación . . . . .	42
<b>5. Validación y resultados</b>	<b>49</b>
5.1. El problema de Taylor–Green . . . . .	49
5.1.1. Precisión de la solución espacial . . . . .	52
5.1.2. Precisión de los operadores diferenciales . . . . .	54
5.1.3. Precisión de la evolución temporal . . . . .	58
5.1.4. Vórtices de Taylor–Green para diferentes números de Reynolds . . . . .	59
5.2. El problema de capa límite . . . . .	65
5.3. Flujo en una cavidad forzado por el deslizamiento de la tapa . . . . .	68
5.3.1. Verificación del problema bidimensional . . . . .	68

5.3.2. Verificación del problema tridimensional . . . . .	70
5.4. Flujos en cavidad con configuraciones no convencionales . . . . .	74
5.4.1. Tapa superior con movimiento en diagonal . . . . .	74
5.4.2. Tapas superior e inferior con movimiento en sentido opuesto . . . . .	75
5.4.3. Tapa superior e inferior moviéndose en el mismo sentido . . . . .	78
5.4.4. Cavidad rectangular horizontal . . . . .	79
5.4.5. Cavidad rectangular vertical . . . . .	81
<b>6. Conclusiones y trabajos futuros</b>	<b>84</b>

# Capítulo 1

## Introducción

Una rama importante de la ingeniería mecánica es la mecánica de los fluidos. Esta rama estudia el movimiento de los fluidos, las fuerzas que los provocan y la interacción de los mismos con el contorno que los limita. En sus orígenes, esta ciencia era prácticamente experimental en su totalidad. Formalizó su base teórica con la llegada de las matemáticas a la física en el siglo XVII, sobre todo con el nacimiento del cálculo diferencial. Con esta base y varios años más tarde, en el siglo XIX, Navier y Stokes elaboran su conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales, que pueden describir el movimiento de fluidos viscosos. Las mismas expresan la conservación de la cantidad de movimiento y la conservación de la masa para fluidos newtonianos. Posteriormente en la segunda mitad del siglo XX, nació el cálculo numérico, que permitió el surgimiento de una nueva rama de la mecánica de fluidos: la mecánica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés *Computational Fluid Dynamics*), con la aparición de las primeras computadoras. Por lo tanto, a partir de ese momento, un problema de la mecánica de los fluidos se podría abordar por vía teórica, experimental o computacional o combinando algunos o todos estos enfoques.

La mecánica de fluidos computacional analiza y buscar aproximar la solución de problemas sobre el flujo de los fluidos utilizando métodos numéricos y diversos algoritmos. Se utilizan computadoras para realizar los cálculos necesarios para simular el flujo del fluido y la interacción de éste con las superficies definidas por las condiciones de contorno. Estos algoritmos utilizan como validación, o *benchmarking*, problemas conocidos, es decir, que hayan sido resueltos antes, ya sea experimental como teóricamente. Algunos ejemplos de estos problemas clásicos utilizados para validación son: el problema de vórtices de Taylor–Green, descripto en [Taylor y Green \(1937\)](#); el desarrollo de una capa límite sobre una placa plana infinita, desarrollado en [Batchelor \(2000\)](#), y el flujo en una cavidad forzado por el movimiento de su tapa con el que contrastaremos los datos 3D de [Žunič et al. \(2000\)](#).

Generalmente en la CFD se utilizan las ecuaciones de Navier–Stokes en su formulación clási-

ca velocidad-presión. En cambio, en Ponta (2005) se desarrolla un nuevo método de resolución de las ecuaciones de Navier–Stokes en su formulación velocidad-vorticidad. Este método es denominado Ecuación Laplaciana Cinemática (KLE por sus siglas en inglés *Kinematic Laplacian Equation*) y permite desacoplar las variables de velocidad y vorticidad. Por el lado de la cinemática, el método consta en resolver la ecuación de Poisson de la velocidad para obtener la distribución del campo de velocidad a partir de la vorticidad y, por el lado de la dinámica, se utilizan las ecuaciones de Navier–Stokes en vorticidad que, una vez discretizada, resulta en una ecuación diferencial ordinaria (ODE por sus siglas en inglés *Ordinary Differential Equation*).

## 1.1. Objetivos y organización de la tesis

El objetivo general de esta tesis es la implementación computacional del método de la Ecuación Laplaciana Cinemática (KLE) utilizando la formulación híbrida velocidad–vorticidad para simular problemas fluidodinámicos tridimensionales. Teniendo como base y referencia los trabajos de Burzstyn et al. (2008), Otero (2008) y Ponta (2005) que se han aplicado a la resolución de problemas bidimensionales, el aporte de esta tesis consistirá en resultar la primera implementación de la versión tridimensional del método.

La metodología de trabajo consistirá en implementar numéricamente el método en el lenguaje de programación `python`, utilizando la interfaz a la biblioteca PETSc<sup>1</sup>. Esta biblioteca está específicamente diseñada para la resolución de problemas numéricos en entornos de alto desempeño, utilizando cómputo paralelo. Para la discretización espacial se utilizará el método de los elementos espectrales (Patera, 1984; Karniadakis et al., 1991). Esta técnica permite una discretización de orden variable, factible de ser llevada hasta alto orden y posee convergencia espectral, es decir, mayor que la dada por elementos de un orden fijo cualquiera. Además, combina ventajas del método de elementos finitos isoparamétricos (Bathe, 1996) y los métodos espectrales puros (Boyd, 2000). Para la solución de la evolución temporal se utilizarán algoritmos de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE solvers). Los modelos desarrollados y por desarrollar se validarán contra resultados experimentales y/o numéricos publicados en la bibliografía científica correspondiente.

En el capítulo 2 se desarrolla el método de los elementos finitos clásico (FEM por sus siglas en inglés *Finite Element Method*), como método general de discretización espacial, y en especial el método de elementos espectrales que resulta ser una versión particular del anteriormente mencionado y es el que se utiliza en el presente trabajo. En el capítulo 3 se describe el método KLE, que fue presentado en Ponta (2005), Otero y Ponta (2006) y Burzstyn et al. (2008) en particular, utilizando una discretización por elementos espectrales, válido para mallas estructu-

---

<sup>1</sup><https://www.mcs.anl.gov/petsc/>

radas y no estructuradas. En el capítulo 4 se desarrolla la nueva implementación tridimensional del método KLE generada en la presente tesis. A diferencia de las implementaciones anteriores basadas en la forma no conservativa de las ecuaciones de Navier–Stokes, en este caso se parte de la forma conservativa de dichas ecuaciones. Se explicitan la discretización de la solución espacial y la discretización de los operadores diferenciales. Finalmente, se describen algunos aspectos fundamentales de la implementación utilizando el lenguaje `python` y la biblioteca `PETSc`, y el proceso de solución temporal del método KLE, que varía según los distintos tipos de condiciones de contorno. En el capítulo 5 se presentan los resultados tanto de las validaciones parciales como generales de la implementación tridimensional del método, así como también se exponen resultados de la aplicación de estos desarrollos a otros problemas fluidodinámicos. Por último, en el capítulo 6 se exhiben las conclusiones de la presente tesis y se proponen líneas de trabajo a futuro.

# Capítulo 2

## Método de elementos finitos

En el presente trabajo se utiliza como técnica de discretización espacial el método de elementos espectrales que resulta ser una versión particular del método de elementos finitos clásico (FEM por sus siglas en inglés *Finite Element Method*). En este capítulo se presentan ambos métodos siguiendo la exposición en la tesis de [Bursztyn \(2009\)](#).

### 2.1. Introducción

El método de elementos finitos es utilizado para aproximar soluciones de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que se presentan en varios campos de las matemáticas aplicadas. Para ello, se divide el dominio de análisis en una cantidad finita de subdominios, llamados elementos, y se utiliza la forma variacional del problema para construir una aproximación a la solución. Dada la sólida base matemática que posee le permite ser aplicado a una gran variedad de problemas en diferentes áreas de las ciencias. Por otra parte, la facilidad de adaptación de las mallas permite el análisis en dominios con geometrías complejas.

Para resolver un problema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (*partial differential equation*, PDE) por el método de elementos finitos se comienza planteándolo en su forma débil, que bajo ciertas condiciones puede resultar análoga a un problema de minimización funcional. El FEM permite convertir el problema continuo en su forma débil en un problema discreto que finalmente resulta en un sistema de ecuaciones algebraicas. Para ello, se utiliza el método de Galerkin en el cual el espacio de funciones de prueba (*test* y *trial*) se construye de una forma que es característica del FEM. Primero se divide el dominio de análisis en subdominios denominados *elementos finitos*. Dentro de cada subdominio las funciones de prueba se construyen como polinomios a los cuales se les impone un determinado orden de continuidad con los elementos adyacentes. Por lo tanto, la solución obtenida estará formada por funciones que resultarán polinómicas a trozos en el dominio completo.

La reformulación de la PDE original en su forma débil diferencia este método del método de diferencias finitas, otro método ampliamente utilizado para la aproximación de soluciones de PDE's. En diferencias finitas se parte directamente de la ecuación diferencial y se discretiza la misma convirtiéndola en una ecuación en diferencias en los nodos de una grilla.

Una de las ventajas que posee el método de los elementos finitos por sobre el método de diferencias finitas es la facilidad relativa con que se manejan las condiciones de borde del problema. Otros métodos numéricos de aproximación de PDE's menos utilizados tienen en común parte de su formulación con el FEM. En el método de volúmenes finitos las funciones de peso (test) son funciones tipo "hat" (constantes en parte del dominio y nulas en el resto). El método de elementos de contorno utiliza una segunda integración por partes para obtener ecuaciones algebraicas en el contorno del dominio.

Se han propuesto gran variedad de elementos finitos diferentes, de formas triangulares o cuadrilaterales en 2 dimensiones, tetra o hexaédricas en 3 dimensiones, con funciones de interpolación de distintos grados y distinta continuidad en los contornos de 2 o más elementos. Además se utilizan distintas ubicaciones de los nodos de los elementos.

Para una mejor explicación del método, se considerará, como ejemplo, el problema unidimensional de encontrar una función  $u = u(x), 0 \leq x \leq 1$  que satisface la siguiente ecuación diferencial y condiciones de borde:

$$\begin{cases} -u'' + u = x, & 0 < x < 1, \\ u(0) = 0, & u(1) = 0, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde  $u'' = \frac{d^2u}{dx^2}$ .

La parte no homogénea de la ecuación diferencial dada por la función  $f(x) = x$  en la parte derecha y los coeficientes que multiplican a  $u$  y sus derivadas (-1 y 1) son suaves, es decir, que son diferenciables una infinidad de veces. De esta forma, se puede probar que existe una única función  $u$  que satisface la ecuación diferencial en todo punto del dominio, como así también satisface las condiciones de borde. En este ejemplo particular, la solución es  $u(x) = x - \left(\frac{\sinh(x)}{\sinh(1)}\right)$  donde  $\sinh$  es la función seno hiperbólico evaluado en un punto. Sin embargo, no siempre existe una solución al problema ya sea porque los datos del problema no son suaves o ésta no puede ser escrita en forma cerrada debido a la complejidad del dominio, de sus coeficientes y de sus condiciones de borde. Por ejemplo, si en lugar de la ecuación diferencial 2.1 tuviéramos el problema

$$\begin{cases} -u'' + u = \delta \left(x - \frac{1}{2}\right), & 0 < x < 1 \\ u(0) = 0, & u(1) = 0, \end{cases} \quad (2.2)$$

donde  $\delta(x - \frac{1}{2})$ , la *delta de Dirac*, es una forma simbólica de describir operaciones sobre funciones suaves definida como

$$\int \delta\left(x - \frac{1}{2}\right) \phi(x) dx = \phi\left(\frac{1}{2}\right) \quad (2.3)$$

para cualquier función  $\phi$  que satisfaga las condiciones de borde. En caso que exista una solución al problema 2.2, tendrá una discontinuidad en su primer derivada  $u'$  en el punto  $x = \frac{1}{2}$  y su segunda derivada  $u''$  no existirá en dicho punto. Pero ¿cómo puede existir una solución  $u$  al problema 2.2 en todo el dominio si no existe  $u''$  en el punto  $x = \frac{1}{2}$ ? La dificultad se encuentra cuando se exige una solución para absolutamente todo el dominio. Esta restricción es muy fuerte. Para relajar esta condición, se podría reformular el problema de forma que sus condiciones sean más débiles sobre la solución y sus derivadas. Esta reformulación se llama formulación débil o formulación variacional.

Una forma de construir una formulación débil es partir de una formulación pesada definiendo una función de peso  $v$  tal que al multiplicar  $u''$  por  $v$ , se genere una función  $u''v$  integrable en todo el dominio. La función de peso  $v$  pertenecerá a una clase de funciones  $H$  lo suficientemente suaves. Se define la formulación débil como, hallar  $u \in \tilde{H}$  tal que

$$\begin{cases} \int_0^1 (-u'' + u - x)v dx = 0, & \forall v \in H, \\ u(0) = 0, & u(1) = 0. \end{cases} \quad (2.4)$$

Esta formulación es válida y la solución de la ecuación diferencial 2.1 también satisface las ecuaciones 2.4 y es la única solución. La definición del conjunto de funciones de peso  $H$  es esencial para una formulación pesada aceptable y podrá no ser igual a la clase de funciones  $\tilde{H}$  donde se busca la solución  $u$ . El hecho que  $H$  no sea igual a  $\tilde{H}$  se debe a la falta de simetría de la formulación de la ecuación 2.4.  $u$  debe ser posible de derivar dos veces mientras que  $v$  no requiere poseer ninguna derivada. Si  $u$  y  $v$  son lo suficientemente suaves, se puede obtener integrando por partes

$$\int_0^1 -u''v dx = \int_0^1 u'v' dx - u'v|_0^1, \quad (2.5)$$

y si elegimos que las funciones de peso  $v$  se anulen en los contornos del dominio, entonces tenemos

$$\int_0^1 -uv dx = \int_0^1 u'v' dx, \quad (2.6)$$

y obtenemos una nueva formulación débil:

$$\begin{aligned}(u'v)' &= u''v + u'v' \\ \int_0^1 (u'v)' dx &= \int_0^1 (u''v + u'v') dx \\ \implies \int_0^1 -u''v dx &= \int_0^1 u'v' dx - u'v |_0^1 \\ \implies \int_0^1 (u'v' + uv - xv) dx &= 0, \quad \forall v \in H_0^1\end{aligned}\tag{2.7}$$

donde  $H_0^1$  es el espacio de funciones de peso derivables al menos 1 vez y que vale 0 en los extremos. Esta formulación requiere menor orden de derivadas en la solución.

Esta formulación posee cierta simetría, aparece el mismo orden de derivación tanto en el conjunto de funciones de posibles soluciones como en el conjunto de funciones de peso y vale que  $H = \tilde{H} = H_0^1$ . Podemos ver que, nuevamente, el conjunto de soluciones de la ecuación diferencial 2.1, satisface también la ecuación diferencial 2.4 como así también la ecuación diferencial 2.7. Además, dado que la ecuación diferencial 2.4 exige un orden mayor de derivación que la ecuación diferencial 2.7, se obtiene una formulación aún más débil.

El término más irregular de la formulación 2.7 es  $u'v'$  ya que si  $u$  y  $v$  son irregulares, entonces sus derivadas lo serán aún más. Dado que  $u$  y  $v$  pertenecen a la misma clase de funciones  $H_0^1$  hay que considerar la posibilidad que  $u = v$ , es decir, que se necesitará que  $(v')^2$  sea lo suficientemente suave para que pueda ser calculada su integral. Es sabido que las funciones que satisfacen esta condición tienen sus primeras derivadas de cuadrado integrable. Por lo que una función  $w$  pertenecerá a  $H_0^1$  si

$$\int_0^1 ((w')^2 dx < \infty \text{ y } w(0) = w(1) = 0.\tag{2.8}$$

Una vez resuelta la ecuación diferencial 2.7 se deberá validar si la solución también satisface a la ecuación diferencial 2.1.

Otra forma de obtener una formulación débil a partir de una fuerte, es mediante la minimización de un funcional. Esto puede realizarse sólo en los casos en que exista un funcional asociado a la ecuación diferencial. Por ejemplo, dado el funcional

$$\Phi = \frac{1}{2} \int (u')^2 + u^2 dx + \int xu du,\tag{2.9}$$

$$\delta\Phi = \int (u'\delta u' + u\delta u) dx + \int x\delta u du = 0,\tag{2.10}$$

la minimización consiste en calcular su variación, notada como  $\delta\Phi$ , e imponer que sea nula. De esta manera, una solución de la ecuación 2.7 minimiza en forma única el funcional 2.9.

Cabe destacar que  $H_0^1$  es un espacio vectorial, es decir que cualquier combinación lineal de funciones pertenecientes a  $H_0^1$  también pertenecerá a  $H_0^1$ . Además, también es de dimensión infinita, lo que significa que se puede definir una función que pertenece a  $H_0^1$  como una suma infinita de funciones multiplicadas por un coeficiente constante. En síntesis,  $v \in H_0^1$  puede ser representada como

$$v(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i \phi_i(x) \quad (2.11)$$

donde  $\beta_i$  son coeficientes y todas las funciones  $\phi_i$  forman una base de  $H_0^1$ . Además, si se tomara un número finito de términos de la serie se obtendría una aproximación  $v_N$  de  $v$ :

$$v_N(x) = \sum_{i=1}^N \beta_i \phi_i(x). \quad (2.12)$$

Por lo que una base de  $N$  funciones  $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$  forman un subespacio  $N$ -dimensional  $H_0^{(N)}$  de  $H_0^1$ . El *método de Galerkin* consiste en buscar una aproximación a la solución de la ecuación 2.7 subespacio  $H_0^{(N)}$  de  $H_0^1$ . La solución  $u_N \in H_0^{(N)}$  es de la forma

$$u_N(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i(x) \quad (2.13)$$

que satisface la ecuación 2.7 en el espacio  $H_0^1$ . En otras palabras la ecuación variacional que aproxima el problema es encontrar  $u_N \in H_0^{(N)}$  tal que

$$\int_0^1 (u'_N v'_N + u_N v_N) dx = \int_0^1 x v_N dx \quad \forall v_N \in H_0^{(N)}. \quad (2.14)$$

Ya que todas las  $\phi_i$  son conocidas,  $u_N$  será determinada una vez que los  $N$  coeficientes  $\alpha_i$  sean determinados. Dichos coeficientes se denominan *grados de libertad* de la aproximación. Eligiendo de forma apropiada a las constantes  $\beta_i$  de la ecuación 2.12, se pueden encontrar los coeficientes  $\alpha_i$  introduciendo las ecuaciones 2.12 y 2.13 en la ecuación 2.14. Una forma de escribir esto es

$$\sum_{i=1}^N \beta_i \left( \sum_{j=1}^N K_{ij} \alpha_j - F_i \right) = 0 \quad (2.15)$$

para cualquier elección de  $\beta_i$ , donde

$$K_{ij} = \int_0^1 [\phi'_i(x)\phi'_j(x) + \phi_i(x)\phi_j(x)] dx \quad (2.16)$$

y

$$F_i = \int_0^1 x\phi_i(x) dx \quad (2.17)$$

para  $i, j = 1, 2, \dots, N$

La matriz  $K = [K_{ij}]$  es llamada *matriz de rigidez* del problema 2.14 para las bases de funciones  $\phi_i$  y el vector columna  $F = \{F_i\}$  es conocido como *vector de fuerzas*. Debido a que cada  $\beta_i$  es arbitrario, se pueden deducir  $N$  ecuaciones que deben satisfacer los coeficientes  $\alpha_j$ . Por ejemplo para  $\beta_1 = 1$  y  $\beta_i = 0$  (con  $i \neq 1$ ) se obtiene

$$\sum_{j=1}^N K_{1j}\alpha_j = F_1.$$

Para  $\beta_2 = 1$  y  $\beta_i = 0$  (con  $i \neq 2$ ) se obtiene

$$\sum_{j=1}^N K_{2j}\alpha_j = F_2$$

y continuando de esta forma se obtiene un sistema lineal de  $N$  ecuaciones con  $N$  incógnitas  $\alpha_j$ :

$$K\alpha = F. \quad (2.18)$$

Como las  $\phi_i$  son linealmente independientes, las ecuaciones también lo serán y por consiguiente la matriz  $K$  será invertible. De esta forma se puede obtener la solución  $\alpha_j$ , resolviendo el sistema de la ecuación 2.18. La aproximación a la solución  $u_N$  será calculada mediante la ecuación 2.13 usando el resultado de la ecuación 2.18.

El método de elementos finitos provee una forma sistemática de construir una base de funciones para las aproximaciones de *Galerkin*. La idea principal es definir la base de funciones de bajo orden, a partir de subdividir el dominio en subregiones llamadas elementos finitos, por ejemplo, triángulos o cuadrados en dos dimensiones y tetraedros o hexahedros en tres dimensiones. Cada elemento está compuesto por nodos que lo definen. El conjunto de elementos y nodos que representan al dominio se llama *malla*.

En la figura 2.1 se pueden observar 4 elementos  $\Omega_i, i = 1, 2, 3, 4$ , con longitud  $h$  formando una malla de elementos finitos. En lugar de referirse a  $v_N$ ,  $u_N$  y  $H_0^{(N)}$ , en elementos finitos se

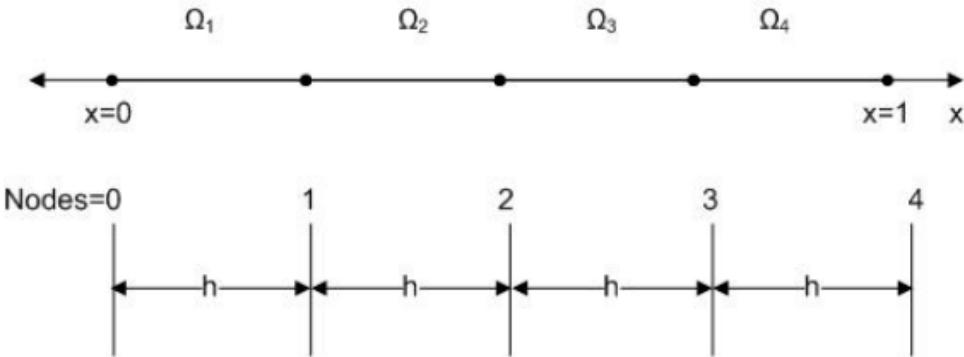


Figura 2.1: Partición de elementos finitos en una región  $0 \leq x \leq 1$  compuesta por 4 elementos con nodos en los extremos

hablará de  $v_h$ ,  $u_h$  y  $H_0^h$ , donde  $h$  es una longitud relacionada con el tamaño de los elementos de la malla. A medida que  $h$  sea menor, habrá mayor cantidad de nodos y por consiguiente, mayor cantidad de funciones que formen la base.

En general, las funciones de forma se eligen de manera que ellas o alguna de sus derivadas, dependiendo el orden de continuidad interelemental deseado, valgan 0 ó 1 en determinados puntos  $x_i^e$  del dominio elemental, los nodos.

Las funciones que formen la base deberán ser generadas por funciones partidas elemento a elemento sobre la malla llamadas *funciones de forma*; pertenecer a la clase de funciones suaves  $H_0^1$  (su derivada debe ser de cuadrado integrable), y los parámetros  $\alpha_i$  que definen la solución aproximada  $u_h$  son los valores de  $u_h(x)$  evaluada en los nodos.

Por ejemplo, la siguiente definición de funciones base cumplen con todos los requisitos:

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{h_i} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{h_{i+1}} & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.19)$$

donde  $h_i = x_i - x_{i-1}$  es el tamaño de  $\Omega_i$ . La primer derivada de las funciones de forma es:

$$\phi'_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{h_i} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{-1}{h_{i+1}} & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.20)$$

Para asegurarse que los parámetros  $\alpha_i$  que definen la solución aproximada  $u_h$  son los valores

de  $u_h(x)$  en los nodos, tiene que valer que:

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j. \end{cases} \quad (2.21)$$

De esta forma,

$$v_j = \sum_{i=1}^N \beta_i \phi_i(x_j) = \beta_j, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.22)$$

y por consiguiente,

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^N v_i \phi_i(x), \quad v_i = v_h(x_i). \quad (2.23)$$

Recordando que  $K_{ij}$  se obtiene integrando  $(\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j)$  sobre todo el dominio  $0 \leq x \leq 1$ , y que la integración es aditiva,

$$\begin{aligned} K_{ij} &= \int_0^1 (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx \\ &= \int_0^h (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx + \int_h^{2h} (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx \\ &\quad + \int_{2h}^{3h} (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx + \int_{3h}^1 (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx \\ &= \sum_{e=1}^4 \int_{\Omega_e} (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx \end{aligned} \quad (2.24)$$

siendo 4 la cantidad de elementos del ejemplo y donde  $\int_{\Omega_e}$  denota la integración sobre el elemento  $\Omega_e$ . Sea

$$K_{ij}^e = \int_{\Omega_e} (\phi'_i \phi'_j - \phi_i \phi_j) \, dx, \quad (2.25)$$

que representa a los componentes de la matriz de rigidez para el elemento finito  $\Omega_e$ , se puede definir entonces,

$$K_{ij} = \sum_{e=1}^4 K_{ij}^e. \quad (2.26)$$

Análogamente el vector de fuerzas puede escribirse como

$$F_i^e = \int_{\Omega_e} x \phi_i \, dx \quad (2.27)$$

$$F_i = \sum_{e=1}^4 F_i^e$$

donde  $F_i^e$  son componentes del vector de fuerzas para el elemento finito  $\Omega_e$ .

Otra particularidad es que  $K_{ij} = 0$  en caso que el nodo  $i$  y el nodo  $j$  no pertenezcan al mismo elemento, debido a que tanto  $\phi'_i \phi'_j$  como  $\phi_i \phi_j$  serán nulos. De esta forma, en un problema donde la malla contenga muchos elementos, habrá muchos valores nulos en la matriz  $K$ , es decir, la matriz de rigidez será una matriz rala. Además, si los nodos son numerados apropiadamente ([Karypis y Kumar, 1999](#)), se obtendrá una matriz banda de ancho de banda acotado.

Finalmente, dado que intercambiar los índices  $i$  y  $j$  en la integral que calcula  $K_{ij}$  no modifica el resultado, será siempre cierto que  $K_{ij} = K_{ji}$ , en otras palabras la matriz de rigidez será simétrica.

Como ya fue mencionado, las funciones de forma deberán ser generadas por funciones partidas elemento a elemento. Se observa que las operaciones realizadas para calcular cualquier  $K_{ij}^e$  o cualquier  $F_i^e$  son las mismas independientemente del elemento, con la salvedad del uso de las coordenadas correspondientes. Es por esto que se puede definir  $\xi = x - x_A$  como una coordenada local del elemento  $\Omega_e$  que va del nodo  $A$  al nodo  $B$ . De esta forma, a medida que  $x$  varía de  $x_a$  a  $x_b$ ,  $\xi$  variará de 0 a  $h$ .

Sean  $\psi_A^e$  y  $\psi_B^e$  las funciones de forma definidas para el elemento  $\Omega_e$ , siguiendo con el ejemplo de la ecuación [2.19](#) pueden escribirse en términos de  $\xi$

$$\begin{aligned} \psi_A^e(\xi) &= 1 - \frac{\xi}{h}, & \psi_B^e(\xi) &= \frac{\xi}{h}, \\ \psi_A'^e(\xi) &= -\frac{1}{h}, & \psi_B'^e(\xi) &= \frac{1}{h}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

De esta forma,

$$\begin{aligned} K_{AA}^e &= \int_0^h \left( [\psi_A^e]'(\xi)^2 + [\psi_A^e(\xi)]^2 \right) d\xi = \int_0^h \left[ \frac{1}{h^2} + \left( 1 - \frac{\xi}{h} \right)^2 \right] d\xi = \frac{1}{h} + \frac{h}{3} \\ K_{AB}^e &= K_{BA}^e = \int_0^h \left( [\psi_A^e]'(\xi) [\psi_B^e]'(\xi) + [\psi_A^e(\xi)] [\psi_B^e(\xi)] \right) d\xi \\ &= \int_0^h \left[ \left( \frac{-1}{h} \right) \frac{1}{h} + \left( 1 - \frac{\xi}{h} \right) \frac{\xi}{h} \right] d\xi = -\frac{1}{h} + \frac{h}{6} \\ K_{BB}^e &= \int_0^h \left( [\psi_B^e]'(\xi)^2 + [\psi_B^e(\xi)]^2 \right) d\xi = \int_0^h \left[ \frac{1}{h^2} + \left( \frac{\xi}{h} \right)^2 \right] d\xi = \frac{1}{h} + \frac{h}{3} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Análogamente el vector de fuerzas en el elemento  $\Omega_e$  puede calcularse como

$$\begin{aligned} F_A^e &= \int_0^h (x_A + \xi) \left(1 - \frac{\xi}{h}\right) d\xi = \frac{h}{6}(2x_A + x_B), \\ F_B^e &= \int_0^h (x_A + \xi) \left(\frac{\xi}{h}\right) d\xi = \frac{h}{6}(x_A + 2x_B). \end{aligned} \quad (2.30)$$

donde  $x_A$  y  $x_B$  son los valores de la función  $f(x) = x$  en los nodos  $A$  y  $B$ . De esta forma la matriz de rigidez y el vector de fuerzas del elemento  $\Omega_e$  quedarán definidos como

$$K^e = \begin{bmatrix} \frac{1}{h} + \frac{h}{3} & -\frac{1}{h} + \frac{h}{6} \\ -\frac{1}{h} + \frac{h}{6} & \frac{1}{h} + \frac{h}{3} \end{bmatrix} \quad F^e = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 2x_A + x_B \\ x_A + 2x_B \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

Finalmente, se deberá reemplazar para cada elemento los valores correspondientes a  $h$ ,  $x_A$ ,  $x_B$ , para poder realizar las sumas de las ecuaciones 2.26 y 2.28 para calcular  $K$  y  $F$  y luego resolver el sistema.

Resolviendo el sistema de la ecuación 2.18 se tienen los valores de la solución aproximada en todos los nodos de la malla. Para recuperar la solución en todos los puntos del dominio discretizado, se utiliza la ecuación 2.23 para interpolarla dentro de cada elemento en función de los valores nodales. En caso que se necesite calcular variables secundarias (i.e. aquellas que se obtienen a partir de derivar las variables principales interpoladas), esto se realiza en cada elemento a través de las derivadas de las funciones de interpolación. En caso que esto suceda y el grado de continuidad de las funciones de interpolación sea tal que no garantice continuidad de las derivadas requeridas, se recurre a algún método de suavizado de estas variables secundarias en los límites de los elementos para aproximar de forma continua estas variables que resultan discontinuas.

## 2.2. Elementos Espectrales

El método de elementos espectrales es una implementación particular de la versión  $p$  de los elementos finitos  $hp$ ; es decir aquella donde el aumento de precisión se logra aumentando el orden de las funciones de interpolación como contraparte de la versión  $h$  donde este aumento se consigue a partir de la disminución del tamaño de los elementos.

### 2.2.1. Elementos espectrales unidimensionales

En el método de elementos espectrales se puede utilizar cualquier polinomio de Jacobi para definir su base de funciones, entre los cuales, los polinomios de Chebyshev y Legendre son los

más comunes.

Los polinomios de Jacobi  $P_n^{(\alpha,\beta)}$  son polinomios en el intervalo  $[-1, 1]$  ortogonales respecto al peso  $w(x) = w_{(\alpha,\beta)}(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta$ ,  $\alpha, \beta > -1$  llamado peso de Jacobi. La integrabilidad del peso de Jacobi está garantizada por la condición  $\alpha, \beta > -1$ . Por tanto los polinomios de Jacobi se obtienen de la base canónica de los polinomios  $\{1, x, x^2, \dots\}$  en el intervalo  $[-1, 1]$ . Tienen importantes propiedades diferenciales y son soluciones a ecuaciones diferenciales ordinarias homogéneas de segundo orden.

Los polinomios de Legendre son los polinomios de Jacobi asociados a la función de peso  $w(x) = 1$  y se definen para cualquier orden  $p$  en el intervalo  $[-1, 1]$  según la relación de recurrencia dada por

$$P_0(r) = 1, \quad (2.32)$$

$$P_1(r) = r, \quad (2.33)$$

$$(p+1) P_{p+1}(r) = (2p+1) r P_p(r) - p P_{p-1}(r). \quad (2.34)$$

Una opción para definir los puntos de colocación, o sea los nodos, dentro del elemento sería utilizar las raíces del polinomio de Legendre del mismo orden. Esto presenta la dificultad que los extremos del intervalo no corresponden a ningún punto de colocación, lo que complica la imposición de la continuidad de las funciones entre diferentes subdominios o elementos.

Para solucionar este problema se puede recurrir a la alternativa propuesta por Lobatto, consistente en utilizar como puntos de colocación los extremos, máximos o mínimos, del polinomio de Legendre y los bordes del intervalo. Es decir, los extremos  $r = \pm 1$  en el caso del intervalo natural y las raíces de la derivada del polinomio  $P_p$  de orden  $p$ ,  $dP_p/dr = 0$ .

En un elemento de orden  $p$ , notamos con  $N_{GL} = p + 1$  el número de nodos o puntos de colocación. Las grillas construidas de esta manera son las utilizadas en la regla de integración por cuadratura de *Gauss-Lobatto* y de ésta heredan su denominación. Más adelante se detallan las características de dicha regla de cuadratura.

Esta forma de ubicar los nodos de los elementos espectrales presenta una gran ventaja: los elementos de bajo orden,  $p = 1$  y  $p = 2$ , se corresponden con los clásicos elementos finitos de 2 y 3 nodos. De esta manera, se tiene un método de orden variable adecuado para ser llevado hasta alto orden que contiene como casos particulares elementos ampliamente utilizados. En cuanto a los elementos de alto orden, esta forma de colocar los nodos resulta más económica que la que utiliza nodos espaciados en forma equidistante ([Hourigan et al., 2001](#)).

A partir de esta grilla se construyen las funciones cardinales, que serán las funciones de forma o de prueba en el elemento. Estas funciones deben cumplir la condición de valer 1 en el nodo al cual están asociadas y 0 en los nodos restantes. En el caso de los elementos espectrales, estas funciones pueden definirse en función del polinomio de Legendre del orden correspondiente,

según

$$h_j(r) = \frac{-(1-r^2)}{p(p+1)P_p(r_j)(r-r_j)} \frac{dP_p(r)}{dr}. \quad (2.35)$$

Esta definición resulta poco práctica y, como las funciones de forma son polinomios de Lagrange definidos en los puntos de la grilla de Gauss–Lobatto, resulta más convenientes definirlas como tales, es decir

$$h_j(r) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_{GL}} \frac{r - r_i}{r_j - r_i}, \quad j = 1..N_{GL}. \quad (2.36)$$

De esta manera, las funciones de forma cumplen con la propiedad de las funciones cardinales,  $h_j(r_j) = 1$  para todo  $j$  y  $h_j(r_i) = 0$  para  $j \neq i$ . La combinación de la grilla de Gauss–Lobatto con la utilización de funciones cardinales como funciones de forma asegura la continuidad  $C^0$  de las funciones entre elementos adyacentes (Boyd, 2000). Además, considerando la definición de las funciones de forma como polinomios de Lagrange resulta sencillo definir sus derivadas respecto de la coordenada natural  $r$

$$\frac{\partial h_j}{\partial r}(r) = \sum_{k=1}^{N_{GL}} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_{GL}} \frac{1}{r_j - r_k} \frac{r - r_i}{r_j - r_i}, \quad j = 1..N_{GL}. \quad (2.37)$$

Estas funciones base están relacionadas con las autofunciones de un problema de Sturm–Liouville singular y este vínculo con la expansión en autofunciones es lo que le da el nombre de *método de elementos espectrales* (Henderson, 1999).

Según lo expuesto anteriormente, definido el orden de interpolación en el subdominio, las funciones de forma y sus derivadas se calculan fácilmente según las ecuaciones 2.36 y 2.37 en base a los puntos de colocación que serán los nodos de los elementos. La posición de dichos puntos de colocación puede calcularse a partir de las derivadas del polinomio de Legendre del orden correspondiente utilizando el método de Newton–Raphson con las raíces del polinomio de Chebyshev del mismo orden como valores iniciales. Estas raíces se calculan fácilmente como

$$r_{j+1}^{Cheb} = \cos\left(\frac{\pi j}{p}\right), \quad j = 0..p. \quad (2.38)$$

En la figura 2.2 se muestran la ubicación de los nodos y las funciones de forma correspondientes en distintos elementos unidimensionales.

Este trabajo hace uso de un típico elemento isoparamétrico espectral donde las mismas funciones de forma descriptas anteriormente se utilizan para interpolar las variables y las coordenadas del dominio de análisis dentro de cada elemento. Por lo tanto, para un elemento en un espacio unidimensional cuyas coordenadas nodales son, por ejemplo,  $x^i$  con  $i = 1..N_{GL}$  la

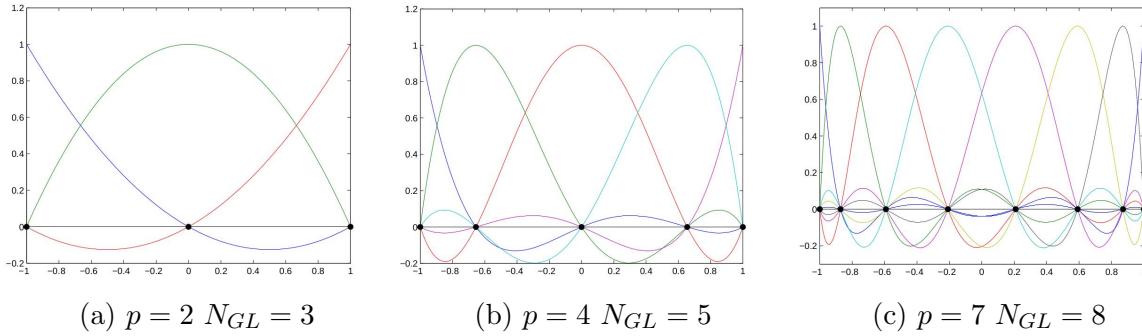


Figura 2.2: Funciones de forma para elementos espectrales unidimensionales de diferentes cantidades de nodos

coordenada se interpolará como

$$x(r) = h_i(r)x^i \quad (2.39)$$

donde los índices repetidos indican sumatoria. De esta forma, el jacobiano necesario para calcular la derivada respecto de la coordenada del problema  $x$  y para plantear las integrales en el elemento maestro será

$$J = \left| \frac{\partial x}{\partial r}(r) \right| = \left| \frac{\partial h_i}{\partial r}(r) x^i \right|. \quad (2.40)$$

En el caso de un elemento unidimensional ubicado en un espacio bi o tridimensional habrá que interpolar todas las coordenadas del problema según

$$x(r) = h_i(r)x^i, \quad (2.41)$$

$$y(r) = h_i(r)y^i, \quad (2.42)$$

$$z(r) = h_i(r)z^i. \quad (2.43)$$

En este caso, el jacobiano necesario para obtener las derivadas y cambiar los dominios de integración será

$$J = \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r}(r) \right\|_2 = \left\| \frac{\partial h_i}{\partial r}(r) \mathbf{x}^i \right\|_2, \quad (2.44)$$

donde  $\mathbf{x}$  indica la posición de los puntos del elemento,  $\mathbf{x}^i$  es la posición del nodo  $i$  y  $\|\cdot\|_2$  es la norma vectorial.

## Integración Numérica

Las integrales involucradas se evalúan por medio de la cuadratura denominada de Gauss–Lobatto o Gauss-Legendre-Lobatto por los diferentes autores. Esta regla de integración utiliza como puntos de evaluación de los integrandos los mismos puntos de colocación descriptos anteriormente para las funciones de forma, es decir los nodos de los elementos.

Debido a la restricción de que los extremos del intervalo deben corresponder a puntos de colocación esta regla de integración es 2 órdenes menos precisa que la regla de integración clásica de Gauss o Gauss–Legendre. La cuadratura de Gauss de  $N$  puntos integra exactamente polinomios de orden menor o igual a  $2N + 1$ , mientras que la cuadratura de Gauss–Lobatto integra exactamente polinomios de orden menor o igual a  $2N - 1$ .

De esta forma, la cuadratura de Gauss–Lobatto no es la regla de integración exacta de acuerdo al orden de los elementos. A pesar de esto, su utilización resulta particularmente económica computacionalmente ya que sólo un número limitado de nodos contribuyen a la ecuación correspondiente a un nodo determinado, debido a que los puntos de integración coinciden con los nodos del elemento. Por ejemplo, las típicas matrices de masa resultan diagonales.

La cuadratura de Gauss–Lobatto se ha utilizado desde hace varios años mostrando muy buenos resultados (ver, entre otros, [Thompson et al. \(1996, 2001\)](#); [Hourigan et al. \(2001\)](#); [Sheard et al. \(2004\)](#)). Experiencias llevadas a cabo por [Giraldo \(1998\)](#) indicaron que para polinomios de órdenes  $p \geq 3$ , los resultados no mostraron diferencias entre la integración con la regla de Gauss–Lobatto y la integración exacta con la cuadratura de Gauss–Legendre clásica. En [Otero y Ponta \(2006\)](#) se ha realizado comparaciones equivalentes verificando estos resultados; por lo tanto, utilizamos la cuadratura de Gauss–Legendre para elementos de  $N_{GL} \leq 3$  nodos y la cuadratura de Gauss–Legendre–Lobatto para elementos de  $N_{GL} \geq 4$  nodos. La ventaja de este método es que las funciones de forma de cualquier orden pueden generarse automáticamente junto con sus derivadas y la correspondiente regla de integración.

Los coeficientes de integración se calculan según

$$w_j = \frac{2}{p(p+1) \left[ P_p(r_j) \right]^2}, \quad (2.45)$$

donde  $w_j$  es el peso correspondiente al punto de integración ubicado en  $r_j$ .

### 2.2.2. Elementos espectrales en 3 dimensiones

La extensión de los elementos espectrales es directa para elementos cuadrilaterales en 2 dimensiones y hexaédricos en 3 dimensiones. Si utilizamos como coordenadas del elemento natural a  $(r, s, t)$  en 3 dimensiones, las funciones de forma asociadas a los nodos se forman como un producto tensorial de las funciones unidimensionales. Esto además permite crear elementos con funciones de forma de diferentes órdenes en las distintas dimensiones en el caso que la aplicación lo requiera. A modo de ejemplo, se consideran elementos de igual orden de interpolación en todas las dimensiones, i.e.  $N_{GL} \times N_{GL} \times N_{GL}$  nodos. Las funciones de forma se construyen

en base a las funciones de forma  $h_i(r)$  unidimensionales ya descriptas según

$$h_{ijk}(r, s, t) = h_i(r) h_j(s) h_k(t), \quad (2.46)$$

donde en este caso  $i, j, k = 1..N_{GL}$ ,  $h_{ijk}(r, s, t)$  es la función de forma del elemento tridimensional correspondiente al nodo  $i$  en la dirección de la coordenada  $r$ ,  $j$  en la dirección de  $s$  y  $k$  en la dirección de  $t$ .

En la práctica, los nodos de los elementos tridimensionales se numeran consecutivamente y no a través de la terna  $(i, j, k)$ . Una vez definida la secuencia de numeración de los nodos en el elemento maestro, se asignan las funciones correspondientes a cada nodo.

En este trabajo se utiliza una secuencia de numeración brindada por DMPLEX. Por ejemplo, en un elemento de 3 dimensiones, los nodos interiores se numeran primero. Luego se numeran los nodos ubicados en las esquinas. Posteriormente los nodos ubicados en las caras, y por último los nodos sobre las aristas. En la figura 2.3 se muestra un elemento de orden  $p = 2$ , es decir  $3 \times 3 \times 3 = 27$  nodos y un elemento de orden  $p = 3$ , es decir  $4 \times 4 \times 4 = 64$  nodos con la numeración adoptada para los mismos.

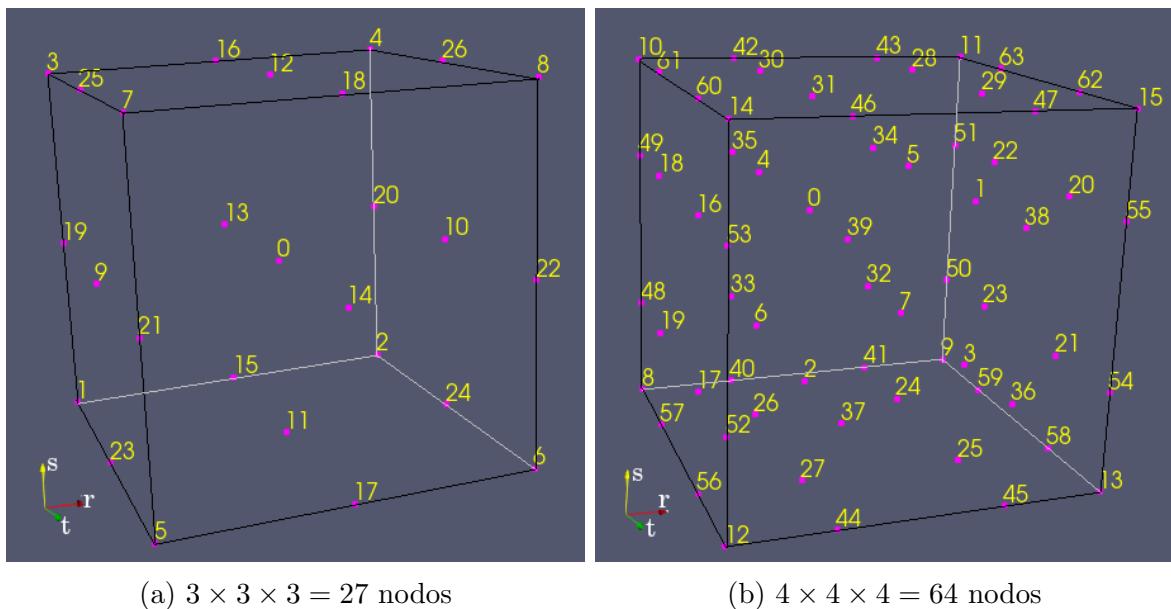


Figura 2.3: Elementos espectrales mostrando la numeración de los nodos utilizada.

Como se mencionó anteriormente, por tratarse de elementos isoparamétricos, las coordenadas del problema se interpolan dentro de cada elemento de la misma manera que se interpolan las variables. Esto permite que se puedan representar con gran exactitud los contornos curvos de los dominios de análisis. En el caso de un elemento tridimensional, como el utilizado en la implementación del método KLE del capítulo 3, habrá que interpolar las coordenadas del problema según:

$$x(r, s, t) = h_i(r, s, t) x^i, \quad (2.47)$$

$$y(r, s, t) = h_i(r, s, t) y^i, \quad (2.48)$$

$$z(r, s, t) = h_i(r, s, t) z^i, \quad (2.49)$$

donde  $i = 1..N_{GL}^3$ .

Con dichas coordenadas interpoladas, ahora será posible obtener la matriz jacobiana utilizada en la regla de la cadena necesaria para calcular las derivadas de las variables respecto de las coordenadas del problema. Esta matriz jacobiana se calcula en dominios tridimensionales como:

$$\mathbf{J}(r, s, t) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r}(r, s, t) & \frac{\partial y}{\partial r}(r, s, t) & \frac{\partial z}{\partial r}(r, s, t) \\ \frac{\partial x}{\partial s}(r, s, t) & \frac{\partial y}{\partial s}(r, s, t) & \frac{\partial z}{\partial s}(r, s, t) \\ \frac{\partial x}{\partial t}(r, s, t) & \frac{\partial y}{\partial t}(r, s, t) & \frac{\partial z}{\partial t}(r, s, t) \end{bmatrix} \quad (2.50)$$

$$\mathbf{J}(r, s, t) = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_i}{\partial r}(r, s, t) x^i & \frac{\partial h_i}{\partial r}(r, s, t) y^i & \frac{\partial h_i}{\partial r}(r, s, t) z^i \\ \frac{\partial h_i}{\partial s}(r, s, t) x^i & \frac{\partial h_i}{\partial s}(r, s, t) y^i & \frac{\partial h_i}{\partial s}(r, s, t) z^i \\ \frac{\partial h_i}{\partial t}(r, s, t) x^i & \frac{\partial h_i}{\partial t}(r, s, t) y^i & \frac{\partial h_i}{\partial t}(r, s, t) z^i \end{bmatrix} \quad (2.51)$$

donde  $i = 1..(N_{GL})^3$ .

El jacobiano utilizado para plantear las integrales en el elemento maestro será

$$J = |\det(\mathbf{J})|. \quad (2.52)$$

Los elementos espectrales tridimensionales de bajo orden,  $p = 1$  y  $p = 2$ , de la misma manera que sucede en los elementos bidimensionales y unidimensionales, corresponden a los elementos finitos clásicos de 8 y de 27 nodos en el caso tridimensional, y de 4 y 9 nodos en el caso bidimensional.

## Integración Numérica

En el caso de los elementos de más de una dimensión, las reglas de cuadratura de Gauss–Legendre–Lobatto se construyen de manera equivalente a la definición de las funciones de forma a partir de los coeficientes de integración de la respectiva regla unidimensional. Los coeficientes serán

$$w_{ijk} = w_i w_j w_k, \quad (2.53)$$

donde  $i, j, k = 1..N_{GL}$ ,  $w_{ijk}$  es el peso asociado al nodo  $i$  en la dirección de la coordenada

$r$ ,  $j$  en la dirección de  $s$  y  $k$  en la dirección de  $t$ . Estos pesos se asocian a los nodos numerados consecutivamente, según se detalló en la sección anterior.

En este apartado se ha presentado el caso donde el número de nodos en todas las direcciones es igual; en el caso de elementos con interpolaciones de órdenes diferentes en las distintas direcciones el procedimiento es análogo con las modificaciones del caso. La exposición en este capítulo se basó en los trabajos de [Becker et al. \(1981\)](#) y [Burden y Faires \(1998\)](#), y en [Otero \(2008\)](#) para la sección de elementos espectrales.

# Capítulo 3

## Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática (KLE)

### 3.1. Introducción

A la hora de describir el movimiento de un fluido existen dos puntos de vista. Una primera forma de hacerlo es seguir a cada partícula fluida en su movimiento, de manera que se buscarán funciones que calculen la posición, así como las propiedades de la partícula fluida en cada instante. A esta descripción se la llama *descripción Lagrangeana*. Una segunda forma es asignar a cada punto del espacio y en cada instante un valor para las propiedades o magnitudes del fluido sin importar la partícula fluida que en dicho instante ocupa ese punto. A esta descripción se la llama *Eulereana*, y no está ligada a las partículas fluidas sino a los puntos del espacio ocupados por el fluido. En esta descripción el valor de una propiedad en un punto y en un instante determinado es el de la partícula fluida que ocupa dicho punto en ese instante.

La descripción Eulereana es la usada comúnmente, puesto que en la mayoría de casos y aplicaciones resulta más útil debido a las grandes deformaciones sufridas por el fluido. Aquí la derivada ordinaria  $\frac{\partial \phi}{\partial t}$  ya no representa toda la variación por unidad de tiempo de una determinada propiedad del fluido  $\phi$  siguiendo a la partícula fluida. La diferencia se debe al movimiento del fluido. Para reflejar esta variación se utiliza la derivada sustancial (o derivada siguiendo a la partícula fluida). La derivada sustancial o derivada material se define como el operador:

$$\frac{D}{Dt}(\star) \equiv \frac{\partial(\star)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla(\star). \quad (3.1)$$

Para la descripción de fluidos en movimiento en general se utilizan las denominadas ecuaciones de Navier–Stokes ([Batchelor, 2000](#)). Estas ecuaciones en derivadas parciales no lineales surgen de aplicar principios de conservación de la mecánica y la termodinámica a un volumen infinitesimal de fluido. La formulación clásica de dichas ecuaciones utiliza como variables el

campo vectorial de la velocidad y el campo escalar de la presión.

La ecuación de Navier–Stokes puede ser derivada a partir de la forma convectiva de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento de Cauchy.

Partiendo de la forma convectiva de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento de Cauchy, se obtiene:

$$\frac{D(\mathbf{v})}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{g}, \quad (3.2)$$

donde  $\frac{D}{Dt}$  es la derivada material definida en la ecuación 3.1,  $\rho$  es la densidad,  $\nabla \cdot$  la divergencia,  $\boldsymbol{\sigma}$  el tensor de tensiones de Cauchy y  $\mathbf{g}$  representa las aceleraciones que actúan sobre el cuerpo, por ejemplo la gravedad.

Se multiplica por la densidad de ambos lados de la ecuación:

$$\rho \frac{D(\mathbf{v})}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}. \quad (3.3)$$

En el caso de un medio fluido, el tensor de tensiones  $\boldsymbol{\sigma}$  está compuesto por una parte desviadora  $\boldsymbol{\tau}$ , su término viscoso y una parte volumétrica  $-p\mathbf{I}$ , su término de presión:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}. \quad (3.4)$$

donde  $\boldsymbol{\tau}$  es el tensor desviador de tensiones,  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad y  $p$  la presión. Entonces, reemplazando esta última expresión y aplicando la identidad tensorial  $\nabla \cdot (p\mathbf{I}) = \nabla p$ , se puede expresar la ecuación 3.3 como:

$$\rho \frac{D(\mathbf{v})}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g}. \quad (3.5)$$

Seguidamente, se aplica la derivada sustancial o derivada material descripta en la ecuación 3.1:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{v}) \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (3.6)$$

Llegando en la ecuación 3.6: la forma convectiva clásica de las ecuaciones de Navier–Stokes. Dicha formulación es la utilizada en las implementaciones anteriores del Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática que se presenta en la sección 3.1 (Ponta y Aref, 2005; Otero, 2008; Burzstyn et al., 2008).

En este trabajo se utilizará la formulación conservativa de las ecuaciones de Navier–Stokes por lo que seguiremos el desarrollo hacia ella. Por la identidad de la divergencia del producto tensorial de dos vectores es sabido que:

$$\nabla \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \mathbf{v} + (\rho \mathbf{v}) \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (3.7)$$

donde  $\otimes$  es el producto tensorial definido por:

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u}\mathbf{v}^T \quad (3.8)$$

Invocando la conservación de la masa, i.e. la ecuación de la continuidad,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (3.9)$$

se puede reemplazar la expresión de la divergencia  $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$  en el primer término del lado derecho de la ecuación 3.7 obteniendo:

$$\nabla \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} + (\rho \mathbf{v}) \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (3.10)$$

Considerando la derivada del producto  $\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \rho$ , se puede despejar  $-\frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v}$  como:

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} \mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \rho - \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t}. \quad (3.11)$$

Reemplazando entonces en la ecuación 3.10 se llega a la expresión:

$$\nabla \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}. \quad (3.12)$$

Redistribuyendo queda finalmente:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = \rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right). \quad (3.13)$$

Reemplazando el lado izquierdo de la ecuación 3.6, de la forma convectiva clásica de las ecuaciones de Navier–Stokes, a la que se llega por la conservación de la cantidad de movimiento de Cauchy, de acuerdo a 3.13, identidad de la divergencia del producto tensorial de dos vectores (densidad y velocidad), se obtiene la forma conservativa de las ecuaciones de Navier–Stokes:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (3.14)$$

## 3.2. Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática

En el trabajo de Ponta (2005) se presentó un nuevo método basado en la formulación vorticidad-velocidad ( $\omega, \mathbf{v}$ ) que mejoró distintos aspectos respecto de las primeras implementaciones de esta formulación, como la reducción de la cantidad de incógnitas. El método de la Ecuación Laplaciana Cinemática (*Kinematic Laplacian Equation* - KLE) se caracteriza por un completo desacoplamiento de las dos variables, vorticidad en tiempo–velocidad en espacio.

De esta forma, se reducía a tres el número de variables a resolver en el proceso de integración temporal en 2 dimensiones. Además, esta descomposición del problema permite la utilización de algoritmos de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) de orden variable y paso temporal adaptativo, que mejoran la eficiencia y robustez del proceso de integración.

El método KLE se compone de dos partes. En primer lugar, la denominada Ecuación Laplaciana Cinemática, que es una versión modificada de la ecuación de Poisson para la velocidad, encargada de resolver la parte cinemática del problema. En segundo lugar, el algoritmo de integración de las ecuaciones de la dinámica del problema Navier–Stokes en vorticidad, es decir, la ecuación de transporte de vorticidad, que se resuelve como una ecuación diferencial ordinaria en cada nodo de la discretización. Ambas partes se realimentan mutuamente y en conjunto reciben la denominación de método KLE.

En la presente tesis se seguirá esta línea de trabajo implementando la versión tridimensional de este método, por lo que se desarrollarán sus detalles.

### 3.3. Solución espacial de la velocidad

La Ecuación Laplaciana Cinemática se obtiene a partir de aplicar al campo de las velocidades la identidad vectorial:

$$\nabla^2 \mathbf{v} = \nabla \cdot \nabla \mathbf{v} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}). \quad (3.15)$$

Considerando conocidas las distribuciones del campo de vorticidades  $\boldsymbol{\omega}$  y de la tasa de expansión  $\mathcal{D}$ , la identidad de la ecuación 3.15 se transforma en:

$$\nabla^2 \mathbf{v} = \nabla \mathcal{D} - \nabla \times \boldsymbol{\omega}, \quad (3.16)$$

donde:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \mathcal{D}, \quad (3.17)$$

$$\nabla \times \mathbf{v} = \boldsymbol{\omega}. \quad (3.18)$$

De esta forma, la solución de la Ecuación Laplaciana Cinemática será la solución de la ecuación 3.16 imponiendo las restricciones de las ecuaciones 3.17 y 3.18 con condiciones de contorno compatibles con las distribuciones de vorticidad y tasa de expansión.

Teniendo en cuenta los conceptos de campo vectorial *irrotacional*, i.e.  $\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}$  y campo vectorial *solenoidal*, i.e.  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  se puede considerar la descomposición ortogonal del campo de velocidades para entender el funcionamiento de la Ecuación Laplaciana Cinemática. El campo

de velocidades se puede descomponer en 3 componentes ortogonales: la componente irrotacional no solenoidal  $\mathbf{v}_D$ , la componente solenoidal no irrotacional  $\mathbf{v}_\omega$  y la componente irrotacional y solenoidal, i.e. armónica  $\mathbf{v}_h$ .

Bajo condiciones de contorno impuestas para la componente normal de la velocidad, y dadas las distribuciones de vorticidad  $\boldsymbol{\omega}$  y tasa de expansión  $\mathcal{D}$ , esta descomposición  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_D + \mathbf{v}_\omega + \mathbf{v}_h$  queda unívocamente determinada (ver la sección 2.7 de [Batchelor, 2000](#)). Las restricciones de las ecuaciones [3.17](#) y [3.18](#) aseguran que  $\mathbf{v}_D$  y  $\mathbf{v}_\omega$  se resuelven correctamente.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{v}_D = \mathcal{D}, \quad (3.19)$$

$$\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times \mathbf{v}_\omega = \boldsymbol{\omega}. \quad (3.20)$$

Aplicando la descomposición ortogonal a la velocidad total  $\mathbf{v}$  en la ecuación [3.16](#) resulta:

$$\begin{aligned} \nabla^2(\mathbf{v}_h + \mathbf{v}_D + \mathbf{v}_\omega) &= \nabla^2 \mathbf{v}_h + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}_D) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}_\omega) \\ &= \nabla \mathcal{D} - \nabla \times \boldsymbol{\omega}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

y reemplazando las ecuaciones [3.19](#) y [3.20](#) en la ecuación [3.21](#) se obtiene:

$$\nabla^2 \mathbf{v}_h = 0, \quad (3.22)$$

que da la solución de la componente armónica  $\mathbf{v}_h$ . Es decir, la restricción de la ecuación [3.17](#) define la componente  $\mathbf{v}_D$ , mientras que la restricción de la ecuación [3.18](#) define la componente  $\mathbf{v}_\omega$ .

La imposición de las correspondientes distribuciones de vorticidad y tasa de deformación son necesarias para obtener una solución única del campo de velocidades completo. Dadas estas dos componentes, la componente restante, que es solenoidal e irrotacional, queda unívocamente definida por las condiciones de contorno prescriptas. Esto muestra que la Ecuación Laplaciana Cinemática asegura la correcta resolución de las tres componentes del campo de velocidades.

El problema espacial lineal definido en las ecuaciones [3.16](#) a [3.18](#), es decir la Ecuación Laplaciana Cinemática, puede implementarse en forma débil a partir de una formulación variacional. Debido a que la formulación variacional del operador laplaciano resulta una forma bilineal simétrica y coerciva se puede encontrar un funcional asociado ([Otero, 2008](#)). La minimización de dicho funcional deviene en una formulación equivalente a la obtenida de aplicar el método de Galerkin estándar a la ecuación [3.16](#), integrando por partes y considerando las condiciones de contorno ([Ponta, 2005](#)). El funcional asociado a la ecuación [3.16](#) en el caso de

flujo tridimensional incompresible, i.e.  $\mathcal{D} = 0$ , es

$$\Phi = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} : \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\Omega} (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{v} \, d\Omega. \quad (3.23)$$

Lo que se detalla a continuación es la imposición de las restricciones de las ecuaciones 3.17 y 3.18. Para la imposición de estas restricciones se modifica el funcional asociado utilizando el método de penalización, que consiste en multiplicar a los términos por constantes llamadas “constantes de penalización”. Este método tiene la ventaja de mantener la definición positiva de la forma bilineal, permitiendo la solución del problema en forma directa en un paso, entre otras, y ha demostrado ser efectivo en las implementaciones previas del método KLE. Para otras posibles formas de imponer las restricciones ver [Ponta \(2005\)](#).

Entonces, se modifica el funcional asociado de la ecuación 3.23 agregando los términos de penalización correspondientes a las restricciones de las ecuaciones 3.17 y 3.18, resultando:

$$\tilde{\Phi} = \Phi + \int_{\Omega} \frac{\alpha_{\mathcal{D}}}{2} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v})^2 + \frac{\alpha_{\omega}}{2} (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v} - \boldsymbol{\omega}) \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v} - \boldsymbol{\omega}) \, d\Omega, \quad (3.24)$$

donde  $\alpha_{\mathcal{D}}$  y  $\alpha_{\omega}$  son las constantes de penalización correspondientes a las restricciones de las ecuaciones 3.17 y 3.18. En esta implementación se utilizaron los mismos valores de dichas constantes,  $\alpha_{\mathcal{D}} = 10^3$  y  $\alpha_{\omega} = 10^2$ , utilizados por [Ponta \(2005\)](#) y [Otero y Ponta \(2006\)](#).

Exigiendo la estacionaridad del funcional  $\tilde{\Phi}$  respecto de la velocidad  $\mathbf{v}$ ,

$$\delta \tilde{\Phi} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v} : \boldsymbol{\nabla} \delta \mathbf{v} - (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\omega}) \cdot \delta \mathbf{v} + \alpha_{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}) (\boldsymbol{\nabla} \cdot \delta \mathbf{v}) + \alpha_{\omega} (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v} - \boldsymbol{\omega}) \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \delta \mathbf{v}) \, d\Omega = 0. \quad (3.25)$$

Finalmente, reordenando los términos se llega a

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v} : \boldsymbol{\nabla} \delta \mathbf{v} + \alpha_{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}) (\boldsymbol{\nabla} \cdot \delta \mathbf{v}) + \alpha_{\omega} (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v}) \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \delta \mathbf{v}) \, d\Omega = \\ \int_{\Omega} (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\omega}) \cdot \delta \mathbf{v} + \alpha_{\omega} \boldsymbol{\omega} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \delta \mathbf{v}) \, d\Omega, \end{aligned} \quad (3.26)$$

que resulta la expresión de la formulación variacional correspondiente al sistema de las ecuaciones 3.16 a 3.18, es decir de la Ecuación Laplaciana Cinemática (KLE), para flujo incompresible, donde  $\mathbf{v}$  es el campo de velocidades,  $\boldsymbol{\omega}$  es la distribución del campo de vorticidades y  $\alpha_{\mathcal{D}}$  y  $\alpha_{\omega}$  son las constantes de penalización correspondientes a las restricciones  $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} = \mathcal{D}$  y  $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v} = \boldsymbol{\omega}$ , siendo  $\mathcal{D}$  la tasa de expansión.

### 3.4. Evolución temporal del flujo

Para realizar la integración temporal, se desarrolla la ecuación de transporte de vorticidad a partir de las ecuaciones de Navier–Stokes.

Dada la ecuación de Navier–Stokes en su forma conservativa 3.14:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g}$$

despejando la derivada en función del tiempo, se llega a:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \nabla p + \rho \mathbf{g}. \quad (3.27)$$

Aplicando el rotor de ambos lados y siendo  $\nabla \times (\nabla p) = 0$  por identidad tensorial de  $\nabla$ , se obtiene:

$$\frac{\partial(\nabla \times (\rho \mathbf{v}))}{\partial t} = \nabla \times (\nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - (\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v})) + \nabla \times (\rho \mathbf{g}). \quad (3.28)$$

Llamando entonces  $\boldsymbol{\omega}_\rho$  a  $\nabla \times (\rho \mathbf{v})$ , siendo :

$$\boldsymbol{\omega}_\rho = \begin{cases} \rho \boldsymbol{\omega} & \rho = \text{cte.}, \\ \nabla \times (\rho \mathbf{v}) & \rho \neq \text{cte.}, \end{cases} \quad (3.29)$$

queda definido:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}_\rho}{\partial t} = \nabla \times (\nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v})) + \nabla \times (\rho \mathbf{g}). \quad (3.30)$$

Para flujos incompresibles se puede definir al tensor desviador de tensiones  $\boldsymbol{\tau}$  en función del tensor tasa de deformación, según:

$$\boldsymbol{\tau} = 2 \mu \boldsymbol{\xi}, \quad (3.31)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica y  $\boldsymbol{\xi}$  el tensor tasa de deformación.

Se puede ver también que, dada la incompresibilidad,  $\rho = \text{cte.}$ , el término  $\nabla \times (\mathbf{g} \rho) = 0$  y por lo tanto la ecuación 3.30 para flujos incompresibles resultará finalmente:

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} = \nabla \times \nabla \cdot (2 \mu \boldsymbol{\xi} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}). \quad (3.32)$$

El tensor de tasa de deformación se define en función de las velocidades como la parte desviadora de su gradiente:

$$\boldsymbol{\xi} = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right). \quad (3.33)$$

De esta forma, el método KLE utiliza la formulación variacional 3.26 de la Ecuación Laplaciana Cinemática como contraparte de la ecuación de transporte de la vorticidad 3.30 en

una formulación híbrida *vorticidad–velocidad* para aproximar la solución de las ecuaciones de Navier–Stokes. La integración en el tiempo de la ecuación de transporte de vorticidad produce la distribución de vorticidad  $\omega$  en el dominio  $\Omega$ .

Las ecuaciones 3.32 y 3.33 definen la evolución temporal de la vorticidad en función de la velocidad. En el capítulo 4 se desarrollará la discretización tanto de la ecuación KLE 3.26, como de la ecuación de evolución temporal de la vorticidad 3.32.

## Condiciones iniciales y de borde

En el caso que en determinado instante se conoce el campo de velocidades  $\mathbf{v}$  en todo el dominio  $\Omega$  (a las que llamaremos condiciones iniciales), se conoce la derivada temporal de la vorticidad  $\omega$  en ese instante en cada punto de discretización en el dominio  $\Omega$  y se puede obtener  $\omega$  en un instante posterior integrando la ecuación 3.32 mediante un algoritmo de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias, *ODE solver* por sus siglas en inglés. De esta forma, el método KLE utiliza la formulación variacional de la Ecuación Laplaciana Cinemática 3.26 como contraparte de la ecuación de transporte de la vorticidad 3.32 en una formulación híbrida vorticidad–velocidad para aproximar la solución de las ecuaciones de Navier–Stokes. La integración en el tiempo de la ecuación de transporte de vorticidad produce la distribución de vorticidad  $\omega$  en el dominio  $\Omega$ .

Como se vió en la sección 3.3, será necesario imponer condiciones de contorno para poder resolver el problema. Existen dos tipos de ellas, las condiciones free-slip, i.e. de libre deslizamiento, y las condiciones no-slip, i.e. de no deslizamiento, como lo son las superficies sólidas. Cuando estamos en presencia sólo de las primeras (condiciones de borde free-slip), el problema se resolverá tal como se mencionó en las secciones anteriores, y como se detalla la implementación en la sección 4.3 en la figura 4.4. En cambio, las últimas (no-slip) presentan una complejidad más por lo que requieren un abordaje especial. Existiendo una forma de imponer al campo de velocidades la condición de flujo normal nulo

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (3.34)$$

y no deslizamiento

$$\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0, \quad (3.35)$$

en las superficies sólidas  $\partial\Omega$  de forma compatible con la distribución de la vorticidad en un determinado instante de tiempo, se obtiene una solución compatible de la velocidad a través de la Ecuación Laplaciana Cinemática. Donde  $\mathbf{n}$  es el tensor normal a la superficie, y  $\boldsymbol{\tau}$  el tensor correspondiente a las direcciones tangenciales. A partir de dicho campo de velocidades se puede calcular el lado derecho de la ecuación 3.32.

Para imponer las condiciones de contorno de flujo normal y deslizamiento nulos sobre  $\partial\Omega$  junto con las condiciones de contorno compatibles correspondientes en la vorticidad en el método se utiliza una secuencia algorítmica basada en dos soluciones consecutivas de la Ecuación Laplaciana Cinemática: la primera con condiciones de libre deslizamiento y la segunda con condiciones de no deslizamiento en las superficies sólidas. Esta secuencia viene dada de la siguiente manera:

- (i) dado un campo de velocidades compatible con la distribución de vorticidad de un paso de tiempo anterior  $\mathbf{v}^{n-1}$ , calcular una distribución de vorticidad para el paso actual  $\boldsymbol{\omega}^n$  integrando la ecuación 3.32 mediante un algoritmo de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias;
- (ii) obtener una distribución de vorticidad compatible con la condición de libre deslizamiento en la superficie sólida  $\boldsymbol{\omega}_0^n$  imponiendo condiciones homogéneas en  $\partial\Omega$  sobre  $\boldsymbol{\omega}^n$  (i.e. imponer  $\boldsymbol{\omega}^n$  nula sobre  $\partial\Omega$ );
- (iii) resolver la KLE con condiciones de libre deslizamiento en la superficie sólida; la solución obtenida  $\tilde{\mathbf{v}}^n$  se denomina campo de velocidad *free-slip*; es decir, se resuelven las ecuaciones 3.16 a 3.18 con  $\mathcal{D} = 0$  y  $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_0^n$  imponiendo sólo la condición de flujo normal nulo,  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ , sobre  $\partial\Omega$ ;
- (iv) calcular una nueva distribución de vorticidad,  $\tilde{\boldsymbol{\omega}}^n$ , tomando el rotor de  $\tilde{\mathbf{v}}^n$ , a la que se le ha impuesto la condición de no deslizamiento sobre  $\partial\Omega$  (de esta forma se obtiene una distribución de vorticidad en respuesta al deslizamiento inducido);
- (v) resolver la KLE con condiciones de flujo normal y deslizamiento nulas obteniendo un nuevo campo de velocidad  $\mathbf{v}^n$  compatible con la distribución de vorticidad, es decir, se resuelven las ecuaciones 3.16 a 3.18 con  $\mathcal{D} = 0$  y  $\boldsymbol{\omega} = \tilde{\boldsymbol{\omega}}^n$  imponiendo ambas condiciones de contorno,  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$  y  $\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0$ .

En los pasos (iii) y (v) de la secuencia se aplican las condiciones de contorno tipo Dirichlet dependientes del tiempo en  $\partial\Omega_\infty$ , el contorno *externo* de  $\Omega$ , asumiendo que dicho contorno se encuentra lo suficientemente alejado para imponer condiciones de flujo imperturbado. Esta secuencia algorítmica es repetida sucesivamente dentro de un proceso de integración temporal comandado por un algoritmo de integración de ecuaciones diferenciales ordinarias con adaptación del paso de tiempo. La solución es verificada por el mecanismo de adaptación del paso de tiempo controlando el error de truncamiento local.

En otras formulaciones híbridas, la ecuación tipo Poisson 3.16 se resuelve simultáneamente con la ecuación de transporte de vorticidad, imponiendo la condición de incompresibilidad. En el método KLE se busca desacoplar las soluciones de la vorticidad y la velocidad y por lo tanto

se hace necesario imponer una segunda restricción para la distribución de la vorticidad. De esta forma, el método KLE a través de la secuencia algorítmica definida por los pasos (i)–(v) produce un desacoplamiento completo entre la integración de la vorticidad en el tiempo y la solución espacial de la ecuación de Poisson para la velocidad definida en la formulación variacional de la KLE, ecuación 3.26. En la sección 4.3 se va a detallar la implementación computacional de estos desarrollos, y en la figura 4.5 en particular se muestra la secuencia de la implementación de los pasos desarrollados anteriormente.

# Capítulo 4

## Implementación Tridimensional del Método KLE

La formulación del Método KLE es esencialmente tridimensional, pero las implementaciones anteriores fueron todas bidimensionales. A continuación se describe la implementación 3D en base a los elementos espectrales realizada en este trabajo. Se desarrollará la discretización tanto de la parte espacial como de la temporal, en base a la ecuación 3.26 y las ecuaciones 3.32 y 3.33, respectivamente, por medio del método de elementos espectrales desarrollado en el capítulo 2.

Este método es una implementación particular de la versión  $p$  del método de elementos finitos donde los nodos de los elementos se ubican en los puntos de una grilla de Gauss–Lobatto (Patera, 1984) como se desarrolló en dicho capítulo. Una vez ubicados los nodos del elemento maestro según lo descripto en la figura 2.3, se construyen las funciones de interpolación como los polinomios de Lagrange asociados a esos nodos. A partir de esto se calculan sus derivadas respecto de las coordenadas naturales.

### 4.1. Discretización de la solución espacial

Para la discretización del Método de la Ecuación Laplaciana Cinemática, dado un dominio tridimensional, las componentes del vector velocidad y el arreglo de las componentes de su gradiente expresadas en un sistema de coordenadas ortogonales  $(x, y, z)$  se interpolan dentro de cada elementopectral de orden  $p$ , donde el número de nodos por elemento es  $N_{GL}^3$  con  $N_{GL} = p + 1$ , según:

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= \begin{bmatrix} v_x & v_y & v_z \end{bmatrix}^T = \mathbf{H}^e \hat{\mathbf{V}}^e, \\ \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial x} & \frac{\partial v_x}{\partial y} & \frac{\partial v_x}{\partial z} & \frac{\partial v_y}{\partial x} & \frac{\partial v_y}{\partial y} & \frac{\partial v_y}{\partial z} & \frac{\partial v_z}{\partial x} & \frac{\partial v_z}{\partial y} & \frac{\partial v_z}{\partial z} \end{bmatrix}^T = \mathbf{B}^e \hat{\mathbf{V}}^e.\end{aligned}\quad (4.1)$$

En las ecuaciones anteriores,  $\hat{\mathbf{V}}^e$  es el arreglo de los valores nodales de las componentes del vector de velocidad,  $\mathbf{H}^e$  es el arreglo de las funciones de interpolación dentro del elemento y  $\mathbf{B}^e$  es el arreglo de las derivadas de las funciones de interpolación respecto de las coordenadas del problemas dados por:

$$\hat{\mathbf{V}}^e = \left[ \hat{v}_x^1 \quad \hat{v}_y^1 \quad \hat{v}_z^1 \quad \hat{v}_x^2 \quad \hat{v}_y^2 \quad \hat{v}_z^2 \quad \dots \quad \hat{v}_x^{N_{GL}^3} \quad \hat{v}_y^{N_{GL}^3} \quad \hat{v}_z^{N_{GL}^3} \right]^T, \quad (4.2)$$

$$\mathbf{H}^e = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & 0 & \dots & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & \dots & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 \\ 0 & 0 & h_1 & 0 & 0 & h_2 & \dots & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{B}^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & 0 & 0 \\ \frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial y} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & 0 & 0 \\ \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial z} & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial z} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial x} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial y} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} \\ 0 & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & 0 & \frac{\partial h_2}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (4.4)$$

Las derivadas parciales de las funciones de forma respecto de las coordenadas  $(x, y, z)$  del problema se calculan utilizando la matriz jacobiana  $\mathbf{J}$  detallada en la sección 2.2.2, según:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial h_k}{\partial x} \\ \frac{\partial h_k}{\partial y} \\ \frac{\partial h_k}{\partial z} \end{bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial h_k}{\partial r} \\ \frac{\partial h_k}{\partial s} \\ \frac{\partial h_k}{\partial t} \end{bmatrix}, \quad \text{con } k = 1 \dots N_{GL}^3. \quad (4.5)$$

En este caso, la divergencia del campo de velocidad puede calcularse a partir de las componentes del gradiente como:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{m} \mathbf{B}^e \hat{\mathbf{V}}^e, \quad \text{donde } \mathbf{m} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

Se puede definir entonces una matriz:

$$\mathbf{B}_{div}^e = \mathbf{m} \mathbf{B}^e, \quad \text{de forma que} \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{B}_{div}^e \hat{\mathbf{V}}^e \quad (4.7)$$

siendo:

$$\mathbf{B}_{div}^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial z} & \frac{\partial h_2}{\partial x} & \frac{\partial h_2}{\partial y} & \frac{\partial h_2}{\partial z} & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial x}^3 & \frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial y}^3 & \frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial z}^3 \end{bmatrix}. \quad (4.8)$$

El rotor de la velocidad puede calcularse a partir de las componentes del gradiente como:

$$\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{r} \mathbf{B}^e \hat{\mathbf{V}}^e, \quad \text{donde } \mathbf{r} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Se puede definir entonces una matriz:

$$\mathbf{B}_{curl}^e = \mathbf{r} \mathbf{B}^e, \quad \text{de forma que} \quad \nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{B}_{curl}^e \hat{\mathbf{V}}^e \quad (4.10)$$

donde:

$$\mathbf{B}_{curl}^e = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\partial h_1}{\partial z} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & \dots & 0 & -\frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial z}^3 & \frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial y}^3 \\ \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial h_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial z}^3 & 0 & -\frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial x}^3 \\ -\frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & \dots & -\frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial y}^3 & \frac{\partial h_{N_{GL}}}{\partial x}^3 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.11)$$

En forma equivalente se procede a discretizar la vorticidad y su rotor según:

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{H}^e \hat{\boldsymbol{\omega}}^e, \quad \nabla \times \boldsymbol{\omega} = \mathbf{B}_{curl}^e \hat{\boldsymbol{\omega}}^e, \quad (4.12)$$

donde  $\hat{\boldsymbol{\omega}}^e$  es el arreglo de los valores nodales de la vorticidad obtenidos de la integración de la ecuación de transporte de la vorticidad, dado por:

$$\hat{\boldsymbol{\omega}}^e = \left[ \hat{\omega}_x^1 \quad \hat{\omega}_y^1 \quad \hat{\omega}_z^1 \quad \hat{\omega}_x^2 \quad \hat{\omega}_y^2 \quad \hat{\omega}_z^2 \quad \dots \quad \hat{\omega}_x^{N_{GL}}^3 \quad \hat{\omega}_y^{N_{GL}}^3 \quad \hat{\omega}_z^{N_{GL}}^3 \right]^T, \quad (4.13)$$

mientras que  $\mathbf{H}^e$  y  $\mathbf{B}_{curl}^e$  son los mismos arreglos de las funciones de interpolación y sus derivadas respecto de las coordenadas del problema, utilizadas para interpolar la velocidad y su gradiente, gracias a que tanto la velocidad como la vorticidad en el caso tridimensional tienen sus tres componentes no nulas.

Con estas interpolaciones se puede discretizar la formulación variacional de la KLE en tres dimensiones (ecuación 3.26), en cada subdominio elemental, reemplazando la velocidad y la vorticidad y sus derivadas por sus correspondientes discretizaciones, como:

$$\delta \hat{\mathbf{V}}^{eT} \underbrace{(\mathbf{K}_L^e + \mathbf{K}_D^e + \mathbf{K}_\omega^e)}_{\mathbf{K}^e} \hat{\mathbf{V}}^e = \delta \hat{\mathbf{V}}^{eT} \underbrace{(\mathbf{R}_L^e + \mathbf{R}_\omega^e)}_{\mathbf{R}^e} \hat{\boldsymbol{\omega}}^e, \quad (4.14)$$

donde:

$$\mathbf{K}_L^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{B}^e d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{B}^{eT} \mathbf{B}^e |\mathbf{J}| dr ds dt, \quad (4.15)$$

$$\mathbf{K}_{\mathcal{D}}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \alpha_{\mathcal{D}} \mathbf{B}_{div}^{eT} \mathbf{B}_{div}^e |\mathbf{J}| dr ds dt, \quad (4.16)$$

$$\mathbf{K}_{\omega}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \alpha_{\omega} \mathbf{B}_{curl}^{eT} \mathbf{B}_{curl}^e |\mathbf{J}| dr ds dt, \quad (4.17)$$

$$\mathbf{R}_L^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{H}^{eT} \mathbf{B}_{curl}^e |\mathbf{J}| dr ds dt, \quad (4.18)$$

$$\mathbf{R}_{\omega}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \alpha_{\omega} \mathbf{B}_{curl}^{eT} \mathbf{H}^e |\mathbf{J}| dr ds dt, \quad (4.19)$$

y  $\hat{\delta}\mathbf{V}^e$  es el arreglo de valores nodales de las componentes del campo arbitrario  $\delta\mathbf{v}$ .

Las matrices elementales  $\mathbf{K}^e$  y  $\mathbf{R}^e$  se ensamblan en las respectivas matrices globales, llegando finalmente al sistema global que representa la discretización de la KLE tridimensional,

$$\mathbf{K} \hat{\mathbf{V}} = \mathbf{R} \hat{\omega}. \quad (4.20)$$

Dados el arreglo de valores de la vorticidad en los nodos de la malla,  $\hat{\omega}$ , y las condiciones de contorno correspondientes, se obtiene de la ecuación 4.20 el arreglo de las componentes de la velocidad en los nodos ( $\hat{\mathbf{V}}$ ), i.e. la solución discreta de la Ecuación Laplaciana Cinemática. Como es práctica común en el método de elementos espectrales, las matrices de la ecuación 4.14 se integran numéricamente utilizando la cuadratura de Gauss-Lobatto. Las matrices globales resultantes de la KLE son independientes tanto del tiempo como de la relación constitutiva del continuo, por lo que una vez calculadas se almacenan y se utilizan tantas veces como se necesite mientras que no se modifique la geometría del problema, es decir mientras la malla de la discretización sea la misma.

De esta forma, la resolución del sistema espacial en cada paso de tiempo se reduce a un par de procesos de back-substitution donde simplemente cambian el término de cargas en cada paso de tiempo y las condiciones de contorno entre la solución free-slip y la solución no-slip.

## 4.2. Discretización de la solución temporal

Para la integración temporal, en el problema tridimensional, se parte de la ecuación 3.32 en combinación con la ecuación 3.33. En los métodos de elementos finitos suele ser necesario calcular las llamadas variables secundarias, i.e. aquéllas obtenidas a partir de derivar las variables del problema. En el caso de la ecuación 3.32 aparece una sucesión de operaciones de

derivación de los campos vectoriales cuyos resultados intermedios resultan ser variables secundarias del problema. En la discretización de dicha ecuación, las mencionadas operaciones se aplican a través de la construcción de *operadores diferenciales*, es decir matrices que realizan las operaciones discretas equivalentes. En este caso, la aplicación de los operadores diferenciales que aparecen en la evolución temporal del flujo resulta equivalente al cálculo de variables secundarias clásicas. Para computar el efecto de dichos operadores se ha utilizado una técnica de derivación, promediación y reprojeción de forma de obtener las variables correspondientes en los nodos de los elementos.

Para evaluar el lado derecho de la ecuación 3.32 se ensamblan 3 arreglos,  $\mathbf{C}_{url}$ ,  $\mathbf{D}_{iv}$  y  $\mathbf{S}_{rt}$ , que realizan las operaciones discretas equivalentes a los operadores diferenciales rotor, divergencia, y al cálculo del tensor tasa de deformación de la ecuación 3.33,

$$\rho \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\omega}}}{\partial t} = \underbrace{\nabla \times}_{\mathbf{C}_{url}} (\underbrace{\nabla \cdot}_{\mathbf{D}_{iv}} (2 \mu \underbrace{\boldsymbol{\xi}}_{\mathbf{S}_{rt}(v)} - \rho \underbrace{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}}_{\widehat{\mathbf{V}\mathbf{V}}}) \quad (4.21)$$

Estos arreglos realizan las operaciones en cualquier vector o tensor con la dimensión adecuada a partir de un producto de matrices con la versión discreta del correspondiente campo:

- $\nabla \times (*) = \mathbf{C}_{url} \cdot (*)$ ,
- $\nabla \cdot (*) = \mathbf{D}_{iv} \cdot (*)$ ,
- $\frac{1}{2}(\nabla(*) + \nabla(*)^T) = \mathbf{S}_{rt} \cdot (*)$ .

Durante el proceso, primero se construyen los operadores elementales sin peso, definidos con la notación  $\hat{*}$  que calculan las derivadas de las variables principales o combinaciones de éstas en cada punto de integración. Luego se definen los aportes. Finalmente estas matrices se ensamblan en matrices globales pesadas de acuerdo a los pesos definidos en el nodo global correspondiente. De esta forma, las variables secundarias se obtienen multiplicando estas matrices globales de derivación–promediación–reprojeción por los vectores solución que contienen a las variables principales. Además definimos el arreglo  $\widehat{\mathbf{V}\mathbf{V}}$ , reordenando los productos de las componentes del campo de velocidades de forma de representar las componentes del tensor que resulta de realizar el producto tensorial  $\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}$ .

De esta forma, el lado derecho de la ecuación 3.32 se calcula en forma discreta como:

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\omega}}}{\partial t} = \mathcal{F}(\hat{\boldsymbol{\omega}}, t) = \mathbf{C}_{url} \cdot \left[ \frac{1}{\rho} \mathbf{D}_{iv} \cdot \left( 2 \mu \mathbf{S}_{rt} \cdot \hat{\mathbf{V}} - \rho \widehat{\mathbf{V}\mathbf{V}} \right) \right]. \quad (4.22)$$

Cabe destacar que con los operadores  $\mathbf{C}_{url}$ ,  $\mathbf{S}_{rt}$  y  $\mathbf{D}_{iv}$  ocurre lo mismo que con las matrices de la KLE: no dependen ni de la vorticidad  $\hat{\boldsymbol{\omega}}$  ni del tiempo  $t$ , por lo que de la misma manera se pueden calcular una vez para una malla dada, almacenarlos y usarlos todas las veces que resulte

necesario evaluar la ecuación 4.22 dentro del proceso de integración temporal comandado por un *ODE solver*. En este caso, se seleccionó el algoritmo de integración *Runge-Kutta* de quinto orden con paso de tiempo adaptativo.

## Cálculo de operadores diferenciales 3D en cada elemento

Análogamente a como se calcularon las matrices para la discretización de la solución espacial, se calcularán las matrices  $\mathbf{H}^e$ , definidas por las funciones de forma, y  $\mathbf{B}^e$ , definidas por las derivadas de éstas, de cada operador para realizar la integración sobre cada elemento evaluándolas sobre las coordenadas de los nodos.

Para el cálculo del operador  $\mathbf{C}_{curl}^e$  se calculará  $\mathbf{H}_{curl}^e$  en términos de las funciones de forma como:

$$\mathbf{H}_{curl}^e = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & 0 & \cdots & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 & 0 & h_2 & 0 & \cdots & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 \\ 0 & 0 & h_1 & 0 & 0 & h_2 & \cdots & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

y  $\mathbf{B}_{curl}^e$  en función de las derivadas de ellas como:

$$\mathbf{B}_{curl}^e = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\partial h_1}{\partial z} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & \dots & 0 & -\frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} \\ \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial h_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & 0 & -\frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} \\ -\frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & \dots & -\frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.24)$$

con las que se obtendrá el operador elemental rotor:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{C}}_{curl}^e &= \int_{\Omega^e} \mathbf{H}_{curl}^{e \ T} \mathbf{B}_{curl}^e \, d\Omega \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{H}_{curl}^{e \ T} \mathbf{B}_{curl}^e |\mathbf{J}| \, dr \, ds \, dt. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Para el cálculo del operador  $\mathbf{D}_{iv}^e$ , dadas:

$$\mathbf{H}_{div}^e = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & \dots & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 & \dots & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 \\ 0 & 0 & h_1 & \dots & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} \end{bmatrix}, \quad (4.26)$$

$$\mathbf{B}_{div}^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial z} & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial z} & \frac{\partial h_1}{\partial x} & \dots & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} \end{bmatrix}, \quad (4.27)$$

se obtendrá el operador elemental de la divergencia como:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{iv}^e &= \int_{\Omega^e} \mathbf{H}_{div}^e {}^T \mathbf{B}_{div}^e d\Omega \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{H}_{div}^e {}^T \mathbf{B}_{div}^e |\mathbf{J}| dr ds dt. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Las componentes discretas del tensor de segundo orden  $\mathbf{S}_{rt}^e$  se ordenarán en un arreglo unidimensional según:

$$\mathbf{S}_{rt} \cdot \hat{\mathbf{V}} = \left[ \xi_{xx} \ \xi_{xy} \ \xi_{yy} \ \xi_{yz} \ \xi_{zz} \ \xi_{zx} \right]^T, \quad (4.29)$$

entonces, las matrices elementales serán:

$$\mathbf{H}_{srt}^e = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N_{GL}^3} \end{bmatrix}, \quad (4.30)$$

$$\mathbf{B}_{srt}^e = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & 0 & \dots & 2\frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & 0 & 0 \\ \frac{\partial h_1}{\partial y} & \frac{\partial h_1}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} & 0 \\ 0 & 2\frac{\partial h_1}{\partial y} & 0 & \dots & 0 & 2\frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial h_1}{\partial z} & \frac{\partial h_1}{\partial y} & \dots & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial y} \\ 0 & 0 & 2\frac{\partial h_1}{\partial z} & \dots & 0 & 0 & 2\frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} \\ \frac{\partial h_1}{\partial z} & 0 & \frac{\partial h_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial z} & 0 & \frac{\partial h_{N_{GL}^3}}{\partial x} \end{bmatrix}, \quad (4.31)$$

con las que se podrá calcular  $\mathbf{S}_{rt}^e$ , la matriz elemental que computa las componentes discretas del tensor tasa de deformación como:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{rt}^e &= \int_{\Omega^e} \mathbf{H}_{srt}^{eT} \mathbf{B}_{srt}^e d\Omega \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{H}_{srt}^{eT} \mathbf{B}_{srt}^e |\mathbf{J}| dr ds dt. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Para calcular y pesar los aportes de los distintos elementos a cada nodo de la discretización se parte del arreglo de funciones de forma:

$$\mathbf{H}^e = \left[ \begin{array}{ccccccc} h_1 & h_2 & h_3 & \dots & \dots & \dots & h_{N_{GL}^3} \end{array} \right], \quad (4.33)$$

para luego construir una matriz de pesos elemental, según:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{weight}^e &= \int_{\Omega^e} \mathbf{H}^{eT} \mathbf{H}^e d\Omega \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{H}^{eT} \mathbf{H}^e |\mathbf{J}| dr ds dt. \end{aligned} \quad (4.34)$$

## Ensamble de operadores diferenciales globales

De acuerdo a lo anterior, se consiguen las respectivas matrices elementales que luego se ensamblan en las correspondientes matrices globales,  $\hat{\mathbf{C}}_{url}$ ,  $\hat{\mathbf{D}}_{iv}$  y  $\hat{\mathbf{S}}_{rt}$ . Estas matrices globales deben ser afectadas por el peso de cada nodo en la malla en que se ha discretizado el dominio del problema.

Para considerar el aporte de cada nodo, se ensamblan las matrices elementales  $\mathbf{M}_{weight}^e$  en una matriz global equivalente a la clásica matriz de masa de elementos finitos. En el caso de utilizar elementos espectrales integrados inexactamente de acuerdo a lo descripto en el capítulo 2, esta matriz resultará diagonal y el valor en el elemento de la diagonal asociado a cada nodo corresponde al aporte del mismo. En este caso particular, luego del cómputo de  $\mathbf{M}_{weight}^e$  se suman los aportes correspondientes a cada nodo del elemento, construyendo el vector  $\mathbf{W}$  cuyos valores son la suma en cada nodo de los aportes de cada elemento de la discretización:

$$W_i = \sum_1^q M_{weightii}^e, \quad (4.35)$$

siendo  $q$  la cantidad de elementos que comparten cada nodo. Cada aporte correspondiente a un nodo es extendido de acuerdo a la cantidad de grados de libertad en correspondencia con el

operador que se debe pesar y para ello se crean los arreglos

$$\mathbf{W}_{3\times} = [W_1 \ W_1 \ W_1 \ W_2 \ W_2 \ W_2 \ \dots \ W_{3N_T} \ W_{3N_T} \ W_{3N_T}] \quad (4.36)$$

$$\mathbf{W}_{6\times} = [W_1 \ W_1 \ W_1 \ W_1 \ W_1 \ W_1 \ \dots \ W_{3N_T} \ W_{3N_T} \ W_{3N_T} \ W_{3N_T} \ W_{3N_T}] \quad (4.37)$$

donde los subíndices indican la numeración global de los nodos y  $N_T$  es el número total de nodos de la discretización. Una vez construidos los vectores extendidos se aplican los pesos sobre los operadores construidos a partir del ensamblaje de las matrices elementales de la siguiente manera:

$$\mathbf{C}_{url} = \mathbf{P}_{3\times}^{-1} \hat{\mathbf{C}}_{url}, \quad \mathbf{D}_{iv} = \mathbf{P}_{3\times}^{-1} \hat{\mathbf{D}}_{iv}, \quad \mathbf{S}_{rt} = \mathbf{P}_{6\times}^{-1} \hat{\mathbf{S}}_{rt}, \quad (4.38)$$

donde las matrices  $\mathbf{P}$  son diagonales y sus elementos se definen como:

$$P_{3\times}^{ii} = W_{3\times_i}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, 3N_T, \quad (4.39)$$

$$P_{6\times}^{ii} = W_{6\times_i}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, 6N_T. \quad (4.40)$$

Debido a esto el cálculo de las inversas de las matrices  $\mathbf{P}$  que aparecen en la ecuación 4.38 resulta trivial ya que resultarán matrices diagonales cuyos elementos son las inversas elemento a elemento de las matrices  $\mathbf{P}$ .

### 4.3. Implementación

Para realizar la implementación se partió desde la base del código desarrollado por A. D. Otero y J. Quinteros<sup>1</sup>, el mismo se encuentra implementado utilizando el lenguaje de programación python. Una de las características que se busca en el código es que sea escalable, reutilizable y eficiente, tanto en uso de CPU como uso de memoria RAM.

La implementación está desarrollada en base a la biblioteca `petsc4py`<sup>2</sup> que es una interface de python con la biblioteca PETSc<sup>3</sup>. PETSc es un conjunto de estructuras de datos y rutinas para la solución escalable (paralela) de aplicaciones científicas modeladas por ecuaciones diferenciales parciales. Es compatible con el protocolo MPI (message passage interface) y cómputo en placas gráficas de propósito general (GPUs) a través de los frameworks CUDA y OpenCL, así como con el paralelismo híbrido MPI-CUDA. PETSc también contiene la biblioteca de software de optimización Tao. PETSc posee un diseño particular en cuanto a como se debe utilizar. En el tabla 4.1 se muestra un resumen con las clases desarrolladas en esta implementación asociadas a las clases de PETSc utilizadas cuyas relaciones se detallan a continuación. Para describir la

<sup>1</sup>Enlace al repositorio: <https://bitbucket.org/javiquinte/quote>

<sup>2</sup><https://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc4py-current/docs/apiref/index.html>

<sup>3</sup><https://www.mcs.anl.gov/petsc/documentation/index.html>

Clases desarrolladas	Clases de PETSc
Domain	DMPLEX
SectionManager	Section
SpectralElement	Mat
KSPSolver	KSP
TSSolver	TS
Matrices	

Tabla 4.1: Resumen de clases desarrolladas y las pertenecientes a la biblioteca PETSc

secuencia algorítmica vamos a definir 4 etapas: configuración inicial, pre-alocado de memoria, construcción de matrices y resolución temporal del problema.

## Configuración inicial

**Domain:** Esta clase hereda todos los métodos provistos por la clase DMPLEX de PETSc. Su función consiste en leer la configuración de la malla. Esto puede llevarse a cabo de dos formas diferentes: por medio de la lectura de una malla realizada utilizando el software Gmsh <sup>4</sup> o definiendo directamente la cantidad de elementos por dimensión y las esquinas inferior y superior de un dominio rectangular.

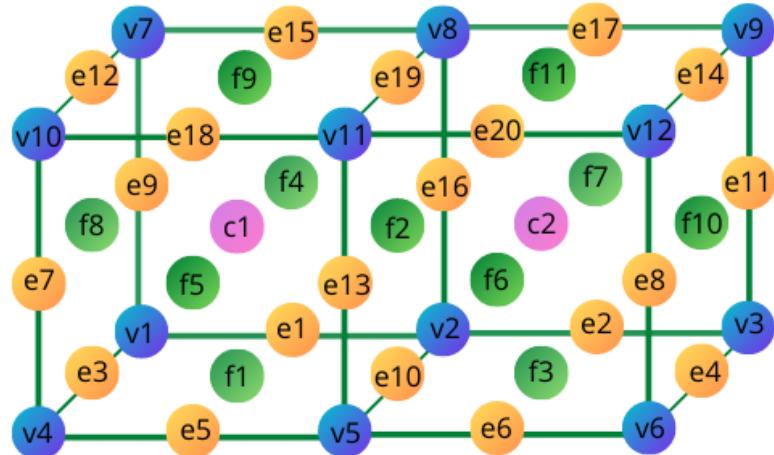
**DMPLEX:** Esta clase de PETSc representa la topología de mallas tanto estructuradas como no-estructuradas. Es independiente del número de grados de libertad  $N_{GL}$  de cada elemento. Para esta clase, el interior de un elemento o celda, caras, bordes y vértices (*cell*, *face*, *edge* y *vertex* respectivamente según la nomenclatura de PETSc) son vistos como puntos (*points*) dentro de un Grafo Acíclico Dirigido (*DAG*, *por sus siglas en inglés*) y las relaciones entre los puntos definen la topología de la malla. En la figura 4.1 se muestra un ejemplo para el caso de una malla de dos elementos. Esta malla posee 12 vértices (v1, ..., v12), 20 bordes (e1, ..., e20), 11 caras (f1, ..., f11) y 2 *cells* (c1, c2). Sobre esta clase se aplica el particionado para cómputo en paralelo, distribuyendo en cada proceso los puntos del *DAG*.

**SectionManager:** Esta clase utiliza la clase **Section** de PETSc. Su función es la de establecer cuántos nodos corresponden a cada *point* del *DAG*. Esta clase establece los nodos de cada *point* en función del  $N_{GL}$  de la siguiente manera: cada *cell* posee  $(N_{GL} - 2)^3$  nodos, cada *face* posee  $(N_{GL} - 2)^2$  nodos, para cada *edge* le corresponden  $(N_{GL} - 2)$  nodos y finalmente a los *vertices* les corresponden 1 nodo independientemente del  $N_{GL}$ .

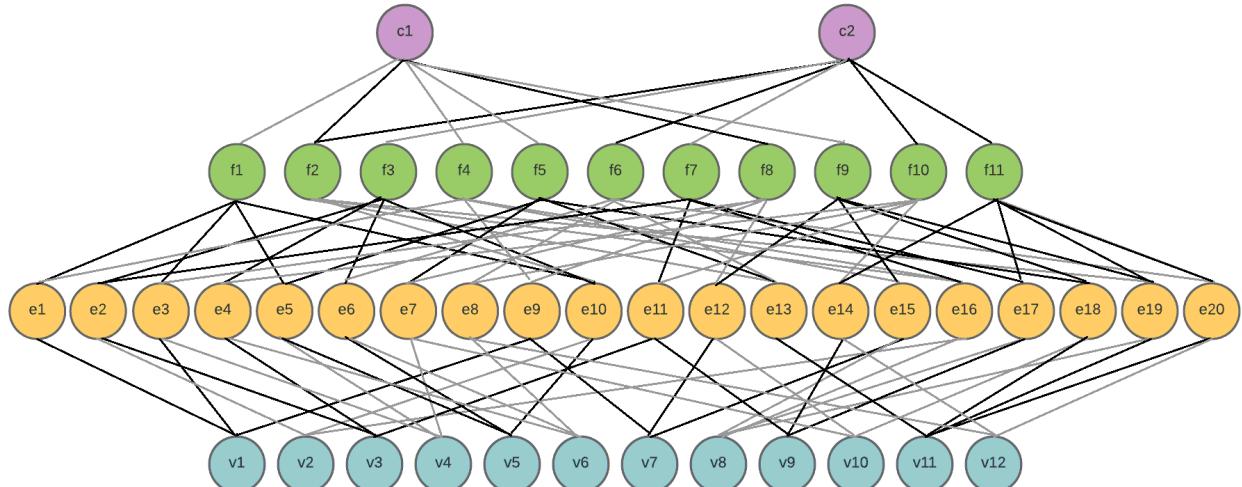
En la figura 4.2 se muestra el ejemplo para  $N_{GL} = 4$  donde la *cell* c1 posee 8 nodos, la *face* f1 posee 4 nodos el *edge* e1 tiene 2 nodos y el *vertex* v1 tiene 1 nodo.

**SpectralElement:** Construye las matrices de interpolación de las ecuaciones 4.3, 4.4, 4.8 y 4.11 pero en coordenadas locales ( $r, s, t$ ). Estas matrices elementales están construidas utili-

<sup>4</sup><https://gmsh.info/>

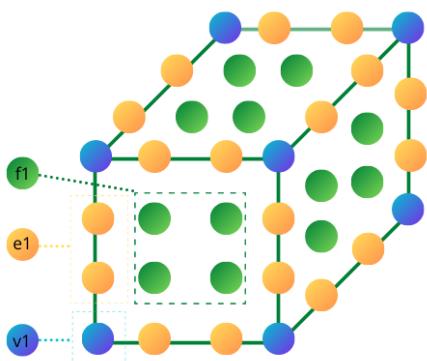


(a) Topología de una malla de 2 elementos.

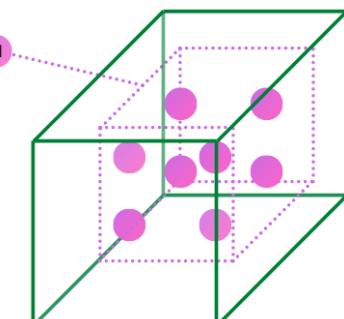


(b) Representación de la topología en un *DAG*.

Figura 4.1: Ejemplo de la representación la topología en un *DAG* de DMPLEX.



(a) Detalle de un vértice, lado y cara.



(b) Detalle de la celda.

Figura 4.2: Ejemplo de la representación la topología en un *DAG* de DMPLEX un elemento de la malla de la figura 4.1 con  $N_{GL} = 4$ .

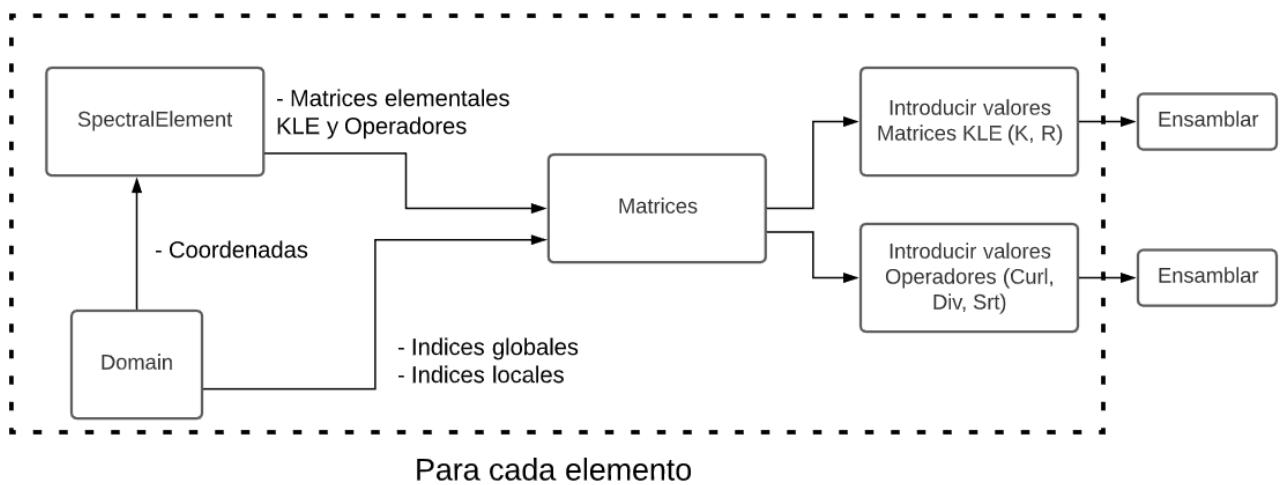


Figura 4.3: Proceso de construcción y ensamblaje de las matrices globales.

zando la clase `array` de la biblioteca `numpy` de `python`.

### Pre-alocado de memoria

En esta etapa, ya inicializado el `Domain`, reservamos espacio en memoria necesario para construir las matrices ralas necesarias para la resolución del problema.

**Matrices:** Esta clase se encarga de inicializar todas las matrices, recibe como parámetros las dimensiones del dominio y luego, dependiendo de la cantidad de grados de libertad por nodo, reserva espacio en memoria e inicializa la matriz correspondiente perteneciente a la clase `Mat` de PETSc. Otro parámetro importante es la cantidad de índices distintos de cero en el bloque diagonal de la matriz local (`ind_d_nnz`) y los índices distintos de cero fuera del bloque diagonal de la matriz local (`ind_off_nnz`) de cada procesador. Para el cómputo secuencial este último parámetro es trivial dado que la matriz local coincide con la matriz global.

### Construcción de matrices

Una vez inicializadas las matrices se itera por cada elemento obteniendo sus coordenadas y, con la clase `SpectralElement`, cambiando el sistema de coordenadas de las matrices en coordenadas  $(r, s, t)$  a las coordenadas  $(x, y, z)$  utilizando el jacobiano según la ecuación 4.5. Luego se integran, para cada elemento, las ecuaciones 4.15 a 4.19 para obtener las matrices elementales, este proceso se muestra en la figura 4.3. Para el caso de los operadores el proceso es análogo al de las matrices descriptas anteriormente, en este caso se integran las ecuaciones 4.25, 4.28, 4.32 y 4.34.

Para cada elemento el `Domain` informa sus nodos locales en el elemento (de 0 a  $N_{GL}^3$ ), tanto como los índices de sus coordenadas, velocidad y vorticidad del elemento irán de (de 0 a  $3N_{GL}^3$ )

y sus índices globales para insertar los aportes de cada elemento a la matriz global. A medida que se van insertando los valores a la matriz global los mismos son guardados en un *buffer*, para que las matrices estén listas para su uso final se hace una operación de ensamblaje. Luego de este proceso las matrices están en condiciones de realizar operaciones algebraicas, es por ello que a los operadores inmediatamente luego de ser ensamblados se les aplica el coeficiente de peso indicado en 4.38 obteniendo así los operadores definitivos.

## Resolución del problema

Antes de resolver el problema hay que inicializar las clases **KSP** y **TSSolver**.

**KSP:** Es una clase de PETSc que reúne a una familia de *solvers* de sistemas de ecuaciones lineales. Siendo el sistema a resolver  $\mathbf{AX} = \mathbf{b}$ , recibe como parámetro la matriz global  $\mathbf{A}$ , que para este problema en particular sería la matriz  $\mathbf{K}$ , y un pre-condicionador de una biblioteca incluida en PETSc. Llamaremos **solveKLE** al proceso en el que se proporciona el vector  $\mathbf{b}$  y el objeto **KSP** devuelve la velocidad  $\hat{\mathbf{V}}$  como solución.

**TSSolver:** Clase que hereda los métodos de TS (*Time-Stepper*) de PETSc. Es el integrador temporal para el problema *ODE* que reúne varios métodos para resolución de *ODE*. En este caso usaremos el método de *Runge-Kutta* de orden 5 (Bogacki y Shampine, 1996). Para inicializar la clase debemos proporcionar los parámetros: tiempo inicial, tiempo máximo, cantidad de pasos, solución inicial y la función  $\mathcal{F}$  para computar el lado derecho de la ecuación 4.22. La función  $\mathcal{F}$  que se provee al **TSSolver** sigue la secuencia que se indica en la figura 4.4 en caso de no tener ningún borde no-slip y la secuencia de la figura 4.5 en caso de tenerlo. En ambos casos, el proceso que es comandado internamente por PETSc entrega como parámetros el tiempo y la vorticidad para recibir  $\mathcal{F}$  como resultado.

Internamente, en cada paso de tiempo el **TSSolver** llamará a la función con la vorticidad y el tiempo mencionados, y si el problema no tiene contornos no-slip, resolverá el lado derecho de la ecuación 4.22 como se describe en la Figura 4.4: se aplican primero las condiciones de borde, luego con ellas se resuelve la KLE de la ecuación 4.20, obteniendo una nueva velocidad a la cual se le aplicarán los operadores de la ecuación 4.22, para que **TSSolver** pueda evaluar la función resultante tantas veces como sea necesario. Una vez que un paso haya convergido las variables de interés son guardadas en formato HDF5 y en XML para ser visualizadas en Paraview<sup>5</sup>.

Para los problemas que tengan condiciones de borde no-slip, la función que devuelve la solución del lado derecho de la ecuación (RHS) será más compleja siguiendo un procedimiento análogo al propuesto por Ponta (2005). En primer lugar se aplican sólo las condiciones de borde free-slip o de libre deslizamiento, imponiendo  $v = 0$  en los grados de libertad perpendiculares

---

<sup>5</sup><https://www.paraview.org/>

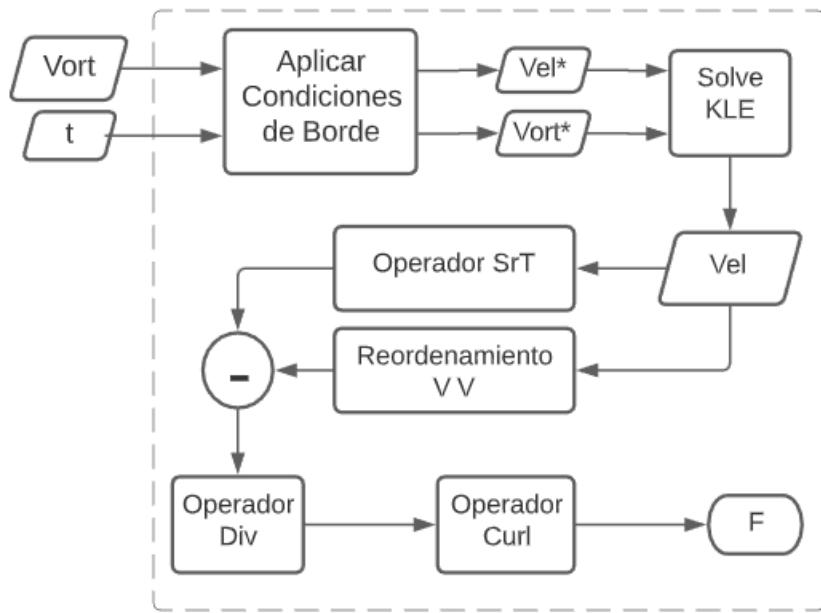


Figura 4.4: Proceso de solución del lado derecho en cada paso.

a las caras. Con estas condiciones y las vorticidades se resuelve la KLE de la ecuación 4.20, que tiene en este caso matrices  $K$  y  $R$  específicamente calculadas para las condiciones free-slip. A la velocidad resultante, se le aplican ahora todas las condiciones de borde. En las caras no-slip se aplicarán ahora también las velocidades tangenciales, tal como estén impuestas en las condiciones de contorno, de forma que se genere la vorticidad correspondiente a la condición no-slip. Luego se procederá nuevamente a resolver la KLE de la ecuación 4.20. Por último, a la velocidad obtenida, tal como en el caso anterior, se le aplican operadores continuando el proceso de la misma manera que en el caso free-slip ya explicitado.

### Ambiente de desarrollo

Para correr el algoritmo presentado en este trabajo es necesario crear un entorno que esté particularmente preparado. Debe tener un linux (requiere un base Debian, puede ser ubuntu 20.04 o previo), con el lenguaje `python3` instalado y las bibliotecas: `MPI4Py`, `NumPy`, `Matplotlib`, `PETSc` (`HDF5`, `Chaco` y `fblaslapack`) y `PETCsc4Py`. Las ventajas de estas bibliotecas son varias:

- escalabilidad: permiten distribuir el trabajo en múltiples procesadores y nodos, lo que proporciona una gran escalabilidad en el cálculo de problemas de elementos finitos
- flexibilidad: pueden utilizarse diferentes solvers y precondicionadores
- eficiencia: están diseñadas para maximizar la eficiencia en el procesamiento de sistemas de ecuaciones lineales y no lineales en paralelo

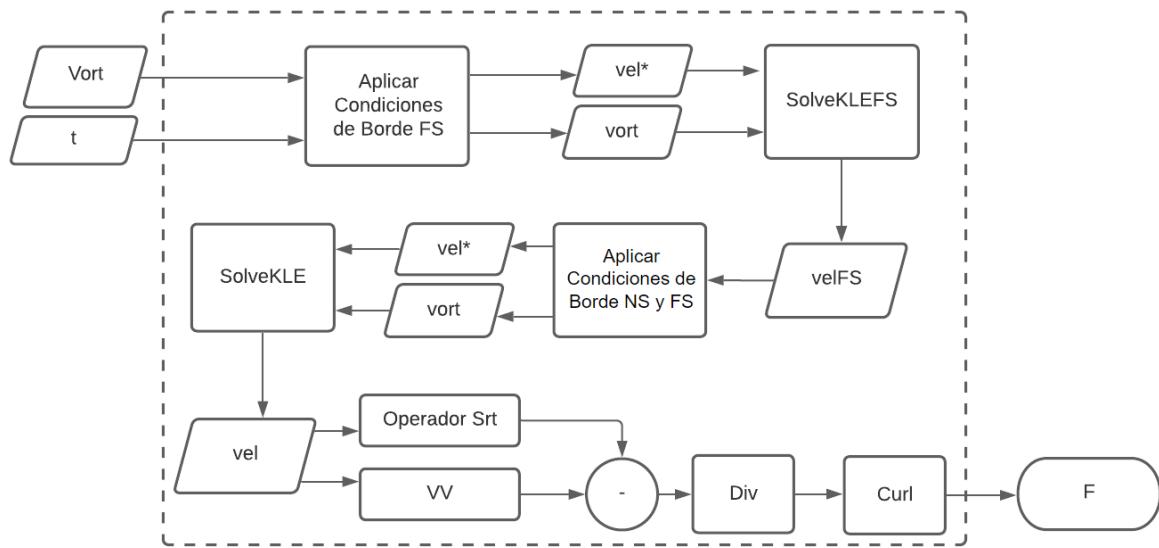


Figura 4.5: Proceso de solución del lado derecho en cada paso con condiciones de borde no-slip.

- accesibilidad: son gratuitas y se pueden utilizar en **python**, que es un lenguaje amigable y popular

Dada la complejidad de la creación de este entorno, la cantidad de bibliotecas a descargar, y la necesidad de que las versiones de las mismas sean compatibles se creó un ambiente. El mismo es un contenedor **docker**<sup>6</sup>, el cual se puede descargar como imagen y, luego de descargar el repositorio de git, se puede correr el algoritmo sin ningún inconveniente. De esta manera se resuelve la complejidad tecnológica, teniendo todas las herramientas necesarias al alcance de dos clicks.

<sup>6</sup><https://docs.docker.com/>

# Capítulo 5

## Validación y resultados

En este capítulo se presenta la validación de la implementación tridimensional realizada contra problemas de solución conocida, tanto analítica como experimentalmente. Además, se exponen resultados de la aplicación de estos desarrollos a otros problemas fluidodinámicos.

En la sección 5.1 se desarrolla el problema de los vórtices de Taylor–Green para estudiar en la sección 5.1.1 la convergencia espectral en la discretización espacial del método y en la sección 5.1.2 la convergencia espectral de los operadores diferenciales. Una vez verificada la precisión en ambas partes se pasa a la sección 5.1.3 donde se verifica la evolución temporal con una solución analítica conocida: el problema de vórtices de Taylor–Green ya mencionado. Luego de estos testeos en la sección 5.1.4 se exponen resultados de un caso de flujo completamente tridimensional del mismo problema presentado en la sección 5.1 para dos números de Reynolds distintos.

La sección 5.2 y la sección 5.3 brindan resultados ahora con fluidos en contacto con superficies sólidas. En la primera se estudia un problema también con solución analítica conocida como lo es el de desarrollo de una capa límite. Mientras que en la segunda se imponen condiciones de borde de no desplazamiento (conocidas por su nombre en inglés: *no-slip*) y se verifica contra un problema muy estudiado experimentalmente: el de una cavidad donde el flujo está forzado por el deslizamiento de la tapa, tanto para 2 dimensiones como para 3 dimensiones, en las secciones 5.3.1 y 5.3.2 respectivamente. Posteriormente, en las siguientes secciones, se exponen resultados con diferentes condiciones de borde, que fuerzan el flujo en la cavidad de diversas maneras y cavidades con distintas geometrías, plasmados en la sección 5.4.

### 5.1. El problema de Taylor–Green

En las siguientes secciones se va a evaluar la precisión de la discretización espacial y de los operadores diferenciales desarrolladas en las secciones anteriores. Para ello se elige el problema

vórtices de Taylor–Green. La particularidad de este problema es que representa una solución de las ecuaciones de Navier–Stokes, cuya expresión analítica es conocida y, además, las funciones resultantes no están incluidas en la base de funciones del método de discretización. Por esto fue elegido para realizar las verificaciones de cada parte de la solución numérica. Se presentan en la sección 5.1.1 los resultados del estudio de convergencia para la solución espacial de esta nueva implementación tridimensional del método KLE, con el objetivo de verificar la convergencia espectral. Este tipo de convergencia remite a la de los métodos espectrales puros, cuya convergencia es más rápida que en los métodos de orden fijo para la misma cantidad de grados de libertad. En la sección 5.1.2 se realizan estudios para evaluar la precisión de los operadores diferenciales que se utilizan para evaluar el lado derecho de la ecuación de transporte de la vorticidad.

El vórtice de Taylor–Green (TGV por las siglas en inglés de *Taylor–Green Vortex*) es un problema canónico de la dinámica de fluidos desarrollado para estudiar la dinámica de los vórtices, la transición a la fase turbulenta, el decaimiento de la turbulencia y el proceso de disipación de energía. En el problema TGV aparecen varios procesos físicos claves en flujos laminares y turbulentos. El problema consiste en un volumen cúbico de fluido que contiene una distribución inicial suave de vorticidad. En el mismo se aplican condiciones de borde periódicas en todas las superficies de contorno. A medida que avanza el tiempo, los vórtices se enrollan, se estiran e interactúan, y en el caso de altos números de Reynolds finalmente se convierten en turbulencia. Al no existir ningún forzamiento externo, el movimiento turbulento a pequeña escala acaba disipando toda la energía del fluido y éste llega al reposo.

En el trabajo de Taylor y Green se propone un flujo tridimensional, con sus velocidades en el tiempo  $t = 0$  dadas por:

$$\begin{aligned}v_x &= A \cdot \cos(a x) \cdot \sin(b y) \cdot \sin(c z), \\v_y &= B \cdot \sin(a x) \cdot \cos(b y) \cdot \sin(c z), \\v_z &= C \cdot \sin(a x) \cdot \sin(b y) \cdot \cos(c z).\end{aligned}\tag{5.1}$$

Aplicando la ecuación de continuidad  $\nabla \cdot v = 0$  se llega a que el campo de velocidades propuesto debe cumplir la siguiente condición:

$$A a + B b + C c = 0.\tag{5.2}$$

La solución de la velocidad en el problema bidimensional de vórtices de Taylor–Green, será entonces una que cumpla las condiciones enumeradas previamente con  $C = c = 0$ . En un dominio rectangular de lados  $L_x$  y  $L_y$  con condiciones periódicas la expresión analítica del

campo de velocidades queda definida como:

$$\begin{aligned} v_x &= k L_x \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right), \\ v_y &= -k L_y \cdot \sin\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right), \end{aligned} \quad (5.3)$$

con:

$$k = U_{ref} e^{-4\pi^2\nu t \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2}\right)}. \quad (5.4)$$

donde  $\nu$  es la viscosidad cinemática dada por  $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ ,  $U_{ref}$  es una velocidad de referencia y  $t$  el tiempo.

La vorticidad asociada a dicha solución resulta en:

$$\omega_z = -2\pi k \left(\frac{L_y}{L_x} + \frac{L_x}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right). \quad (5.5)$$

Tanto la velocidad en la componente  $z$ ,  $v_z$ , como las demás componentes de la vorticidad,  $\omega_x$  y  $\omega_y$ , son nulas.

En el caso tridimensional se pueden proponer varias soluciones que respeten la condición de la ecuación 5.2. Para la verificación de la convergencia espectral de la nueva implementación se utiliza una variante con velocidad nula en la dirección del eje  $z$  pero con variación de las otras velocidades en dicha dirección. Dado un dominio cúbico de lados  $L_x$ ,  $L_y$  y  $L_z$  y condiciones de contorno periódicas, una posible solución para la velocidad del fluido está dada por:

$$\begin{aligned} v_x &= k L_x \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \\ v_y &= k L_y \cdot \sin\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \\ v_z &= 0. \end{aligned} \quad (5.6)$$

siendo:

$$k = U_{ref} e^{-4\pi^2\nu t \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2}\right)}.$$

A partir de esta solución analítica, se pueden calcular tanto la vorticidad como los distintos términos de las ecuaciones de Navier-Stokes. Por dicho motivo, se utiliza este caso para realizar las verificaciones de las distintas partes de la implementación: el cálculo de la solución espacial y el cálculo de variables derivadas a través de los operadores diferenciales; también, englobando

las anteriores, se realiza la verificación de la solución conjunta que nos da la velocidad del fluido evolucionando con el tiempo.

### 5.1.1. Precisión de la solución espacial

A partir de las ecuaciones 5.6 de velocidades del problema tridimensional de Taylor–Green se calcula el rotor de la velocidad para obtener la vorticidad de manera analítica, resultando sus tres componentes:

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{v}]_x &= 2\pi k \frac{L_y}{L_z} \cdot \sin\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \\ [\nabla \times \mathbf{v}]_y &= 2\pi k \frac{L_x}{L_z} \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \\ [\nabla \times \mathbf{v}]_z &= -2\pi k \left(\frac{L_y}{L_x} + \frac{L_x}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Para la verificación de la solución espacial se procede a comparar la velocidad exacta de Taylor–Green (reflejada en las ecuaciones 5.6) contra la velocidad obtenida del método KLE, i.e. el resultado de la ecuación 4.20 dada la distribución de vorticidad expresada en las ecuaciones 5.7.

Dado el arreglo de valores nodales de las componentes de la velocidad calculada por medio de la KLE,  $V_{klei}$ , y los de la solución exacta computados a partir de la ecuación 5.6,  $V_{tgv_i}$ , donde  $i$  es el índice de los elementos en los arreglos de componentes, para cada tiempo se define el error en norma 2 de la velocidad como:

$$\|Error_{vel}\|_2 = \left( \sum (V_{klei} - V_{tgv_i})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.8)$$

Utilizaremos como número de comparación  $N^*$ , que se define como el número de intervalos entre nodos en una dimensión, cuyo análogo en el refinamiento  $h$  en elementos finitos clásicos corresponde a  $N^* = \frac{1}{h}$ , siendo  $h$  el tamaño de los intervalos a lo largo de una dimensión en la malla. En función de las variables del presente algoritmo:

$$N^* = (N_{GL} - 1) n_{elem},$$

donde, en presencia de mallas cúbicas, como se vio en el capítulo 2,  $N_{GL}$  es el número de nodos por elemento en cada dimensión y  $n_{elem}$  la cantidad de elementos por dimensión. Para compararlo con los elementos finitos clásicos se define  $N_{GL} = p + 1$ , lo que da como resultado:

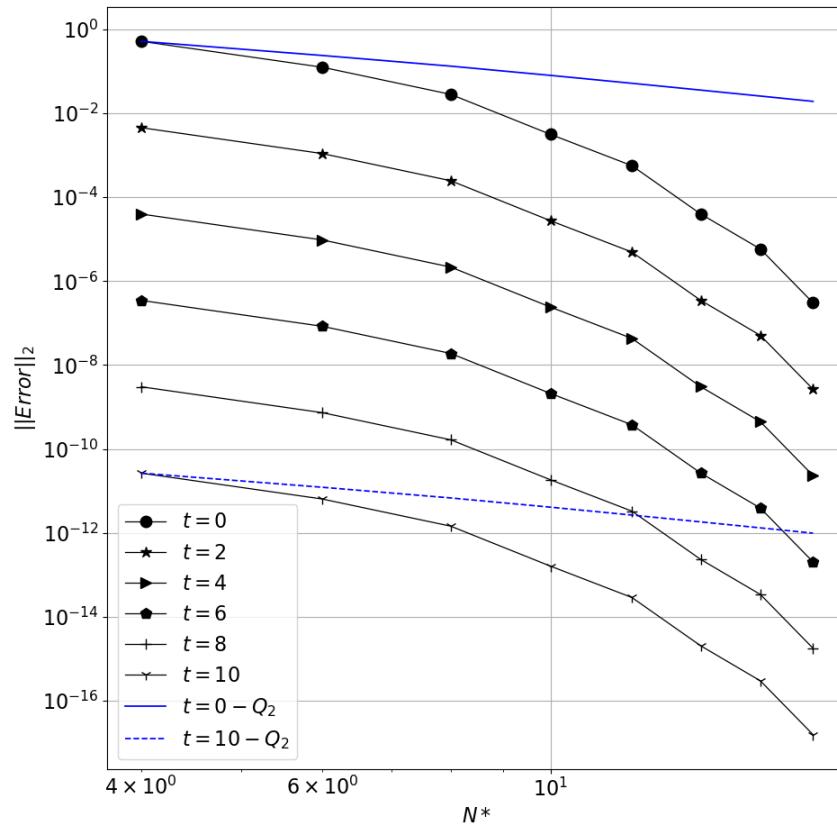


Figura 5.1: Curvas de error de la solución espacial del problema de la ecuación 5.6 para diferentes tiempos y mallas de  $n_{elem} = 2$  con refinamiento  $p$ , con  $2 \leq p \leq 9$ . Se incluyen curvas de refinamiento  $h$  para elementos finitos clásicos de orden 2 en azul a modo comparativo.

$$N^* = p n_{elem} .$$

Se define el refinamiento  $p$  como un aumento del orden de los elementos espectrales ( $N_{GL}$  y, por ende,  $p$ ), dejando constante la cantidad de elementos ( $n_{elem}$ ) y el refinamiento  $h$  como el de elementos finitos clásicos, al que denominaremos  $Q_2$ , aquel donde se mantiene fijo el orden de los elementos ( $p$ ) y se aumenta la cantidad de ellos ( $n_{elem}$ ).

Para distintos tiempos  $t$ , que corresponden a soluciones más o menos suaves, se compara el error de norma 2 de la velocidad de un refinamiento  $p$  (aumentando el orden de los elementos espectrales, de orden  $2 \leq p \leq 9$ ) con el refinamiento  $h$  (aumentando los elementos de  $2 \leq n_{elem} \leq 9$ ). De este último refinamiento sólo se grafican dos tiempos, el menor y el mayor, con la finalidad de que la figura sea más comprensible.

En la figura 5.1 se pueden ver los resultados en función de  $N^*$ . En el caso del refinamiento  $p$ , a medida que aumenta el  $N_{GL}$  en mallas de  $n_{elem} = 2$ , el error se reduce considerablemente;

mientras que en el refinamiento  $h$ , el de los elementos  $Q_2$  clásicos, equivalentes a elementos con  $N_{GL} = 3$ , el error se reduce linealmente en el gráfico de escala logarítmica. De esta forma, se ve que el refinamiento  $p$  converge más rápido que el refinamiento  $h$  para cualquier orden fijo de elementos, y se verifica la convergencia espectral.

### 5.1.2. Precisión de los operadores diferenciales

En esta sección se muestran resultados de la experimentación llevada a cabo para evaluar la implementación del método de derivación–promediación–reproyección, presentado en la sección 3.4. El objetivo de este método es la construcción de los operadores que se utilizan para calcular el rotor ( $\hat{\mathbf{C}}_{url}$ ), el tensor tasa de deformación ( $\hat{\mathbf{S}}_{rt}$ ) y la divergencia ( $\hat{\mathbf{D}}_{iv}$ ). Los mismos sirven para la evaluación del lado derecho de la ecuación de transporte de vorticidad 4.22. Para esta evaluación, se procedió a ensayar los operadores mencionados en forma sistemática sobre campos de velocidades impuestos en diferentes mallas y a compararlos con el rotor de la velocidad y con los dos términos de la ecuación 4.22, obtenidos analíticamente para dichos campos: el rotor del término convectivo y el del término difusivo de las ecuaciones de Navier–Stokes. Los operadores diferenciales se ensamblaron en este caso utilizando mallas regulares de elementos cúbicos y se realizaron refinamientos de tipo  $p$  y de tipo  $h$  en las diferentes mallas.

Para todas las mallas ensayadas se ensamblaron los operadores  $\hat{\mathbf{C}}_{url}$ ,  $\hat{\mathbf{S}}_{rt}$  y  $\hat{\mathbf{D}}_{iv}$  y a partir del arreglo de las componentes de velocidad en los nodos de cada malla  $\hat{\mathbf{V}}$  se calculó:

- la versión discreta del rotor de la velocidad como  $\hat{\mathbf{C}}_{url}\hat{\mathbf{V}}$ ,
- la versión discreta del rotor del término convectivo como  $\hat{\mathbf{C}}_{url}(\hat{\mathbf{D}}_{iv}(\widehat{\mathbf{VV}}))$
- y la versión discreta del rotor del término difusivo como  $\hat{\mathbf{C}}_{url}\frac{1}{\rho}\hat{\mathbf{D}}_{iv}(2\mu\hat{\mathbf{S}}_{rt}(\hat{\mathbf{V}}))$ .

De esta forma, se estudió el desempeño de la técnica de cálculo de variables secundarias en entidades que involucran de 1 a 3 derivadas sucesivas, evaluando el efecto de la discretización por elementos espectrales.

Para analizar el desempeño de la técnica de derivación–promediación–reproyección en campos de velocidades con variación en todas las direcciones, se optó, como ya fue mencionado, por utilizar el problema de vórtices de Taylor–Green, cuyas velocidades vienen dadas por las ecuaciones 5.6 y las vorticidades analíticas por las ecuaciones 5.7.

La expresión analítica del rotor del término convectivo para este campo de velocidades

resulta:

$$\begin{aligned} [\nabla \times (\underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \underline{\mathbf{v}})]_x &= 2 \frac{Ly}{Lz} (2\pi k)^2 \sin\left(2\pi \frac{y}{Ly}\right) \cos\left(2\pi \frac{y}{Ly}\right) \sin\left(2\pi \frac{z}{Lz}\right) \cos\left(2\pi \frac{z}{Lz}\right), \\ [\nabla \times (\underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \underline{\mathbf{v}})]_y &= -2 \frac{Lx}{Lz} (2\pi k)^2 \sin\left(2\pi \frac{x}{Lx}\right) \cos\left(2\pi \frac{x}{Lx}\right) \sin\left(2\pi \frac{z}{Lz}\right) \cos\left(2\pi \frac{z}{Lz}\right), \\ [\nabla \times (\underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \underline{\mathbf{v}})]_z &= 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

En el caso del rotor del término difusivo, para este campo de velocidades, la expresión analítica resulta:

$$\begin{aligned} [\nabla \times (\nabla \cdot \nabla \mathbf{v})]_x &= -\mu (2\pi)^3 k \sin\left(\frac{2\pi x}{Lx}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{Ly}\right) \cos\left(\frac{2\pi z}{Lz}\right) \left( \frac{1}{LzLy} + \frac{Ly}{Lx^2 Lz} + \frac{Ly}{Lz^3} \right), \\ [\nabla \times (\nabla \cdot \nabla \mathbf{v})]_y &= -\mu (2\pi)^3 k \cos\left(\frac{2\pi x}{Lx}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{Ly}\right) \cos\left(\frac{2\pi z}{Lz}\right) \left( \frac{1}{LzLx} + \frac{Lx}{Ly^2 Lz} + \frac{Lx}{Lz^3} \right), \\ [\nabla \times (\nabla \cdot \nabla \mathbf{v})]_z &= \mu (2\pi)^3 k \cos\left(\frac{2\pi x}{Lx}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{Ly}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{Lz}\right) \left( \frac{Lx}{Ly^3} + \frac{Lx}{Lz^2 Ly} + \frac{Ly}{Lx^3} + \frac{Ly}{Lz^2 Lx} + \frac{2}{Ly Lx} \right). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Las expresiones analíticas del rotor de la velocidad y los rotores de ambos términos evaluados en los nodos de cada malla se comparan con los valores calculados de forma discreta utilizando los operadores diferenciales aplicados al campo de velocidad teórica de las ecuaciones 5.6 según:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{v} &= \hat{\mathbf{C}}_{url} \hat{\mathbf{V}}, \\ \nabla \times (\underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \underline{\mathbf{v}}) &= \hat{\mathbf{C}}_{url} (\hat{\mathbf{D}}_{iv} (\widehat{\mathbf{VV}})), \\ \nabla \times (\nabla \cdot \nabla \mathbf{v}) &= \hat{\mathbf{C}}_{url} \frac{1}{\rho} \hat{\mathbf{D}}_{iv} (2\mu \hat{\mathbf{S}}_{rt} (\hat{\mathbf{V}})). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Se va a denominar  $A_{dpr_i}$  al arreglo de valores nodales de las componentes de las expresiones calculadas de forma discreta utilizando los operadores diferenciales aplicados al campo de velocidad teórica de las ecuaciones 5.11. Mientras que se llamará  $A_{tgv_i}$  al arreglo de valores nodales evaluados según las expresiones analíticas desarrolladas en las ecuaciones 5.7, 5.9 y 5.10. En ambos,  $i$  es el índice de los elementos en los arreglos de componentes, y con ellos se define el error en norma 2 de cada uno de ellos respectivamente como:

$$\|Error\|_2 = \left( \sum (A_{dpr_i} - A_{tgv_i})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.12)$$

En las figuras 5.2, 5.3a y 5.3b se pueden ver los errores en función de  $N^*$ . Se comparan dos refinamientos  $p$  con el refinamiento  $h$  de elementos finitos clásicos. En cada caso, la curva

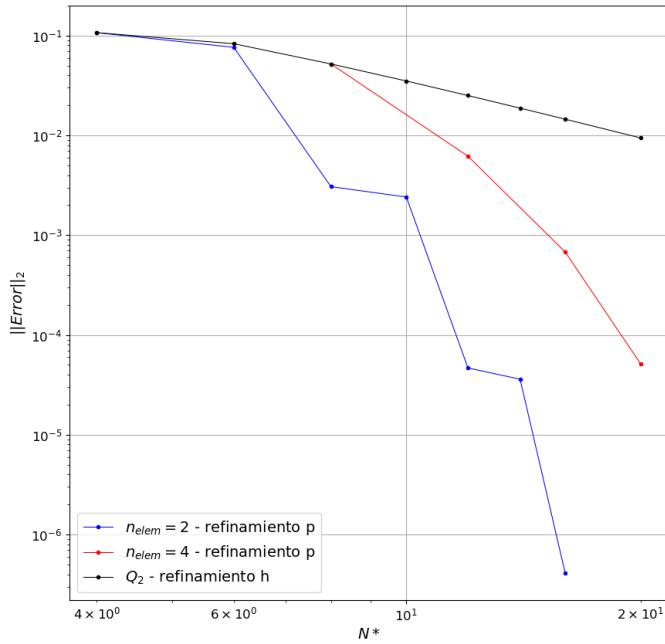


Figura 5.2: Curvas de error del rotor del campo de velocidades de la ecuación 5.6, de refinamiento  $p$  para mallas de  $2^3$  y  $4^3$  elementos

negra presenta el refinamiento  $h$ , variando la cantidad de elementos en una dimensión de la malla de  $2 \leq n_{elem} \leq 10$ , que corresponden a  $N^*$  variando de  $4 \leq N^* \leq 20$ . Mientras tanto, la curva azul muestra el error para una malla de  $n_{elem} = 2$ , con un refinamiento  $p$  con  $2 \leq p \leq 8$ , correspondiendo a  $4 \leq N^* \leq 16$ ; y la curva roja presenta el error para mallas de  $n_{elem} = 4$ , con un refinamiento  $p$  con  $2 \leq p \leq 5$ , que corresponden a  $8 \leq N^* \leq 20$ .

Podemos ver en las figuras 5.2, 5.3a y 5.3b que la curva de refinamiento  $h$  tiene mayor error a medida que el término cuenta con un orden mayor de derivadas. En el cálculo del rotor de la velocidad aparecen derivadas de primer orden, en el del rotor del término convectivo, derivadas sucesivas de segundo orden y de tercer orden en el cálculo del rotor del término difusivo. Por otro lado, las otras curvas de refinamiento  $p$  muestran que el método posee convergencia espectral.

En la figura 5.2, donde evaluamos una magnitud obtenida a partir de una derivada, el error comienza en  $10^{-1}$  para  $N^* = 4$ , y disminuye progresivamente hasta llegar a  $10^{-2}$  para  $N^* = 20$  en el caso de refinamiento  $h$  de los elementos finitos clásicos. En el caso del refinamiento  $p$  y  $n_{elem} = 2$ , al llegar a  $N^* = 16$ , es decir  $p = 8$ , el error cae por debajo de  $10^{-6}$ ; mientras que en el caso de  $n_{elem} = 4$ , al llegar a  $N^* = 20$ , es decir  $p = 5$ , el error cae hasta aproximadamente  $10^{-4}$ . Se aprecia así que las diferencias de velocidad de convergencia entre los distintos refinamientos son muy grandes, de varios órdenes de magnitud.

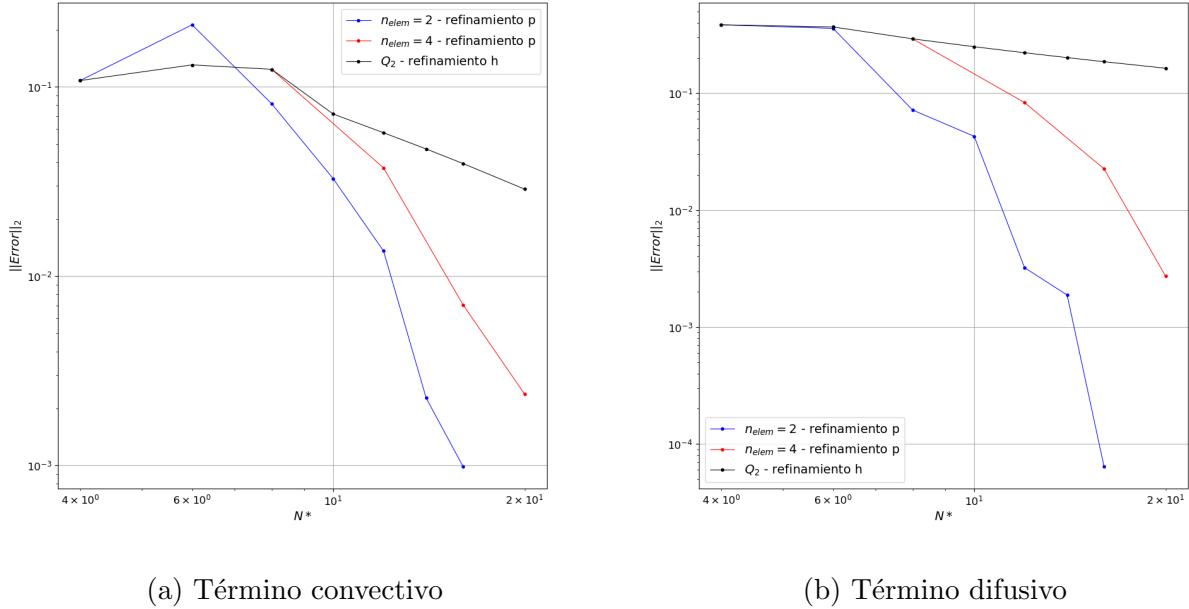


Figura 5.3: Curvas de error del rotor de los dos términos de la ecuación 5.9. Refinamiento  $p$ , para mallas de  $n_{elem} = 2$  y  $n_{elem} = 4$ , comparado con refinamiento  $h$  en elementos finitos clásicos de orden  $p = 2$ .

En la figura 5.3a, donde la magnitud se obtiene a partir de dos derivadas consecutivas, el error comienza también en  $10^{-1}$  para  $N^* = 4$ , y disminuye para los tres refinamientos mostrados, llegando a  $5 \cdot 10^{-2}$  para  $N^* = 20$  en el caso del refinamiento  $h$  de los elementos finitos clásicos. Por otro lado, para el refinamiento  $p$  en la malla de  $n_{elem} = 2$ , al llegar a  $N^* = 16$ , es decir  $p = 8$ , el error cae hasta  $10^{-3}$ ; mientras que en el caso de  $n_{elem} = 4$ , al llegar a  $N^* = 20$ , es decir  $p = 5$ , el error cae hasta aproximadamente  $5 \cdot 10^{-3}$ .

En la figura 5.3b, evaluando una magnitud obtenida a partir de tres derivadas consecutivas, el error comienza aproximadamente en  $7 \cdot 10^{-1}$  para  $N^* = 4$  y disminuye para todos los refinamientos. En el caso del refinamiento  $h$ , llega a  $2 \cdot 10^{-1}$  para  $N^* = 20$ . En el refinamiento  $p$  en la malla de  $n_{elem} = 2$ , al llegar a  $N^* = 16$ , es decir  $p = 8$ , el error cae por debajo de  $10^{-4}$ ; y en el caso de la malla de  $n_{elem} = 4$ , al llegar a  $N^* = 20$ , es decir  $p = 5$ , el error cae hasta aproximadamente  $3 \cdot 10^{-3}$ . Así, en ambos términos originados en dos y tres derivadas sucesivas se sigue verificando la convergencia espectral.

En conclusión, en esta sección y la anterior se pudo verificar tanto la convergencia espectral de la solución espacial como la de los operadores. A medida que se aumenta el  $N_{GL}$ , y con ello se genera el refinamiento  $p$ , la solución mejora considerablemente más rápido que en el caso del refinamiento  $h$ .

### 5.1.3. Precisión de la evolución temporal

A fin de verificar el funcionamiento de la secuencia algorítmica completa en esta nueva implementación, se hizo evolucionar en el tiempo la solución del programa y se compararon los resultados de las velocidades resultantes con la velocidades de la solución analítica detallada en la sección 5.1. En este caso, y a fin de comparar también contra la versión bidimensional implementada en trabajos previos, se utilizó la solución al problema de vórtices de Taylor–Green bidimensional. Las condiciones iniciales y de borde del problema y la solución analítica están dadas por la solución de velocidad del problema bidimensional, detallado en las ecuaciones 5.3 y 5.4. Se utilizó en este caso  $U_{ref} = 1$ ,  $L_x = 1$ ,  $L_y = 1$ ,  $\mu = 0,01$ ,  $\rho = 0,5$ , correspondiendo a un  $Re = 50$ .

Por la particularidad de que se comparan 2 problemas de dimensionalidad distinta (bi y tridimesional), se adopta como medida de error el mayor error de la velocidad en todo el dominio para diferentes mallas, tanto en el problema bidimensional puro como en el caso en que se corre el problema bidimensional en un dominio tridimensional. Dado el arreglo de componentes del campo vectorial de velocidades (la solución del programa en un determinado paso de tiempo), al restarle el de velocidades exactas se obtiene un arreglo de los errores en cada componente:

$$E_{v_i} = V_{sol_i} - V_{exc_i}, \quad (5.13)$$

quedando ordenado según

$$E_v = \begin{bmatrix} E_{v_{x_1}} & E_{v_{y_1}} & E_{v_{z_1}} & E_{v_{x_2}} & E_{v_{y_2}} & E_{v_{z_2}} & \dots & E_{v_{x_{N_{GL}^3}}} & E_{v_{y_{N_{GL}^3}}} & E_{v_{z_{N_{GL}^3}}} \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

De esta forma, se define la norma infinita del error de la velocidad como:

$$\|Error_{vel}\|_\infty = \max \|E_{v_i}\|. \quad (5.15)$$

En la figura 5.4 podemos ver que, a medida que agregamos más elementos, el error disminuye. Para tiempos pequeños el error aumenta en todos los casos debido a la dinámica de la solución temporal comandada por el *ODE solver*, disminuyendo en medida considerable luego del tiempo 0,6 aproximadamente. Se comparan mallas bidimensionales con tridimensionales obteniendo una respuesta similar para igual  $n_{elem}$  y una mejor precisión para las mallas tridimensionales respecto de sus análogas bidimensionales.

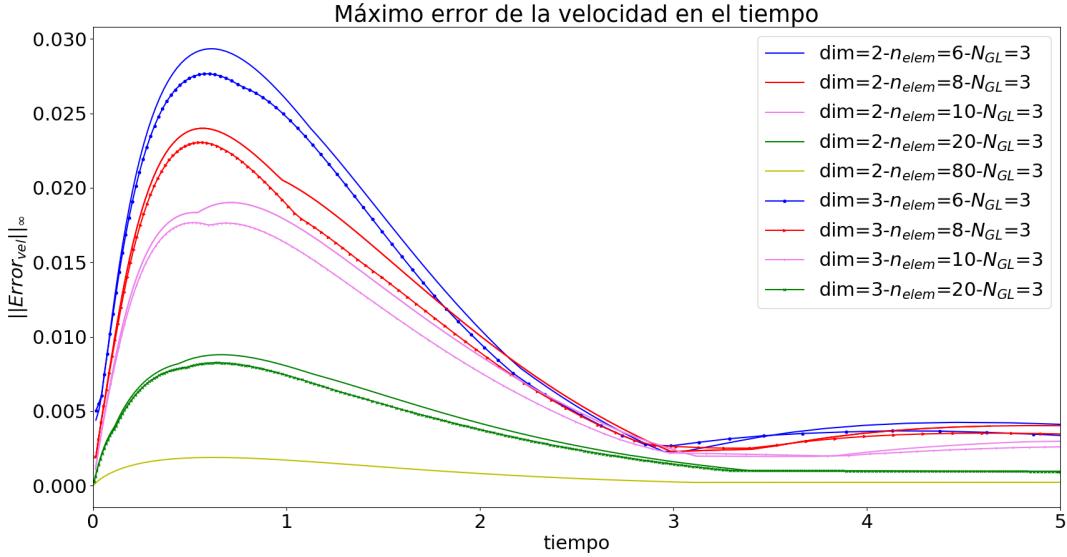


Figura 5.4: Gráfico del error en norma infinita de la evolución temporal del problema de vórtices de Taylor-Green bidimensional para diferentes mallas 2D y 3D.

### 5.1.4. Vórtices de Taylor-Green para diferentes números de Reynolds

Como complemento a las verificaciones realizadas en las secciones anteriores, en esta sección se presentan resultados de la nueva implementación para un problema tridimensional de Taylor-Green con velocidad no nula en todas sus componentes. Se analizan dos casos, uno con número de Reynolds bajo  $Re = 50$  y otro con número de Reynolds alto  $Re = 1600$ . De esta forma, se busca establecer si el método, y la nueva implementación, es capaz de capturar los inicios de la transición de un flujo laminar a uno turbulento. Para ello, el primer caso sirve como referencia del estado laminar, mientras que en el segundo se espera observar la aparición de inestabilidades que darían lugar a dicha transición. Debido a limitaciones en cuanto al poder de cómputo, la malla posible de ser resuelta en esta implementación no permite resolver completamente la turbulencia del caso de alto  $Re$  y solo se hace evolucionar el problema hasta que se manifiesten las primeras inestabilidades.

Para las condiciones iniciales y de contorno se adopta una expresión analítica del campo de

velocidades que cumple con las ecuaciones 5.1 y 5.2 de la forma:

$$\begin{aligned} v_x &= k L_x \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \\ v_y &= k L_y \cdot \sin\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \\ v_z &= -2k L_x \cdot \sin\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right), \end{aligned} \quad (5.16)$$

siendo:

$$k = U_{ref} e^{-4\pi^2 \nu t \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2}\right)}$$

Las componentes de la vorticidad correspondiente al campo de velocidades anterior resultan:

$$\begin{aligned} [\nabla \times \mathbf{v}]_x &= -2\pi k \left( \frac{L_y}{L_z} + 2 \frac{L_z}{L_y} \right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right) \\ [\nabla \times \mathbf{v}]_y &= 2\pi k \left( \frac{L_x}{L_z} + 2 \frac{L_z}{L_x} \right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right) \\ [\nabla \times \mathbf{v}]_z &= 2\pi k \left( \frac{L_y}{L_x} - \frac{L_x}{L_y} \right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{x}{L_x}\right) \cdot \cos\left(2\pi \frac{y}{L_y}\right) \cdot \sin\left(2\pi \frac{z}{L_z}\right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

En el instante inicial,  $t = 0$ , se pueden identificar claramente los vórtices de Taylor–Green. Para ello, se grafica en la figura 5.5 la superficie de nivel de magnitud de velocidad unitaria,  $\|\mathbf{v}\| = 1$ , coloreada según la magnitud de la vorticidad.

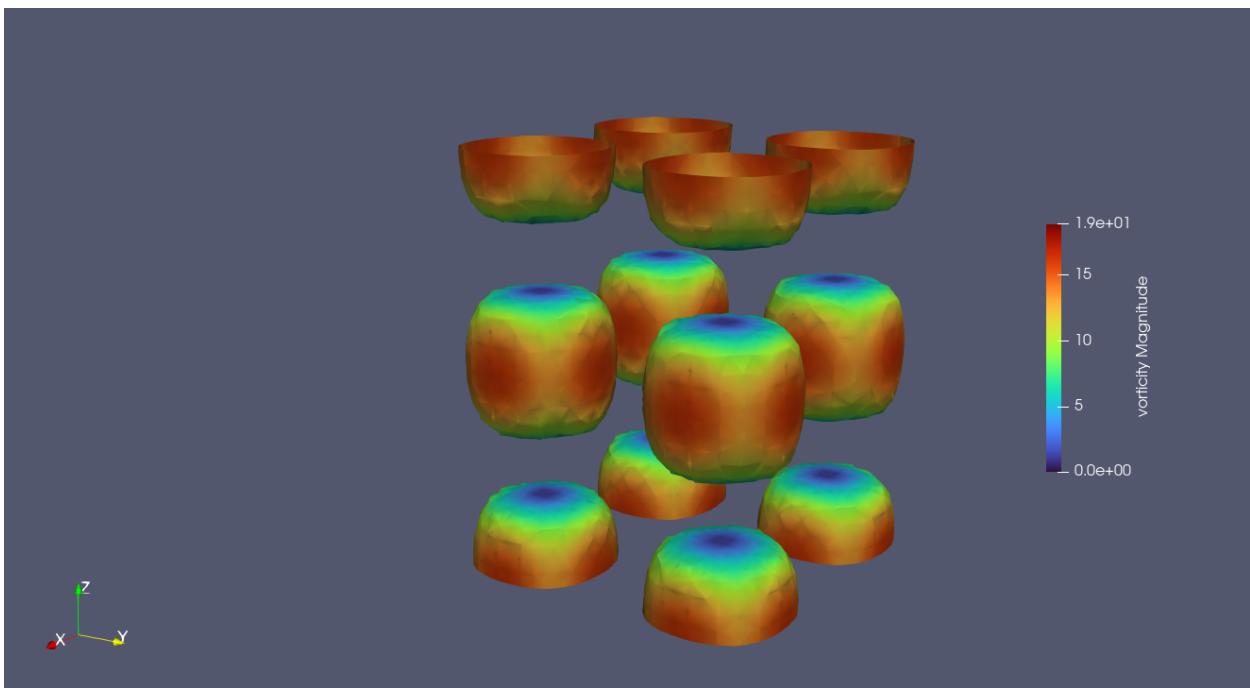


Figura 5.5: Estado inicial del problema tridimensional de Taylor–Green de la ecuación 5.16.

En las figuras 5.6 y 5.7 se muestra la evolución del problema en régimen laminar para  $Re = 50$ . En la figura 5.6 se visualizan las superficies de nivel de la magnitud de velocidad  $\|\mathbf{v}\| = 0,45$  coloreadas con la componente  $z$  de la velocidad. Se puede ver cómo cada superficie reduce su tamaño con el tiempo, hasta desaparecer en los casos de las del centro.

Para tiempos mayores (alrededor del segundo), podemos visualizar en la figura 5.7 las superficies de nivel de velocidad  $\|\mathbf{v}\| = 0,1$ , con la misma escala de colores basada en la velocidad  $v_z$  que en el caso anterior. Vemos cómo el comportamiento descripto anteriormente continúa desarrollándose mientras que las superficies disminuyen su tamaño y se desplazan lentamente, hasta que desaparecen debido a la disipación viscosa en el flujo. Se ve que en este caso se mantiene la simetría en la solución y las estructuras de flujo se disipan paulatinamente.

En la figura 5.8 se pueden apreciar las superficies de nivel de magnitud de velocidad  $\|\mathbf{v}\| = 1,30$  para el caso de  $Re = 1600$  en los primeros pasos de tiempo  $t = [0, 1 - 0, 35]$  coloreados según la componente de velocidad en  $z$ . La escala de  $v_z$  ( $v_z = [-1, 30; 1, 30]$ ) se muestra en la figura 5.9.

Se puede ver cómo cada superficie tiene una velocidad en  $z$  con diferente sentido y en las superficies que se encuentran en el centro de la imagen en ese sentido se desplazan. Las superficies azules ( $v_z = -1, 3$ ) se mueven hacia abajo, mientras que las rojas ( $v_z = 1, 3$ ) hacia arriba. Luego de unas décimas de segundos aparecen otras superficies con velocidad vertical casi nula alrededor del eje de las primeras y en un punto aproximadamente intermedio entre ambas rojas y azules. Estas nuevas superficies en forma de anillos van creciendo con el tiempo

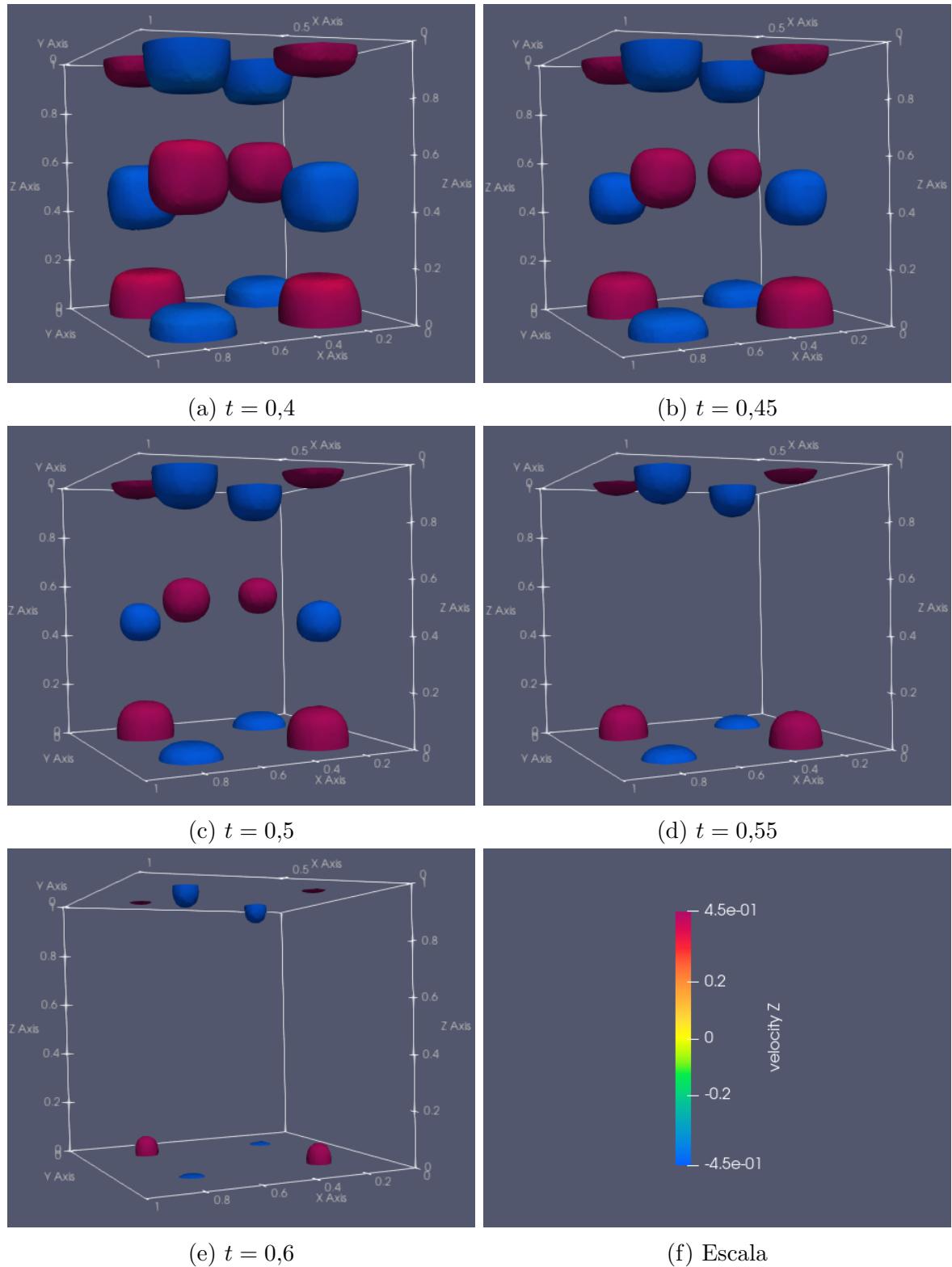


Figura 5.6: Superficies isométricas de magnitud de velocidad 0,45 para  $Re = 50$  en los primeros pasos de tiempo

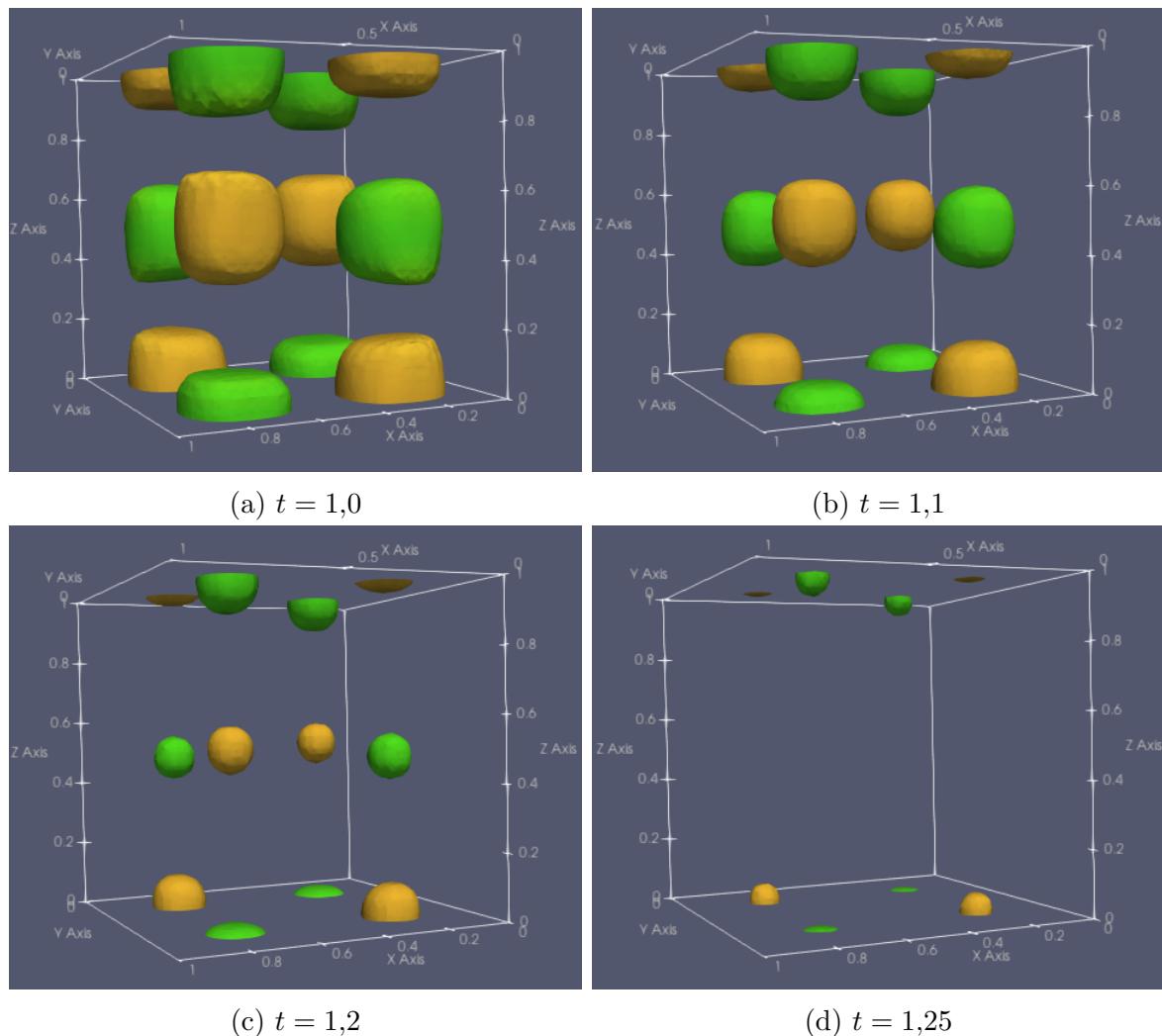


Figura 5.7: Superficies isométricas de magnitud de velocidad 0,1 para  $Re = 50$  en pasos de tiempo más avanzados

mientras las superficies del centro del espacio dejan de existir para esta velocidad. Con el avance del tiempo se observa la aparición de otras estructuras de menores tamaños a partir de los vórtices originales. Esto representa indicios de rompimiento de vórtices e inestabilidades precursores del desarrollo de la turbulencia. La malla utilizada en este caso no puede representar estructuras menores ya que las mismas son disipadas artificialmente por la misma.

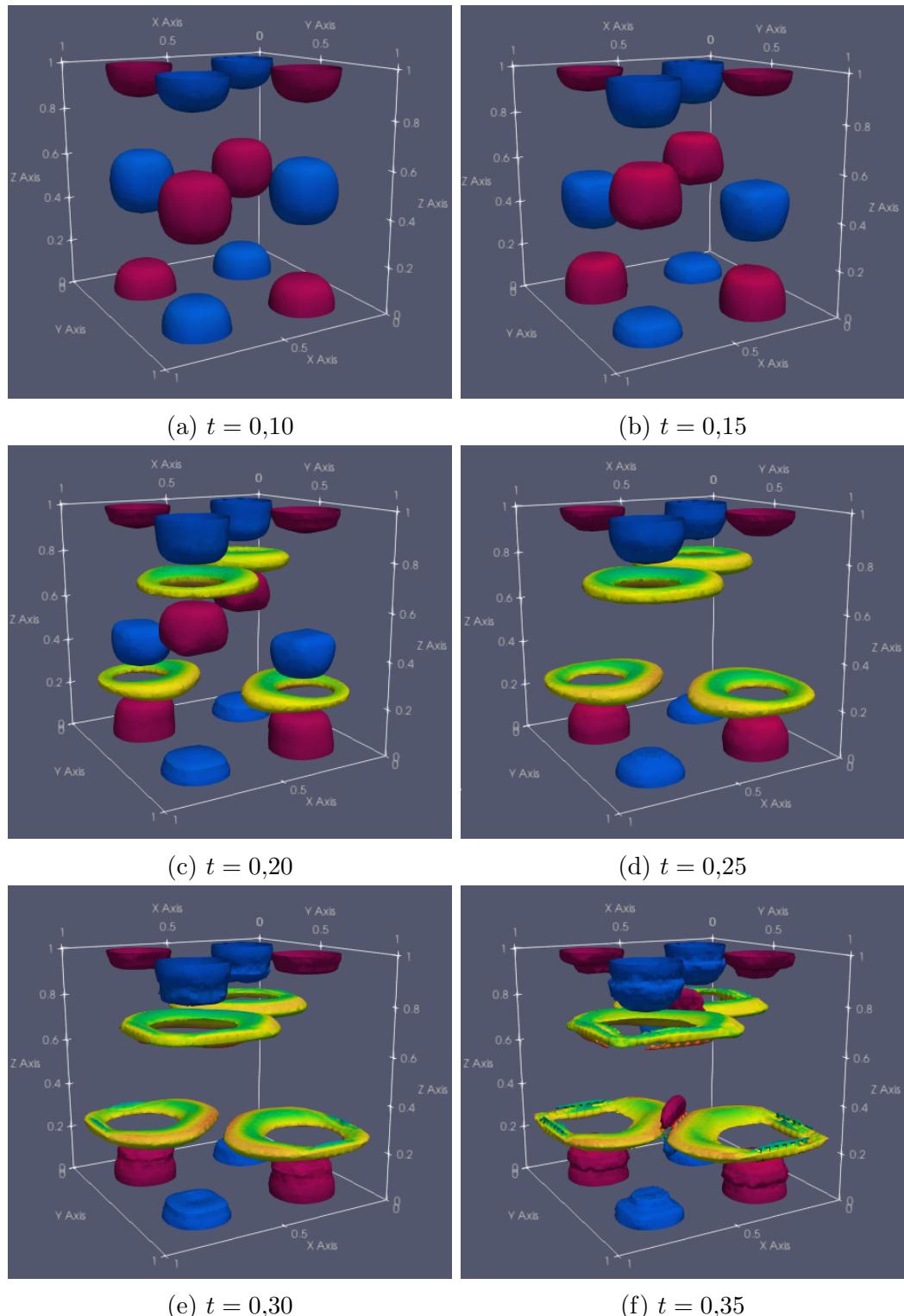


Figura 5.8: Superficies isométricas de magnitud de velocidad 1,30 para  $Re = 1600$  en los primeros pasos de tiempo

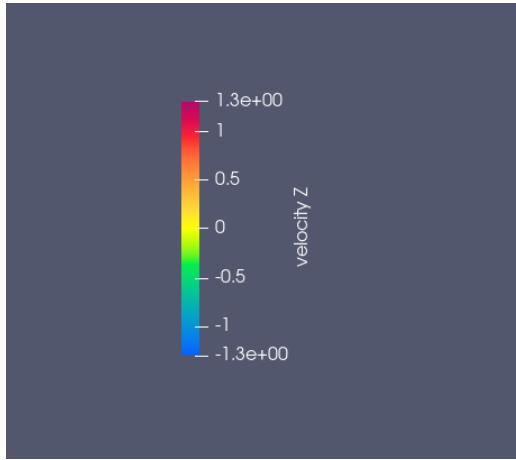


Figura 5.9: Escala de colores de las imágenes de la figura 5.8.

## 5.2. El problema de capa límite

En física y mecánica de fluidos, una capa límite es la delgada capa de un fluido en las inmediaciones de una superficie sólida que fluye a lo largo de la misma. A partir de la superficie, en dirección normal a la misma, la velocidad del flujo aumenta monótonamente hasta alcanzar la velocidad del flujo en el núcleo del fluido. La capa delgada formada por el fluido donde se producen los mayores gradientes de velocidad se denomina capa límite de velocidad. La interacción del fluido con la pared induce una condición de frontera sin deslizamiento (no-slip).

Para continuar con la verificación de la evolución temporal de esta implementación del método KLE, se utilizará el caso de la evolución de una capa límite en una placa infinita que se desarrolla en una región semi-infinita del fluido. La solución analítica de este caso es ampliamente conocida ([Batchelor, 2000](#)). El problema análogo a lo mencionado anteriormente consiste en una placa estática en  $y = 0$  a la que repentinamente se le imprime una velocidad  $U$  con una inclinación  $\alpha$  respecto del eje  $x$ , y dicha velocidad es mantenida a lo largo del tiempo. La solución analítica del campo de velocidades de este problema resulta:

$$v_x = U \cos(\alpha) \operatorname{erf} \left( \frac{y}{\sqrt{4\nu t}} \right), \quad v_y = 0, \quad v_z = U \sin(\alpha) \operatorname{erf} \left( \frac{y}{\sqrt{4\nu t}} \right), \quad (5.18)$$

donde  $\operatorname{erf}$  es la función error,  $y$  es la coordenada vertical, normal a la placa, y  $\nu$  es la viscosidad cinemática.

En este caso la vorticidad resultará:

$$\omega_x = U \sin(\alpha) \frac{-2}{\sqrt{4\nu t \pi}} e^{-\left(\frac{y}{\sqrt{4\nu t}}\right)^2}, \quad \omega_y = 0, \quad \omega_z = -U \cos(\alpha) \frac{2}{\sqrt{4\nu t \pi}} e^{-\left(\frac{y}{\sqrt{4\nu t}}\right)^2}, \quad (5.19)$$

y se puede definir un tiempo adimensional

$$\tau = \sqrt{4\nu t}. \quad (5.20)$$

Para evaluar este problema canónico, se utiliza un dominio cúbico unitario donde se imponen velocidades correspondientes a la solución exacta como condiciones iniciales en todo el cubo y de borde en las caras. Por la particularidad de las ecuaciones que representan la solución analítica, el tiempo no podrá empezar en 0 dado que las mismas presentan una singularidad para este  $\tau$ , por lo que se adopta  $t_0 = 0,0001$ . Con esta configuración, se simuló la solución temporal para mallas de  $n_{elem}$  6, 10 y 20 con  $N_{GL} = 3$ . En la figura 5.10, se procede a graficar las velocidades para estas mallas, a lo largo de una línea vertical en el centro del dominio ( $y > 0$  para  $x = 0,5$  y  $z = 0,5$ ) para diferentes valores del tiempo adimensional  $\tau$  (0.01, 0.2, 0.5 y 0.9) y tomando como velocidad de referencia  $U = 1$ .

Se puede ver cómo, para un  $\tau$  muy pequeño, cuya solución analítica es abrupta, la solución no tiene buena precisión pero rápidamente mejora para mayores  $\tau$  a medida que la solución se vuelve más suave. Por otro lado, cuanto mayor es el refinamiento  $h$  de la malla mejor es la aproximación a la curva de velocidad exacta. En la figura 5.10a puede verse cómo, para  $\tau = 0,01$ , la curva azul, que es la de menor refinamiento, se escapa del gráfico, mientras que la roja se acerca más al escalón que se genera en la velocidad exacta, y la curva verde, ya con  $n_{elem}$  del doble que la anterior, tiene un comportamiento muy similar a la curva negra. En la figura 5.10b, para  $\tau = 0,2$ , se distingue una gran diferencia entre la curva azul, de  $n_{elem} = 6$ , y la solución analítica; mientras que para las mallas de  $n_{elem} = 10$  y  $n_{elem} = 20$  las velocidades se comportan de manera muy parecida, siendo la de mayor refinamiento la más cercana a los valores exactos. Este mismo comportamiento se puede apreciar para valores de  $\tau = 0,5$  y  $\tau = 0,9$  en las figuras 5.10c y 5.10d respectivamente. De esta manera se verifica que el algoritmo se comporta de la manera prevista.

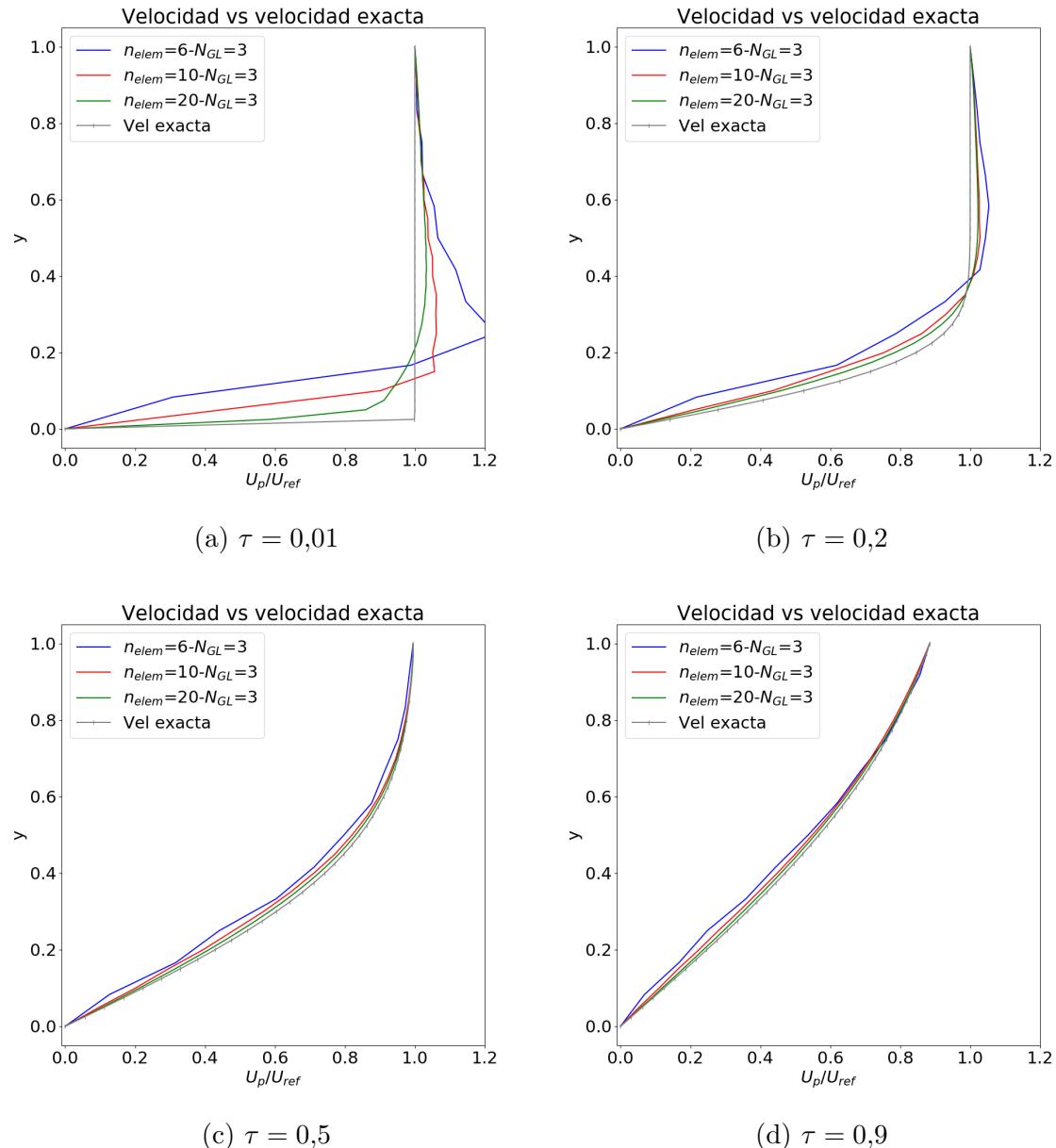


Figura 5.10: Velocidad calculada para cada malla comparada con la velocidad exacta para la linea  $y > 0$ ,  $x = 0,5$  y  $z = 0,5$

## 5.3. Flujo en una cavidad forzado por el deslizamiento de la tapa

El fluido en una cavidad impulsado por el movimiento de la tapa (conocido por su nombre en inglés *lid-driven cavity*) es un importante problema fluidomecánico que sirve de referencia para probar métodos numéricos (lo que se conoce como *benchmark*) y para estudiar aspectos fundamentales de los flujos incompresibles. Debido a la simplicidad de su configuración, la cavidad impulsada por la tapa se ha investigado ampliamente, se ha empleado como un problema numérico de referencia y como banco de pruebas para el estudio de determinados efectos físicos.

Haciendo referencia a la trayectoria histórica de las investigaciones numéricas, este problema resalta desde los inicios. Tras las primeras investigaciones numéricas de Kawaguti (1961) y Burggraf (1966), la búsqueda de eficiencia y precisión comenzó con los trabajos de Ghia et al. (1982) y Schreiber y Keller (1983), que calcularon el flujo bidimensional estacionario para un número de Reynolds de hasta  $10^4$  en una cavidad cuadrada delimitada por tres paredes rígidas y una tapa que se mueve con velocidad constante. Koseff y Street realizaron una serie de experimentos físicos sobre el flujo en cavidades tridimensionales con diferentes longitudes en la tercera dimensión, muchos de los cuales fueron resumidos en Koseff y Street (1984). Estos resultados experimentales y las cuestiones abiertas, impulsaron la definición de casos de prueba tridimensionales específicos que fueron investigados numéricamente por diferentes grupos de investigación, una recopilación de los resultados se presenta en Deville et al. (1992). Luego, Kuhlmann y Román (2019) analizaron diferentes casos y sus singularidades. Más adelante fue presentada una nueva recopilación realizada por Shankar y Deshpande (2000), en el mismo año en que Žunić et al. (2000) estudiaron, para varios números de Reynolds elevados, el ejemplo cúbico tridimensional de la lid–driven cavity. Dada la simplicidad del problema, la cantidad de referencias que se encuentran y la evolución del campo y las diferentes técnicas empleadas, deviene en que este problema fue y continúa siendo activamente investigado por una numerosa cantidad de personas a lo largo de estos años.

En el presente trabajo se utilizarán dos ejemplos para la verificación del algoritmo (Ghia et al. (1982) para el problema de la cavidad bidimensional y Žunić et al. (2000) para el tridimensional) y luego se investigarán otros problemas en volúmenes confinados, como diferentes tipos de movimientos tangenciales de diferentes tapas, o volúmenes tanto cúbicos como prismáticos, para observar cómo se comporta el fluido ante estos cambios.

### 5.3.1. Verificación del problema bidimensional

Como base para el desarrollo tridimensional de las implementaciones de condiciones de borde no-slip, en primera instancia se simulará la versión bidimensional del problema de la

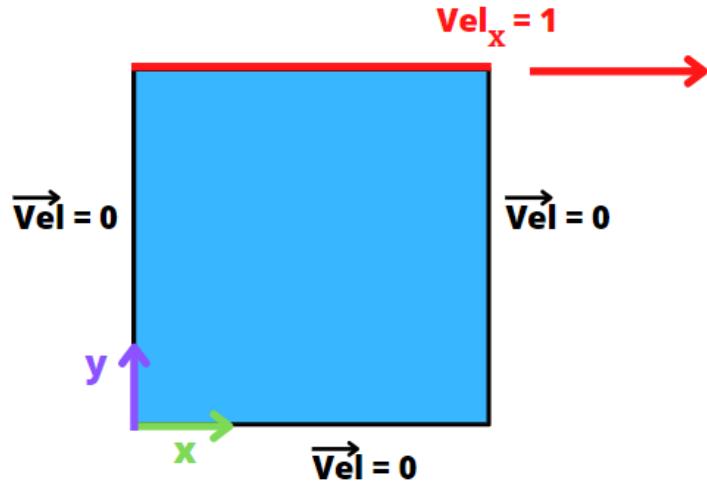
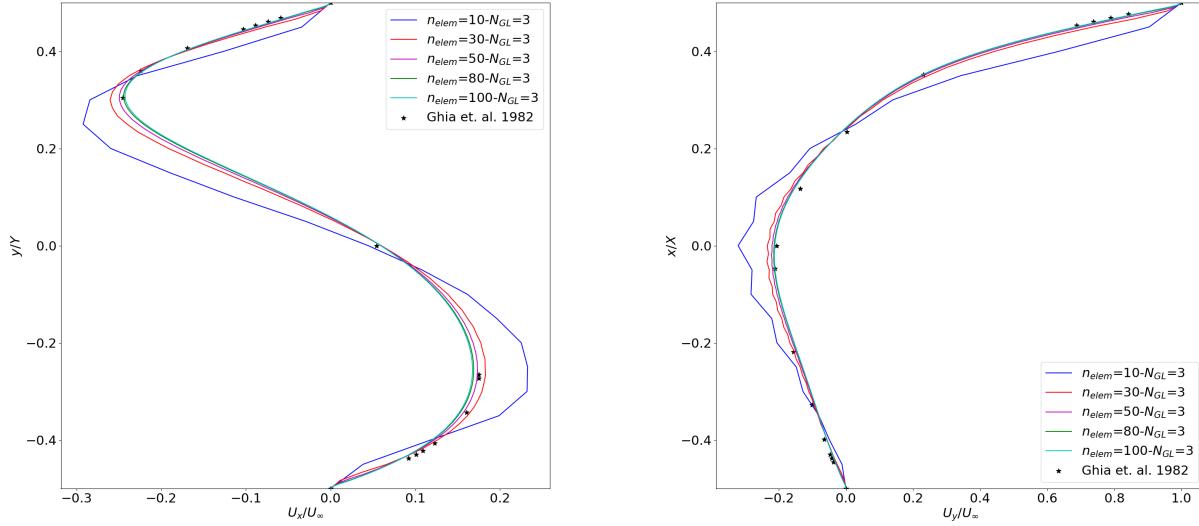


Figura 5.11: Esquema del problema de flujo en una cavidad forzado por el deslizamiento de la tapa.

cavidad, a fin de evaluar la capacidad del método KLE en este caso. Para ello se utiliza la implementación bidimensional del mismo, de la cual se partió para los desarrollos de esta tesis. Como se mencionó anteriormente, este problema presenta la particularidad de tener una solución conocida experimental y contra ella se contrastarán los resultados.

La figura 5.11 muestra un esquema de la configuración del problema. En este caso, se lo plantea en un dominio bidimensional cuadrado, en el cual un fluido se encuentra confinado, bordeado por tres paredes que no se mueven y una tapa superior que se mueve con velocidad tangencial constante. El mismo se resolvió con el algoritmo propuesto por este trabajo para ser contrastado con los resultados numéricos obtenidos en Ghia et al. (1982), donde se presentan las curvas de velocidad obtenidas sobre los ejes medios del cuadrado. Sin embargo, en la práctica se seguirá tomando el centro de coordenadas en la esquina inferior izquierda, como se viene haciendo en todo el trabajo, y se utilizarán los ejes medios como en Ghia et al. (1982) para graficar y verificar más explícitamente. El caso testigo mencionado corresponde a un  $Re = 100$  y velocidad tangencial  $v_x = 1$  en el contorno superior ( $y = 1$ ). En la resolución numérica de este caso por medio del método KLE, se aplican condiciones de contorno no-slip en todos los contornos, con velocidad nula salvo la mencionada anteriormente y condición inicial de vorticidad también nula.

En la figura 5.12 se observan las curvas de velocidad sobre los ejes de simetría horizontal y vertical del dominio. Se han corrido mallas con  $N_{GL} = 3$  con número variable de elementos en cada dirección ( $n_{elem}$ ). Se observa cómo para mallas más ralas, con valores menores de  $n_{elem}$ , los resultados divergen de forma considerable de los definidos por las estrellas del resultado de



(a) Velocidad horizontal muestreada sobre el eje vertical  $x = 0$ ,  $-0,5 \leq y \leq 0,5$

(b) Velocidad vertical muestreada sobre el eje horizontal  $y = 0$ ,  $-0,5 \leq x \leq 0,5$

Figura 5.12: Curvas de velocidad sobre los ejes de simetría del dominio.

Ghia et al. (1982), incluso las curvas no son suaves. Para  $n_{elem} = 30$  los resultados mejoran bastante, y para  $n_{elem}=50$  la curva aproxima todos los puntos de los resultados de Ghia et al. (1982) con una discrepancia indistinguible.

A continuación, se procede a visualizar cómo se comporta el fluido en todo el dominio en el estado estacionario. En la figura 5.13, se grafican las líneas de corriente resultantes para la malla de  $n_{elem} = 100$ ,  $N_{GL} = 3$ , con  $Re = 100$  y  $v_x = 2$  en  $y = 1$ , coloreadas por la magnitud de la velocidad. Se puede ver un remolino, desplazado del centro del eje  $x$  hacia donde se está moviendo la tapa superior, en  $x$  positivo, cuyo centro se encuentra en  $0,7 \leq y \leq 0,8$ . Las líneas de corriente siguen el remolino, salvo en las esquinas inferiores donde se generan remolinos secundarios de una velocidad más pequeña.

De esta manera se da por verificada la implementación bidimensional, con condiciones de borde no-slip, por lo que se tomará como punto de partida para la implementación tridimensional en la presente tesis, que se desarrollará en la sección 5.3.2

### 5.3.2. Verificación del problema tridimensional

Tras esta verificación bidimensional, se abordará la verificación del problema tridimensional. Un recipiente cúbico o cúbico rectangular es una de las geometrías confinadas más elementales en las que se puede estudiar el movimiento de los fluidos. La fuerza motriz mecánica más sencilla que actúa sobre un fluido viscoso con densidad constante y que deja intacto el dominio es el

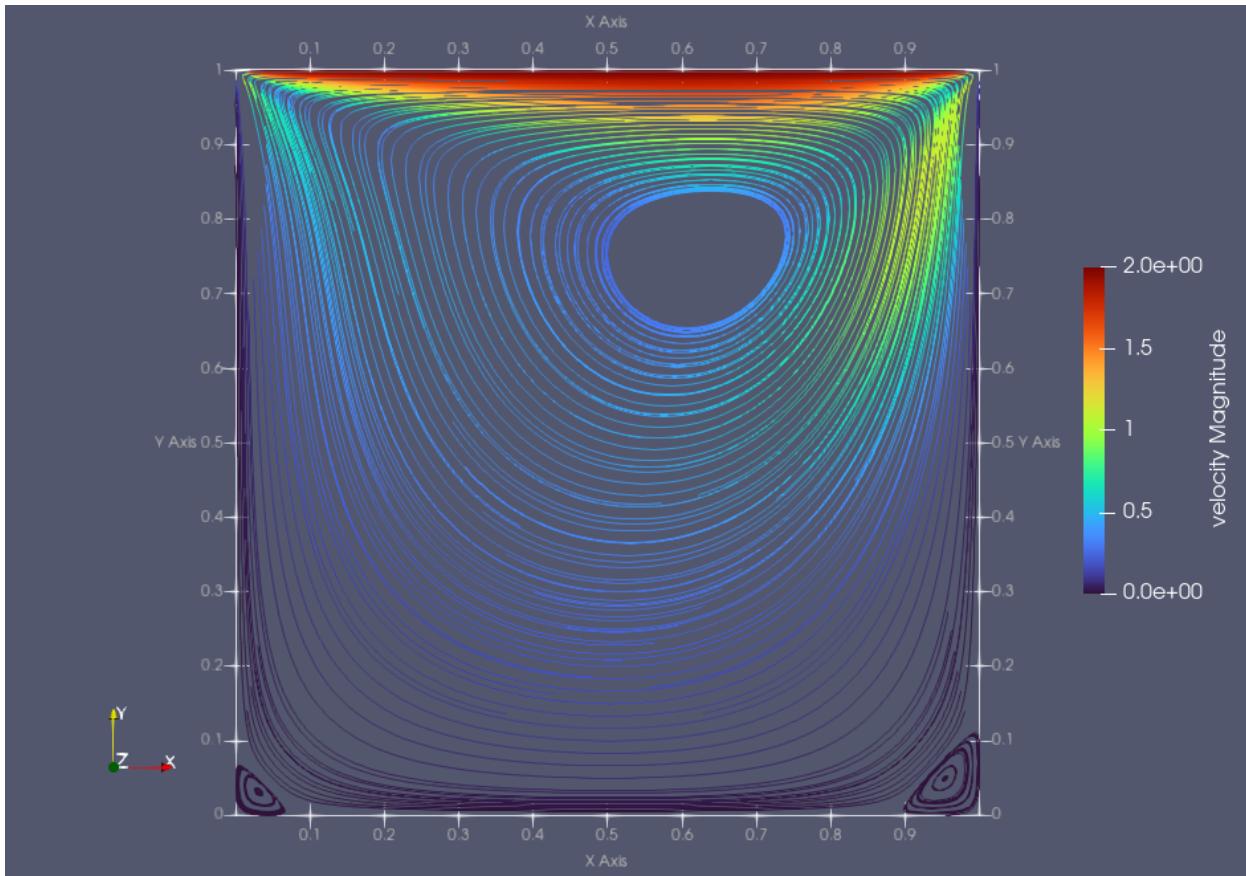


Figura 5.13: Líneas de corriente.

movimiento tangencial en el plano de una pared delimitadora. Un cubo en el que una de las paredes sólidas se mueve en dirección tangencial a sí misma se denomina cavidad impulsada por la tapa (lid–driven cavity).

[Žunić et al. \(2000\)](#) resolvieron este problema combinando el Método de Elementos de Contorno (BEM, por sus siglas en inglés *Boundary Element Method*) y Método de Elementos Finitos (*Finite Element Method* o FEM) en un algoritmo numérico para obtener la solución de velocidad y vorticidad. En el presente trabajo se utiliza esta referencia bibliográfica para contrastar los resultados de esta nueva implementación en el caso tridimensional para  $Re = 100$  y velocidad tangencial  $v_x = U_{ref} = 2$  en el borde  $y = 1$ . Todas las caras tendrán condiciones de borde no-slip y, salvo en la mencionada anteriormente, el resto de las paredes permanecerán inmóviles. En la figura 5.14 se muestra un esquema del problema.

En la figura 5.15 se presentan superficies de nivel de la magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = \sqrt{\frac{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}{U_{ref}^2}} = 0,13$  del problema de la cavidad impulsada por la tapa. En la figura 5.15a se muestra el resultado de esta nueva implementación que se compara contra el de [Žunić et al. \(2000\)](#) en la figura 5.15b. En este caso se puede apreciar que las superficies de nivel coinciden tanto en su morfología como en las posiciones de sus puntos característicos (mínimos, puntos de

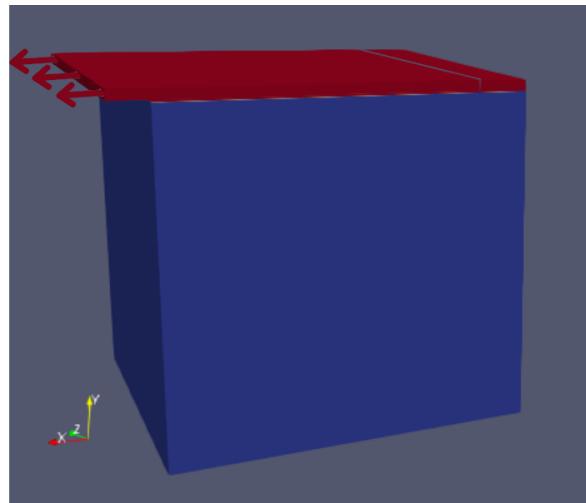
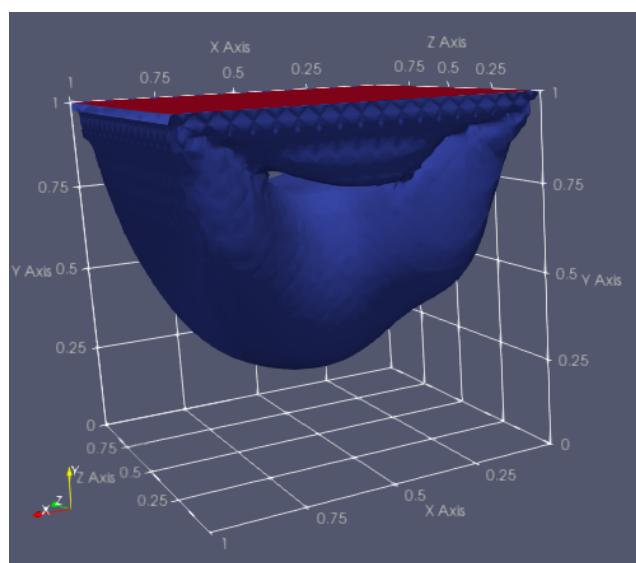
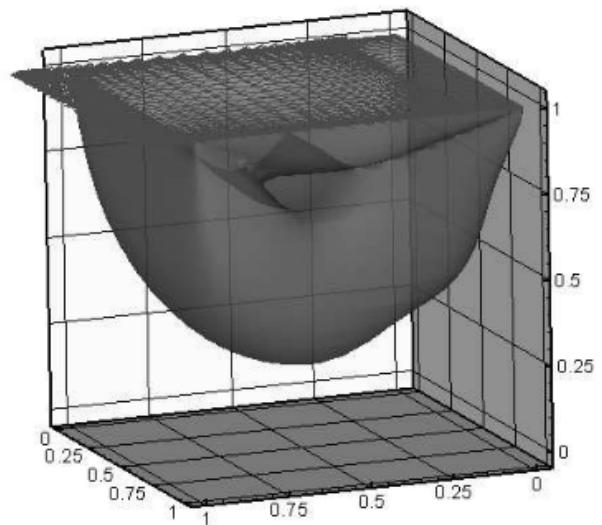


Figura 5.14: Distribución de velocidades en los contornos de la cavidad. Dominio tridimensional.



(a) Corrida



(b) Datos de Žunić et al. (2000)

Figura 5.15: Superficie isométrica con  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$

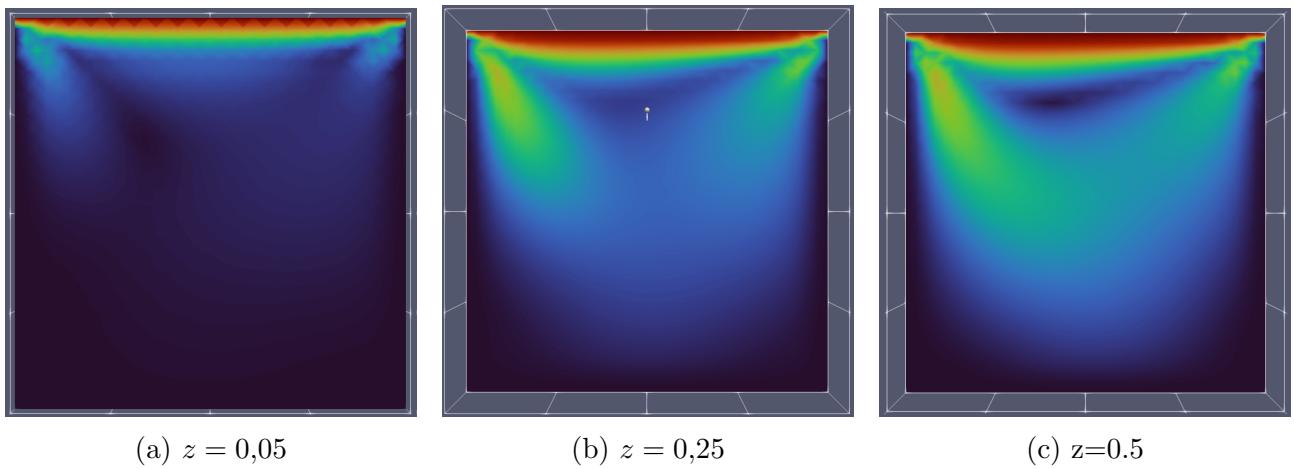


Figura 5.16: Magnitud de la velocidad sobre planos verticales en diferentes posiciones de  $z$ .

inflexión, etc.). Las superficies son simétricas respecto del plano  $z = 0,5$ . El punto más bajo de las mismas se sitúa en el centro del espacio, tanto en  $x$  como en  $z$ , y se encuentra a una altura menor de 0,25 en la coordenada  $y$ . Del lado izquierdo de la imagen ( $x > 0,5$ ), en ambos casos se observa que la superficie desciende abruptamente, mientras que del lado derecho ( $x < 0,5$ ) se genera una leve ondulación en la parte central de dicho lateral. En tanto, acercándose al extremo superior ( $y \approx 0,75$ ), ambas superficies se ahuecan hacia el centro del eje  $z$ . De esta manera queda verificado el comportamiento de la nueva implementación tridimensional, evolucionado en el tiempo con condiciones de borde no-slip.

Asimismo, para el presente caso se muestran diferentes visualizaciones de la solución para obtener una visión más completa del mismo. Aprovechando que el problema es simétrico respecto del plano  $z = 0,5$ , en la figura 5.16 se muestran tres planos con cortes entre  $z = 0$  y  $z = 0,5$  con la magnitud de la velocidad de la solución. Dicha magnitud de velocidad está representada por la escala de colores que se puede apreciar en la figura 5.17. Esto permite comprender la variación del campo de velocidades en el espacio al acercarse a una de las paredes laterales.

Nuevamente aprovechando la simetría del problema, en la figura 5.17 se muestra en la mitad del cubo un corte donde se visualiza la magnitud de la velocidad, y en la otra mitad las líneas de corriente. Se aprecia cómo a medida que se acerca a la pared en  $z = 0$  se genera un remolino, a una velocidad muy pequeña.

En las secciones siguientes se ahondará en diferentes casos que comparten la característica de ser volúmenes confinados impulsados por el movimiento tangencial de uno o varios muros delimitadores o paredes, con esta o diferentes geometrías.

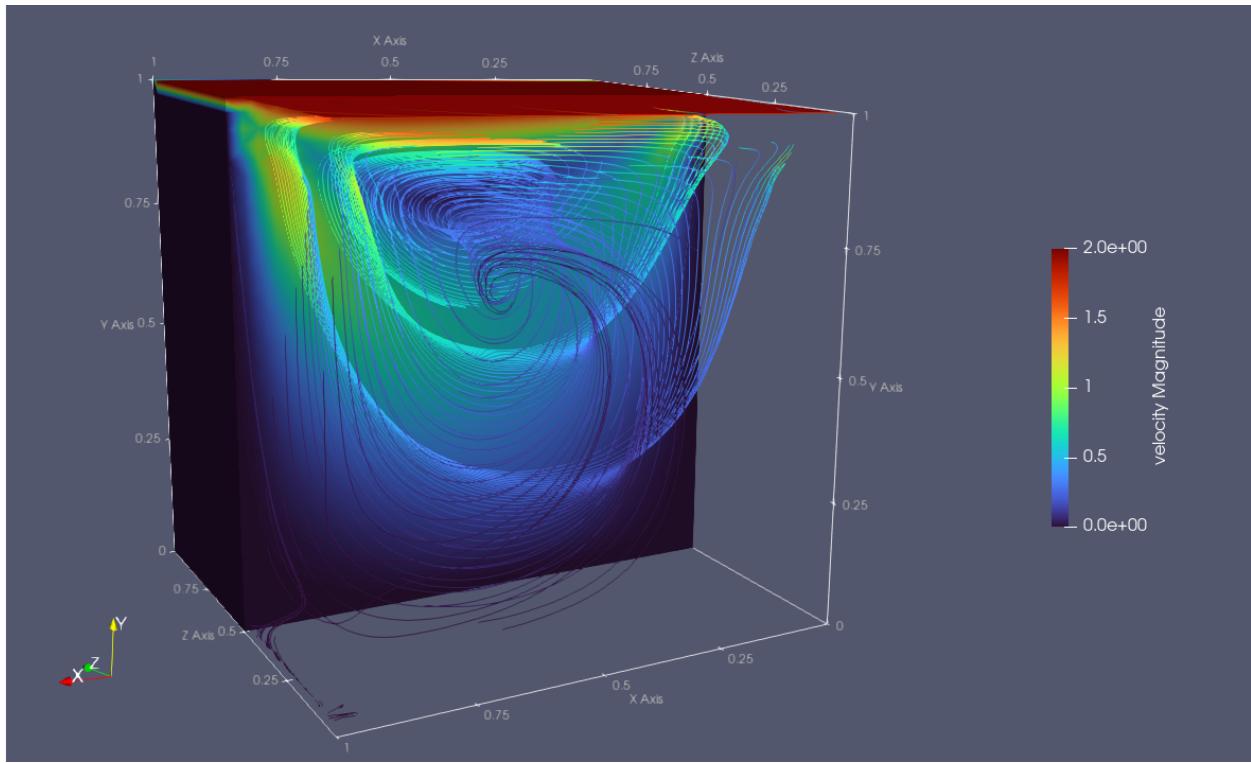


Figura 5.17: Líneas de corriente y magnitud de la velocidad sobre el plano central.

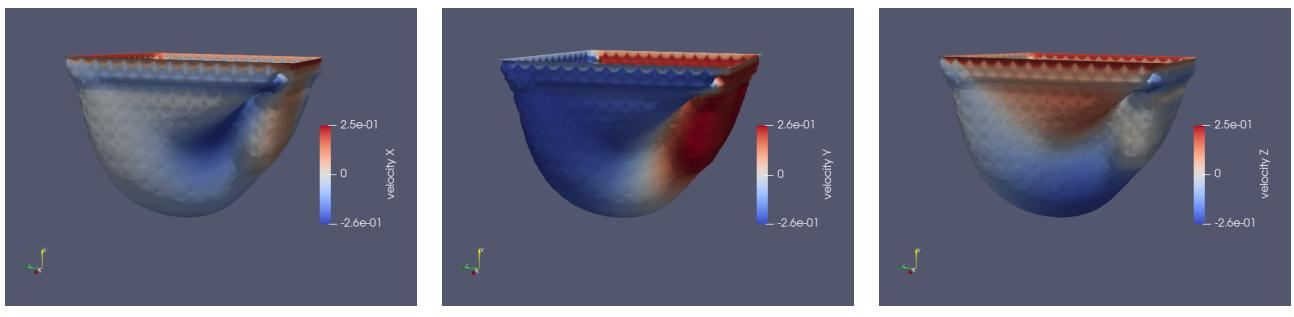
## 5.4. Flujos en cavidad con configuraciones no convencionales

En esta sección, tomando como base el problema de la cavidad descripto anteriormente, de un flujo confinado en un dominio cúbico donde una tapa se desliza tangencialmente en una sola dirección paralela a las caras frontal y posterior, se exploran otros problemas donde se varía la configuración. En las próximas subsecciones se analizan resultados en casos donde el movimiento forzante no es paralelo a los ejes principales del problema, otros donde el movimiento se da en más de una cara y algunos donde la geometría del dominio no es cúbica.

### 5.4.1. Tapa superior con movimiento en diagonal

En este caso se impone a la cara superior ( $y = 1$ ) una velocidad a 45 grados respecto del eje  $x$ , por lo que tendrá componente no nula tanto en la dirección  $x$  como en la  $z$ . Tal como en el caso base, se adopta un  $Re = 100$ , a fin de comparar ambos flujos.

En la figura 5.18 se grafica la misma superficie de nivel de magnitud de la velocidad ( $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ ), donde puede apreciarse una forma similar a la descripta en la figura 5.15a. Sin embargo, no se divisa el remolino del medio en esta superficie por estar próximo a una de las esquinas.

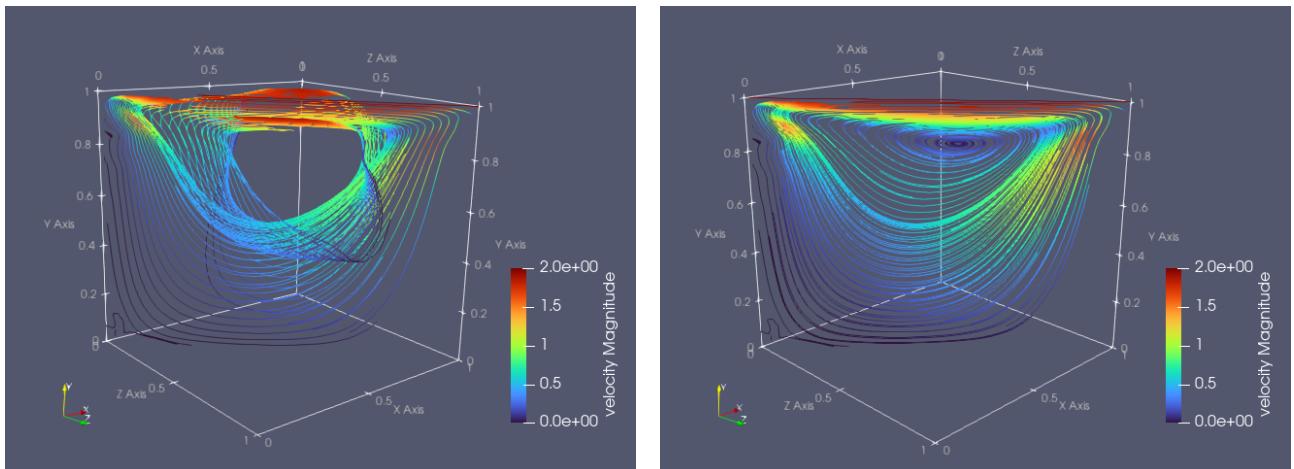


(a) Velocidad en x

(b) Velocidad en y

(c) Velocidad en z

Figura 5.18: Flujo en un cavidad forzada por movimiento diagonal de la tapa: superficie de nivel de magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ , coloreada según las distintas componentes de velocidad.



(a) Semillas de las líneas de corriente en todo el volumen.

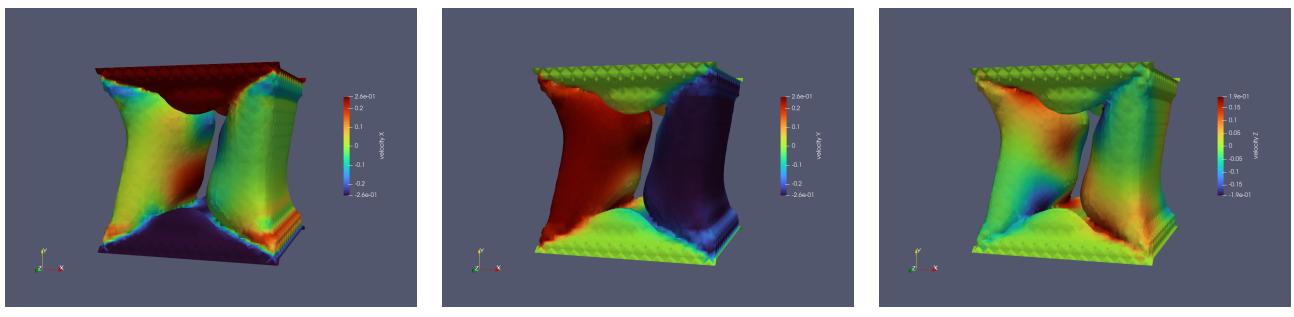
(b) Semillas solo en el plano diagonal.

Figura 5.19: Líneas de corriente del problema de la cavidad con tapa moviéndose en dirección diagonal.

Para apreciar mejor las características tridimensionales del flujo, en la figura 5.19 se grafican las líneas de corriente. Se observa que, al tener ahora paredes en diferente dirección a la velocidad de la tapa, la forma del movimiento cambia considerablemente. Si bien se sigue formando un remolino en la parte superior, es más amplio y se deforma al llegar la esquina. Se puede apreciar que ahora la simetría del problema se da respecto del plano diagonal paralelo a la dirección de flujo.

#### 5.4.2. Tapas superior e inferior con movimiento en sentido opuesto

Se propone ahora analizar el caso donde dos de las tapas opuestas se desplazan en sentido contrario y con la misma magnitud de velocidad. Siguiendo con el análisis para  $Re = 100$ ,



(a) Velocidad en x      (b) Velocidad en y      (c) Velocidad en z

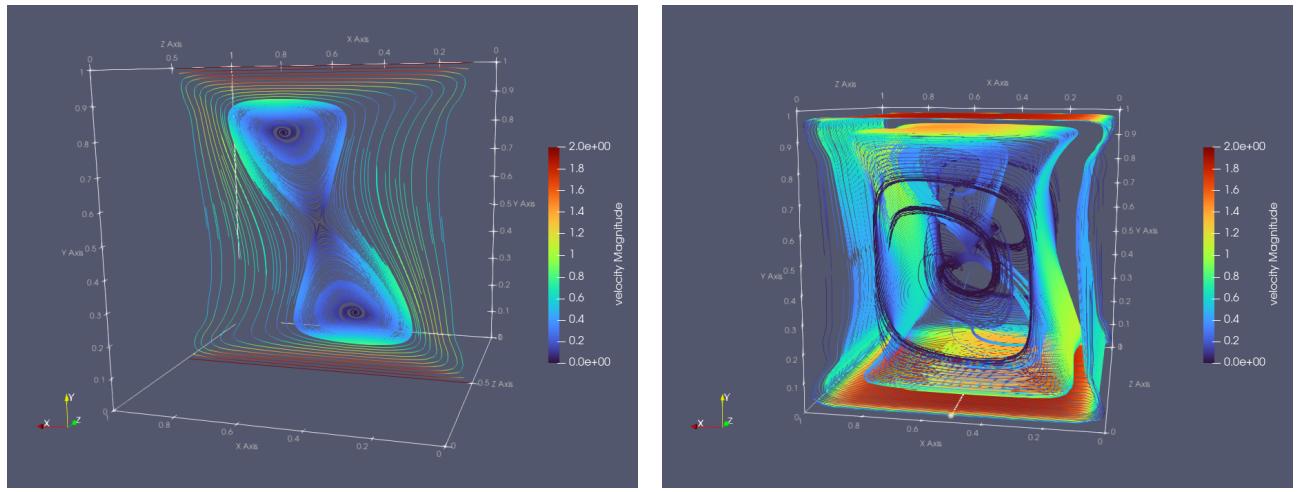
Figura 5.20: Flujo en un cavidad, tapas con movimiento opuesto: superficie de nivel de magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ , coloreada según las distintas componentes de velocidad.

se analiza la superficie de nivel de magnitud de la velocidad ( $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ ) en la figura 5.20. Cada subfigura está coloreada en función de la velocidad en cada dirección para apreciar la particularidad de este problema. En el mismo se observa que la superficie presenta cuatro partes bien definidas. En las dos más cercanas a las tapas predomina la velocidad horizontal ( $v_x$ ), mientras que en las dos partes verticales predomina la velocidad vertical ( $v_y$ ). Al agregar una pared más en movimiento, el caso ya no tiene la forma característica que se venía visualizando.

Con el fin de poder mostrar la tridimensionalidad del problema, las siguientes figuras del caso se mostrarán con el eje  $x$  apuntando en el sentido contrario a las figuras previamente analizadas.

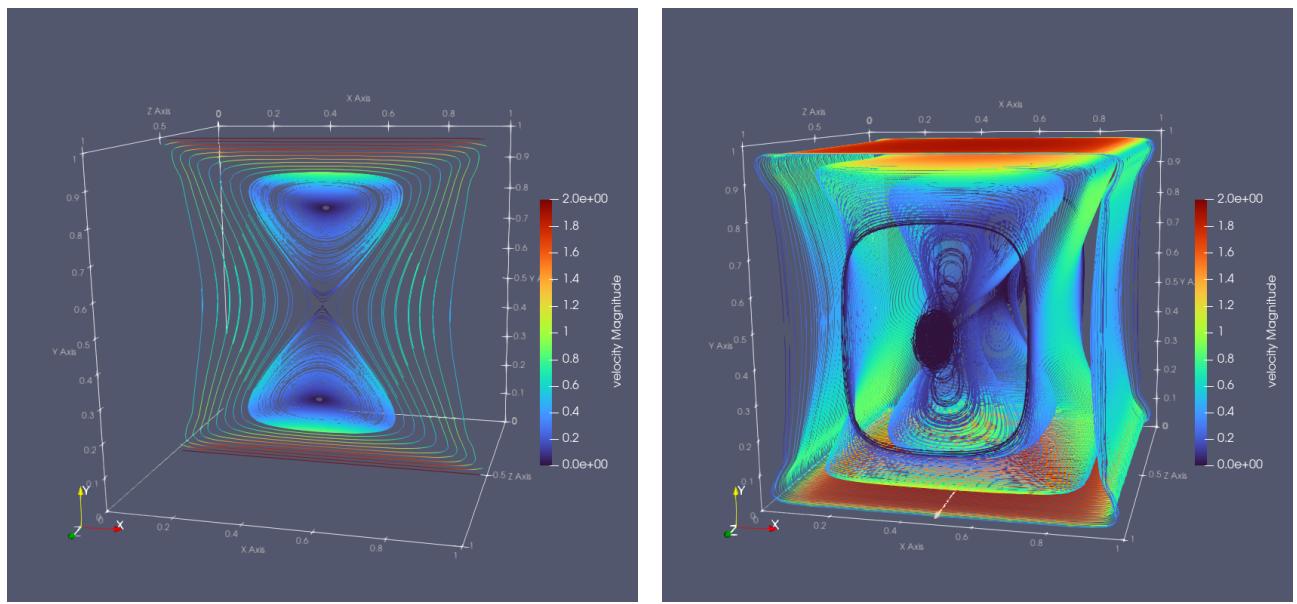
Para tener una mejor apreciación se grafican en la figura 5.21 las líneas de corriente. En la figura 5.21a se observan las líneas de corriente para el plano central de la cavidad, donde se puede ver que se generan dos remolinos, uno en la parte inferior y otro en la superior, ambos aproximadamente en  $x = 0,5$  pero con un leve desplazamiento hacia la dirección en que se mueve la tapa más cercana. También se puede observar en la figura 5.21b que en las cercanías de las paredes  $z = 0$  y  $z = 1$  se generan remolinos en el centro del dominio con velocidades muy pequeñas. De esta manera se configura la topología general del flujo en el problema de la cavidad, motorizada por el movimiento de dos paredes enfrentadas, en igual dirección y sentido contrario.

Hasta el momento se presentaron resultados para flujos con  $Re = 100$  de acuerdo al caso base presentado anteriormente. Para analizar la influencia de este número adimensional en las características del flujo, a continuación se presentan resultados para un valor menor,  $Re = 1$ . En la figura 5.22 se grafica de forma análoga a la figura 5.21 y se puede ver cómo el flujo adquiere una forma similar, pero con menores desplazamientos de los centros de los remolinos. Se pueden observar ahora los remolinos sobre el eje medio de la cavidad.


 (a)  $z = 0.5$ 

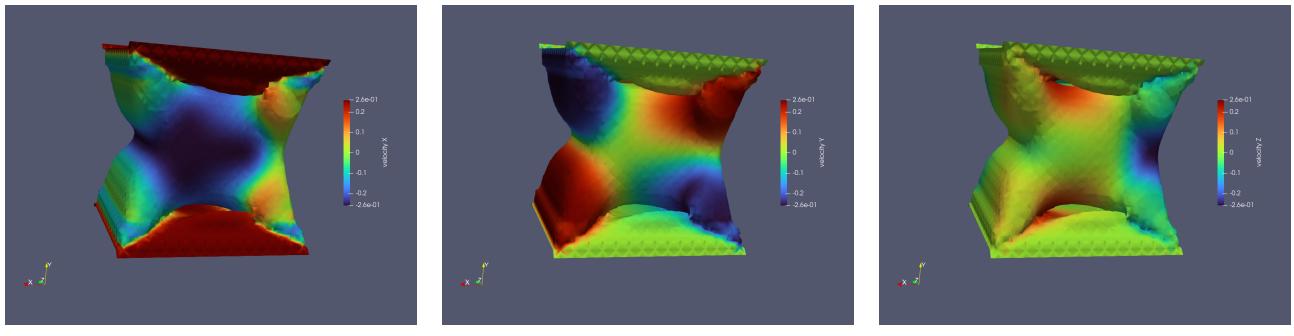
(b) Dominio completo

Figura 5.21: Flujo en un cañón, tapas con movimiento opuesto: líneas de corriente.


 (a)  $z = 0.5$ 

(b) Dominio completo

Figura 5.22: Flujo en un cañón, tapas con movimiento opuesto,  $Re = 1$ : líneas de corriente.



(a) Velocidad en x

(b) Velocidad en y

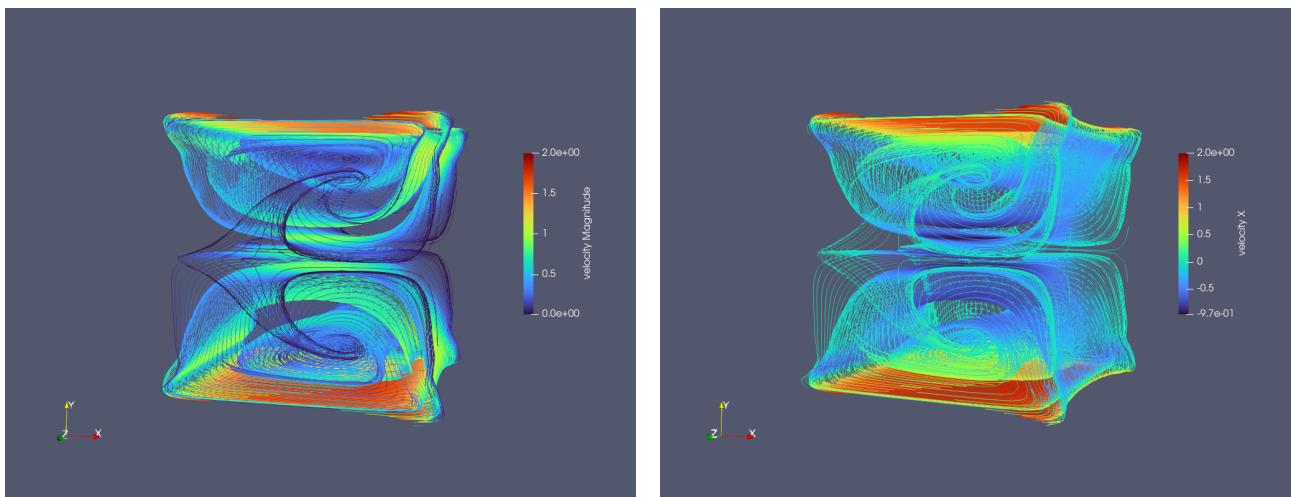
(c) Velocidad en z

Figura 5.23: Flujo en una cavidad, tapas con movimiento en la misma dirección: superficie de nivel de magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ , coloreada según las distintas componentes de velocidad.

#### 5.4.3. Tapa superior e inferior moviéndose en el mismo sentido

Se analizará ahora el mismo problema que en la sección anterior, donde tanto en la capa superior ( $y = 1$ ) como en la inferior ( $y = 0$ ), la velocidad tendrá igual módulo y dirección, con la salvedad de que el sentido será el mismo ( $v_x = 2$ ,  $v_y = 0$  y  $v_z = 0$ ). Tal como en el problema anterior, la cavidad es cúbica, el resto de las paredes están quietas y se analiza el caso para  $Re = 100$ . El problema se deja evolucionar en el tiempo hasta la convergencia de la solución.

En la figura 5.23 se puede ver cómo las superficies de velocidad cambian rotundamente, lo que lo diferencia del problema anterior. Sin embargo, se puede visualizar el ahuecamiento en el centro cercano a la tapa que se mueve como se vio en la figura 5.15, el primer ejemplo tridimensional. Con el fin de poder mostrar la tridimensionalidad del problema, las siguientes figuras del caso se mostrarán con el eje  $x$  apuntando en el sentido contrario a las figuras previamente analizadas. Visualizando las líneas de corriente en la figura 5.24 se pueden apreciar con más claridad los dos remolinos que tienen lugar en la cavidad, permitiendo observar una simetría respecto del eje  $y$ .



(a) Coloreadas según la magnitud de la velocidad

(b) Coloreadas según la velocidad en  $x$ 

Figura 5.24: Flujo en un cavidad, tapas con movimiento en la misma dirección: líneas de corriente.

#### 5.4.4. Cavidad rectangular horizontal

A continuación se analiza el efecto del cambio de forma en la cavidad sobre el flujo. Hasta el momento sólo se mostraron ejemplos para cavidades cúbicas; en lo que sigue se muestra el flujo cuando la cavidad es rectangular. Para ello, partiendo del caso base con  $Re = 100$  y solamente la tapa superior en  $y = 1$  deslizándose en dirección  $x$ , se utiliza un dominio tridimensional donde la dimensión en la dirección del flujo (a lo largo de la coordenada  $x$ ) triplica las otras 2 dimensiones del problema.

Para poder comparar con los casos anteriores, se muestra, en la figura 5.25, el gráfico de la misma superficie de nivel de magnitud de velocidad constante  $|v| = 0,13$ . En este caso, se puede observar cómo el punto más bajo de esta superficie, que antes se ubicaba en el centro del dominio ( $x = 0,5$ ), ahora se desplaza en la dirección que se mueve la tapa. El problema sigue siendo simétrico respecto del eje  $z$  y se sigue viendo la separación de la burbuja. En las distintas imágenes de la figura se colorea la superficie según las distintas componentes de la velocidad. Para ilustrar el carácter tridimensional del problema, se muestra el modelo con las coordenadas apuntando en distinta dirección, con la coordenada  $x$  en sentido contrario respecto de las imágenes anteriores. En la figura 5.26, aprovechando la simetría del problema, se grafican tanto la magnitud de la velocidad en el plano medio del dominio como las líneas de corrientes de la mitad frontal del mismo. De esta manera podemos tener una visualización general del flujo del fluido dentro de esta cavidad.

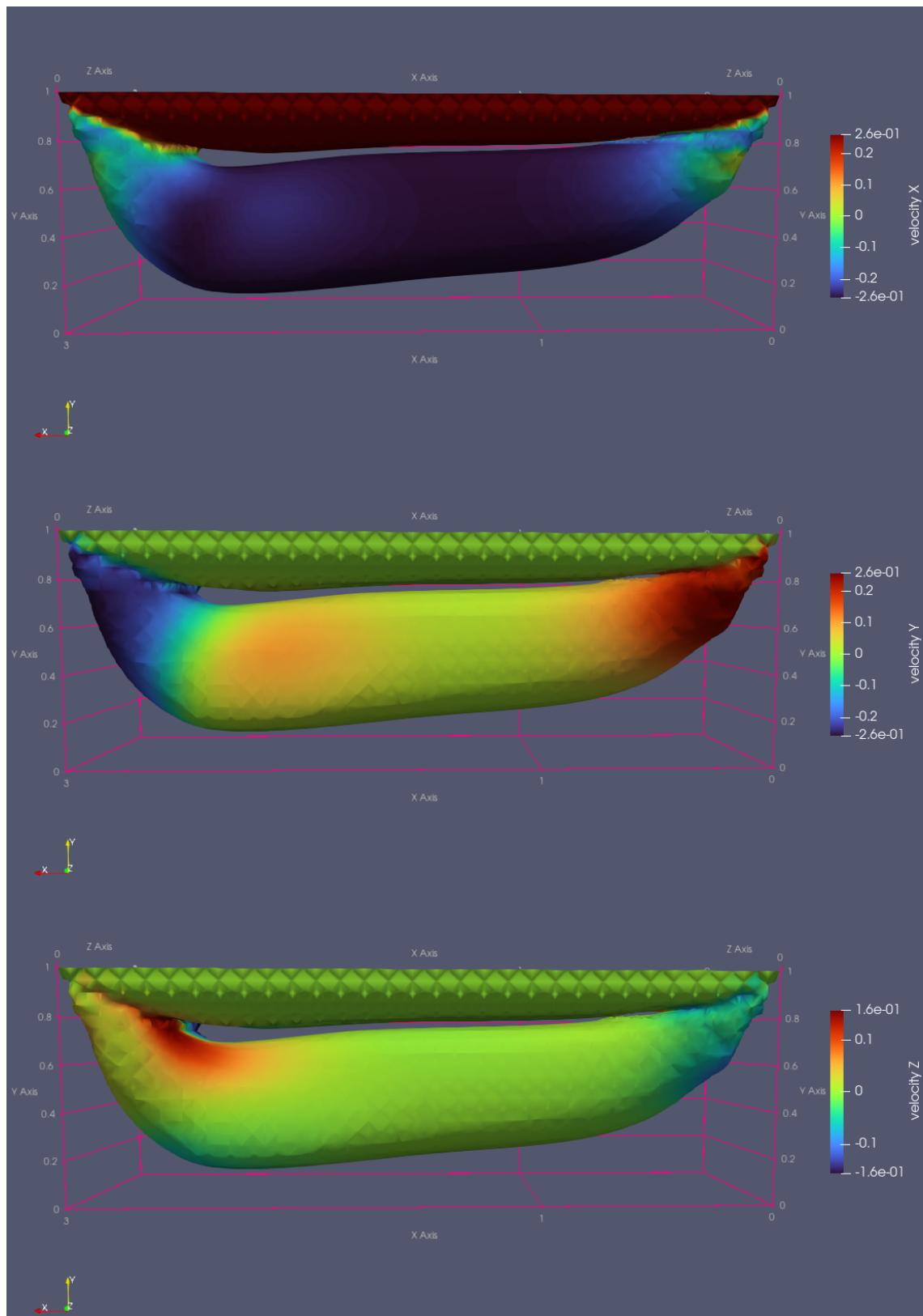


Figura 5.25: Flujo en un cavidad rectangular horizontal: superficie de nivel de magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ , coloreada según las distintas componentes de velocidad.

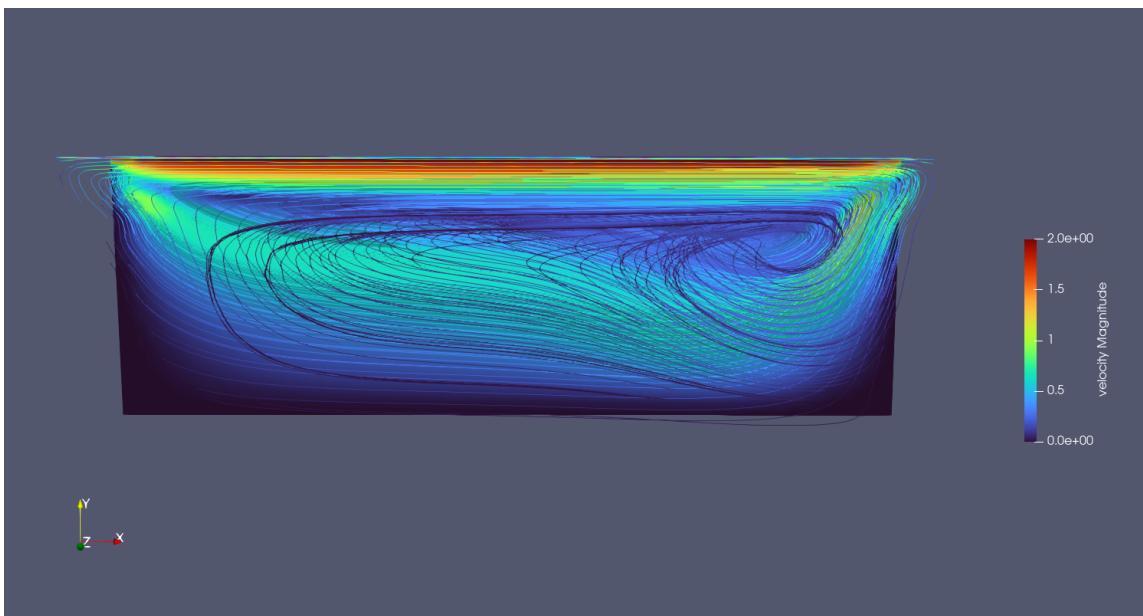


Figura 5.26: Flujo en un cavidad rectangular horizontal: líneas de corriente.

#### 5.4.5. Cavidad rectangular vertical

Se propone ahora analizar el flujo en una cavidad no cúbica, pero en este caso la dimensión extendida será la vertical. Así se define un nuevo dominio con la dirección  $y$  3 veces más larga que las otras, por lo que ahora la cara superior será la  $y = 3$ , la cual tendrá una velocidad unitaria en la dirección  $x$  positiva. Para el caso de  $Re = 100$  se grafica la superficie de velocidad  $|v| = 0,13$  en la figura 5.27. Se visualiza en la figura que la distancia a la pared inferior ( $y = 0$ ) no impacta considerablemente en el comportamiento del fluido ya que la superficie es muy parecida a la que se contrastó con los resultados de la bibliografía en la figura 5.15.

Para esta misma geometría de la cavidad rectangular vertical con velocidad en  $y = 3$  se presenta el caso para  $Re = 1$ . Nuevamente se puede apreciar que el problema se comporta casi como el de una cavidad cúbica. En la figura 5.29 se muestra la superficie de  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ . La principal diferencia con respecto a la generada con  $Re = 100$  es que esta es simétrica respecto del plano  $x = 0,5$ , situación que antes no ocurría.

Dada la simetría del problema, en la figura 5.28 se muestran las líneas de corrientes en 3 planos entre  $z = 0$  y  $z = 0,5$  para dar una idea general del movimiento.

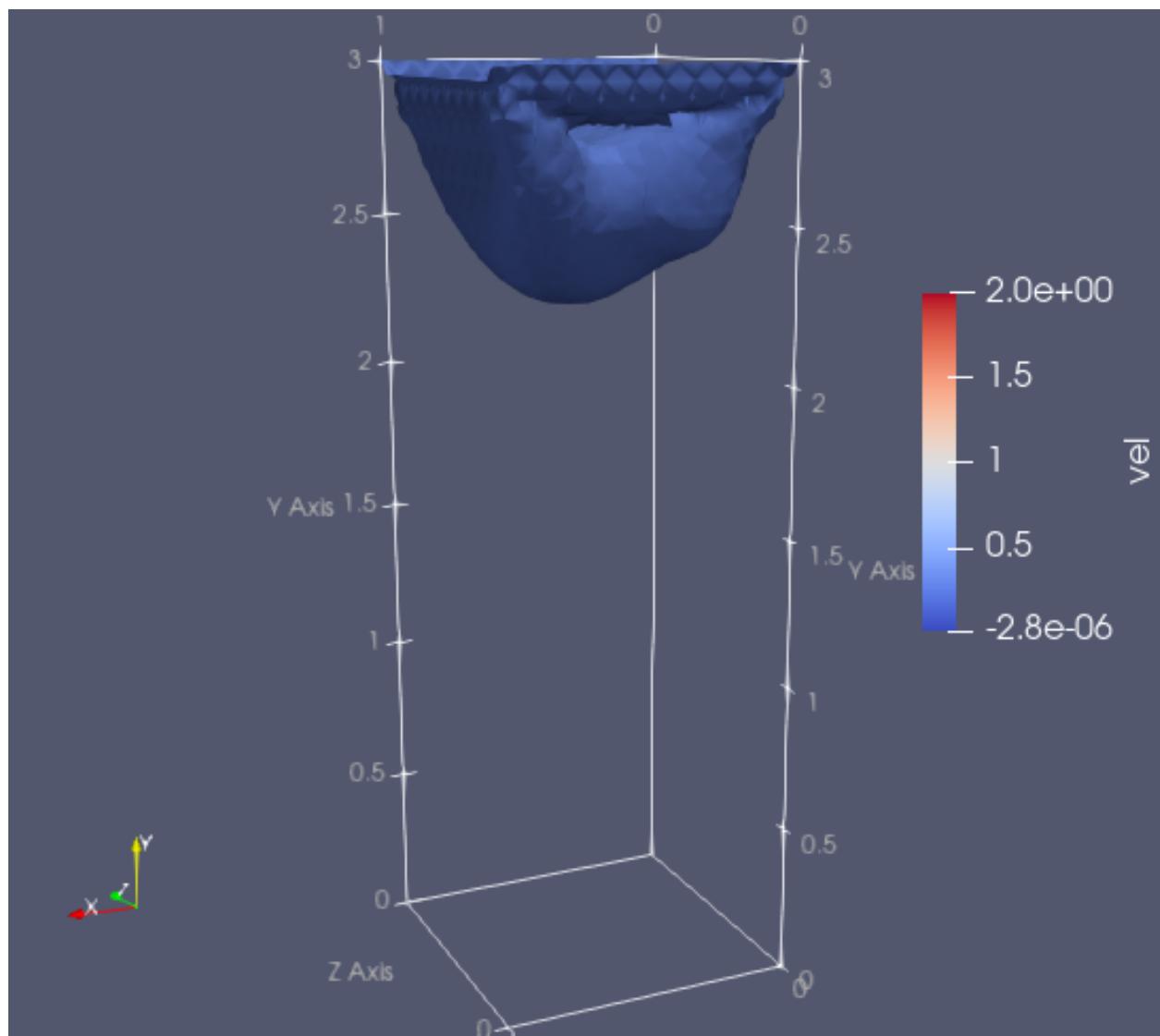
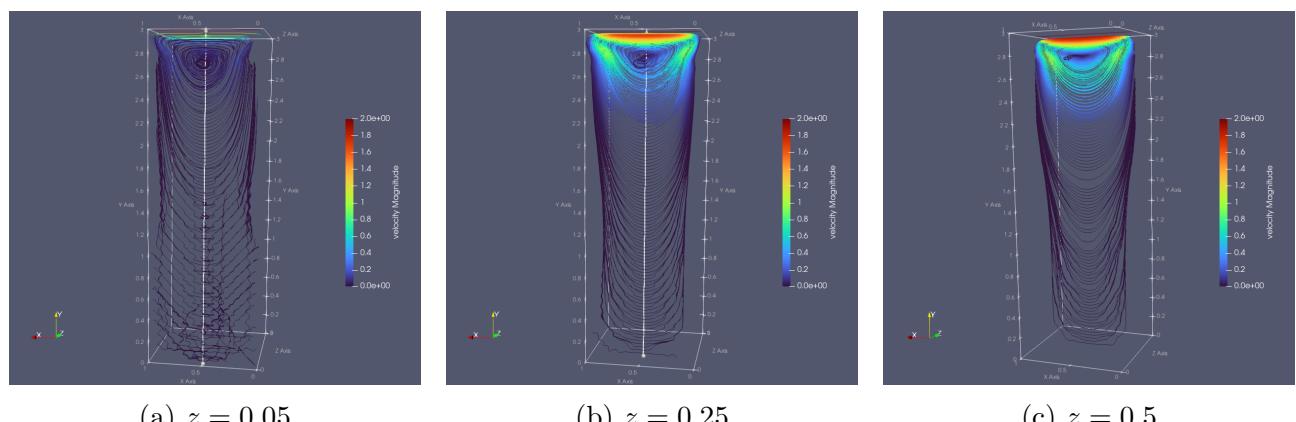


Figura 5.27: Flujo en un cañón rectangular vertical: superficie de nivel de magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ , coloreada según las distintas componentes de velocidad.



(a)  $z = 0,05$

(b)  $z = 0,25$

(c)  $z = 0,5$

Figura 5.28: Flujo en un cañón rectangular vertical: líneas de corriente.

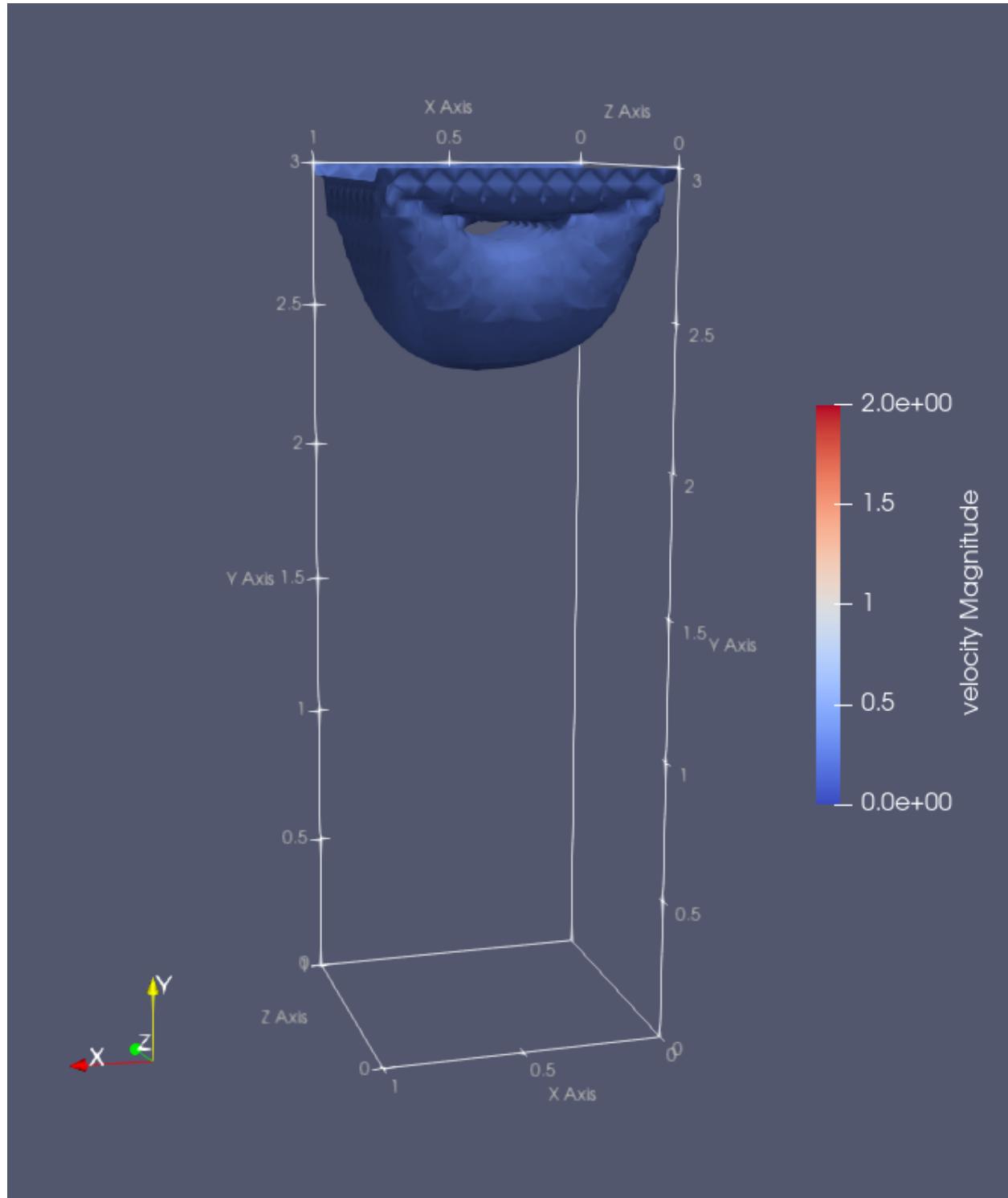


Figura 5.29: Flujo en un cavidad rectangular vertical,  $Re = 1$ : superficie de nivel de magnitud de la velocidad  $\frac{|\mathbf{v}|}{U_{ref}} = 0,13$ , coloreada según las distintas componentes de velocidad.

# Capítulo 6

## Conclusiones y trabajos futuros

En el presente trabajo fue expuesta una nueva implementación, ahora tridimensional, del método de la Ecuación Laplaciana Cinemática realizada en base a los trabajos de [Ponta y Aref \(2005\)](#), [Otero \(2008\)](#) y [Burzstyn et al. \(2008\)](#), que consistían en implementaciones bidimensionales. La implementación tridimensional del método KLE está basada en una formulación híbrida de las ecuaciones de Navier Stokes en su forma conservativa, a diferencia de las implementaciones anteriores que partían de la forma no conservativa. Como técnica de discretización se ha utilizado el método de los elementos espectrales, que es una variación del método de los elementos finitos en donde los órdenes de las funciones de interpolación pueden ser variables de forma paramétrica.

La implementación se realizó en lenguaje `python3`, sobre un sistema operativo `linux` utilizando intensivamente las bibliotecas: `MPI4Py` , `NumPy`, `Matplotlib` y `PETSc` (`HDF5`, `Chaco` y `fblaslapack`) a través de su interfaz `PETCsc4Py`. `PETSc` junto con `MPI` son bibliotecas de software numérico paralelo muy poderosas para resolver ecuaciones diferenciales parciales y cálculos de matrices ralas. Cabe destacar que, al no modificarse la geometría del problema a lo largo del tiempo, el ensamblaje de las matrices para la solución espacial y de los operadores diferenciales, presentados en el capítulo 4, se realiza una única vez y tanto unas como los otros se utilizarán posteriormente durante todo el proceso de cómputo, en cada paso de tiempo.

La presente implementación tridimensional se aplicó exitosamente para simular problemas fluidodinámicos. Utilizando como benchmark el problema de vórtices de Taylor-Green (TGV) se verificó la convergencia espectral de la solución espacial, así como también la convergencia espectral de la técnica de derivación, promoción y reproyección para el cálculo de las variables secundarias desde los operadores diferenciales.

La validación de la evolución temporal resultó exitosa para el problema de Taylor-Green que presenta condiciones de borde free-slip. Asimismo, también se utilizó el problema de capa límite sobre una placa plana infinita, llegando a resultados igualmente satisfactorios.

Para validar la evolución temporal con condiciones de contorno no-slip se aplicó exitosamente el algoritmo para el problema de flujo en una cavidad, logrando reproducir el comportamiento y los resultados reportados en las referencias bibliográficas tanto para experimentación física como numérica ([Ghia et al., 1982](#)).

## Recomendaciones para trabajos futuros

Esta implementación, al estar basada en la librería PETSc cuyo enfoque está en el procesamiento en paralelo, podría adaptarse a tipos de entorno de cómputo en paralelo. Dicho aspecto excedía los alcances propuestos originalmente para este trabajo. Al ser un problema tridimensional, el paralelismo implicaría una diferencia considerable con respecto al problema bidimensional. Esto se debe a que, al incrementar la cantidad de elementos, con el fin de aumentar la resolución, la cantidad de nodos se incrementa cúbicamente con el aumento de resolución en una dimensión. Por otro lado, la vorticidad en un nodo es un vector de tres componentes, en comparación con el problema bidimensional donde se trataba de un escalar. Un punto interesante en el caso de contar con la posibilidad de resolver mayor cantidad de grados de libertad, es el estudio de la escalabilidad de la discretización mediante elementos espectrales de orden variable paramétricamente.

# Bibliografía

- G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics.* Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- K. J. Bathe. *Finite element procedures.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA, 1996.
- E. B. Becker, G. F. Carey, y J. T. Oden. *Finite Elements: An Introduction*, volumen 1 de *Texas finite element series.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA, 1981.
- P. Bogacki y L.F. Shampine. An efficient runge-kutta (4,5) pair. *Computers and Mathematics with Applications*, 32(6):15 – 28, 1996.
- J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier spectral methods.* Dover, Mineola, New York, USA, 2000.
- R. L. Burden y J. D. Faires. *Numerical analysis.* Brooks Cole, 1998.
- Odus R. Burggraf. Analytical and numerical studies of the structure of steady separated flows. *J. Fluid Mech.*, 24:113–151, 1966.
- G. H. Bursztyn. Una nueva implementacion para las ecuaciones de navier-stokes mediante kle y elementos espectrales. Tesis de Licenciatura en Ciencias de la Computación. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, 2009.
- G. H. Burzstyn, A. D. Otero, y J. Quinteros. Una nueva implementación para las ecuaciones de Navier–Stokes mediante KLE y elementos espectrales. En *Mecánica Computacional*, volumen 27, pp 2367–2383. AMCA, Noviembre 2008.
- M. Deville, T.-H. L^e, y Y. Morchoisne. Numerical simulation of 3-d incompressible unsteady viscous laminar flows. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, 36, 1992.
- U Ghia, K.N Ghia, y C.T Shin. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, 48(3):387 – 411, 1982.

- F. X. Giraldo. The Lagrange–Galerkin spectral element method on unstructured quadrilateral grids. *J. Fluid Mech.*, 147:114–146, 1998.
- R. D. Henderson. Dynamic refinement algorithms for spectral element methods. *Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng.*, 175:395–411, 1999.
- K. Hourigan, M. C. Thompson, y B. T. Tan. Self-sustained oscillations in flows around long blunt plates. *J. Fluids Struct.*, 15:387–398, 2001.
- G. E. Karniadakis, M. Israeli, y S. A. Orszag. High-order splitting methods for the incompressible Navier–Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 97:414–443, 1991.
- G. Karypis y V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, pp 359–392, 1999.
- M. Kawaguti. Numerical solution of the navier–stokes equations for the flow in a two-dimensional cavity. *J. Phys. Soc. Jap.*, 16(12):2307–2315, 1961.
- J. R. Koseff y R. L. Street. The lid-driven cavity flow: A synthesis of qualitative and quantitative observations. *J. Fluids Eng.*, 106:390–398, 1984.
- Hendrik C. Kuhlmann y Francesco Román. The lid-driven cavity. En Alexander Gelfgat, editor, *Computational Modelling of Bifurcations and Instabilities in Fluid Dynamics*, pp 233–309. Springer, 2019.
- A. D. Otero. *Análisis no-lineal del comportamiento estructural de sistemas avanzados de conversión eoloeléctrica*. Tesis de Doctorado, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, 2008.
- A. D. Otero y F. L. Ponta. Spectral–element implementation of the KLE method: a  $(\omega, \mathbf{v})$  formulation of the Navier–Stokes equations. En *Mecánica Computacional*, volumen 25, pp 2649–2667. AMCA, Noviembre 2006.
- A. T. Patera. A spectral element method for fluid dynamics: laminar flow in a channel expansion. *J. Comput. Phys.*, 54:468–488, 1984.
- F. L. Ponta. The kinematic Laplacian equation method. *Journal of Computational Physics*, 207:405–426, 2005.
- F. L. Ponta y H. Aref. Vortex synchronization regions in shedding from an oscillating cylinder. *Phys. Fluids*, 17:011703, 2005.

## BIBLIOGRAFÍA

---

- Schreiber y H. B. Keller. Driven cavity flows by efficient numerical techniques. *Journal of Computational Physics*, 49:310–333, 1983.
- P. N. Shankar y M. D. Deshpande. Fluid mechanics in the driven cavity. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 32:93–136, 2000.
- G. J. Sheard, M. C. Thompson, y K. Hourigan. From spheres to circular cylinders: non-axisymmetric transitions in the flow past rings. *J. Fluid Mech.*, 506:45–78, 2004.
- G. I. Taylor y A. E Green. Mechanism of the production of small eddies from large ones. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 158: 499 – 521, 1937.
- M. C. Thompson, K. Hourigan, y J. Sheridan. Three-dimensional instabilities in the wake of a circular cylinder. *Exp. Therm. and Fluid Science*, 12:190–196, 1996.
- M. C. Thompson, T. Leweke, y C. H. K. Williamson. The physical mechanism of transition in bluff body wakes. *J. Fluids Struct.*, 15:607–616, 2001.
- Z. Žunič, M. Hriberšek, L. Škerget, y J. Ravnik. 3D lid driven cavity flow by mixed boundary and finite element method. En *European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS CFD 2006)*, 2000.