

A thick dark blue vertical bar runs along the left edge of the slide. A blue arrow-shaped banner points to the right from this bar, containing the text 'SEMINARIO 4B'. In the bottom-left corner, there are several thin, curved, light blue lines that sweep upwards and to the right.

SEMINARIO 4B

Modelos Computacionales de simulación y dinámica de fluidos

SERGIO HERAS ALVAREZ
UNIVERSIDAD POLITECNICA DE MADRID

INDICE

¿Qué son los modelos computacionales de simulación y la dinámica de fluidos?	2
Contaminantes.....	2
Ecuaciones de Navier-Stokes.....	3
Ecuación de Advección-difusión	4
Transformada de Fourier	5
Método espectral	6
VOC'S	7
Ley de Courant-Friedrich-Lewy	8
Nesting	9
MM5 y WRF	10
CIESIN.....	12
netCDF	13
CFD	14
Conclusiones.....	15
Referencias bibliográficas	16

¿Qué son los modelos computacionales de simulación y la dinámica de fluidos?

Los modelos computacionales de simulación y dinámica de fluidos son herramientas utilizadas para estudiar el comportamiento de fluidos en distintas situaciones y escenarios.

Estos modelos utilizan algoritmos y ecuaciones matemáticas para simular la dinámica de los fluidos en un sistema, permitiendo a los investigadores predecir y analizar el comportamiento del flujo, la presión, la temperatura, la viscosidad y otros parámetros importantes como los fenómenos naturales (movimientos del océano, las corrientes de agua, el clima ...) o contaminantes.

Contaminantes: Los contaminantes son sustancias o agentes físicos, químicos o biológicos que, cuando se introducen en el medio ambiente, causan efectos perjudiciales para la salud humana, los ecosistemas y los procesos naturales.

Ejemplos más comunes:

- Óxidos de azufre (SO_x)
- Óxidos de nitrógeno (NO_x)
- Óxidos de carbono (CO_x)
- Ozono troposférico (O_3)

Ecuaciones Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes son un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales que describen la dinámica de los fluidos en movimiento. Estas ecuaciones establecen una relación entre la velocidad, la presión, la densidad y la viscosidad del fluido, y permiten predecir cómo se moverá el fluido en un sistema determinado.

Las ecuaciones de Navier-Stokes se llaman así en honor a los matemáticos Claude-Louis Navier y George Gabriel Stokes, quienes las derivaron de forma independiente en el siglo XIX. Estas ecuaciones son fundamentales en la mecánica de fluidos, y se aplican en una amplia variedad de campos, como la ingeniería, la física, la química y la biología.

A pesar de su importancia, las ecuaciones de Navier-Stokes no tienen solución analítica para la mayoría de los casos prácticos, lo que significa que se deben resolver numéricamente utilizando métodos computacionales avanzados. Esto ha llevado al desarrollo de modelos de simulación y dinámica de fluidos, que permiten a los investigadores predecir el comportamiento de los fluidos en sistemas complejos y optimizar su diseño y funcionamiento.

NAVIER-STOKES EQUATION

$$\begin{aligned}\rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{Du}{Dt} \\ \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{Dv}{Dt} \\ \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) &= \rho \frac{Dw}{Dt}\end{aligned}$$

**Navier-
Stokes
Equation**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

Continuity

Ecuación de advección-difusión

La ecuación de advección-difusión es una ecuación diferencial parcial que describe el transporte de una sustancia en un medio fluido. Esta ecuación combina dos procesos de transporte: la advección, que se refiere al movimiento del fluido que arrastra la sustancia transportada, y la difusión, que se refiere a la dispersión de la sustancia en el fluido.

La ecuación de advección-difusión se puede expresar matemáticamente como:

$$\partial C / \partial t + u \partial C / \partial x = D \partial^2 C / \partial x^2$$

donde C es la concentración de la sustancia transportada, t es el tiempo, x es la posición, u es la velocidad del fluido, D es el coeficiente de difusión y ∂ y ∂^2 son las derivadas parciales con respecto al tiempo y la posición, respectivamente.

Esta ecuación es importante en la simulación y análisis de procesos de transporte de sustancias en medios fluidos, como el transporte de contaminantes en ríos y océanos, la dispersión de gases en la atmósfera, la propagación de enfermedades infecciosas en poblaciones y muchas otras aplicaciones. La solución de la ecuación de advección-difusión depende de las condiciones iniciales y de frontera del sistema, así como de los valores de los parámetros que caracterizan el transporte y la difusión de la sustancia en el fluido.

Transformada de Fourier

La transformada de Fourier inversa es una herramienta matemática utilizada en la dinámica de fluidos para obtener la solución de ecuaciones diferenciales parciales que describen el comportamiento de los fluidos. Esta transformada se utiliza para pasar de la representación de una función en el dominio de la frecuencia al dominio del tiempo.

En la dinámica de fluidos, la transformada de Fourier inversa se utiliza para resolver ecuaciones diferenciales parciales en las que las variables se encuentran en el dominio de la frecuencia. Por ejemplo, las ecuaciones de Navier-Stokes en el espacio de Fourier son ecuaciones diferenciales parciales lineales, y se pueden resolver utilizando la transformada de Fourier inversa.

Transformada de Fourier

$$\hat{f}(\omega) \equiv \mathcal{F}[f(t)](\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

Transformada Inversa de Fourier

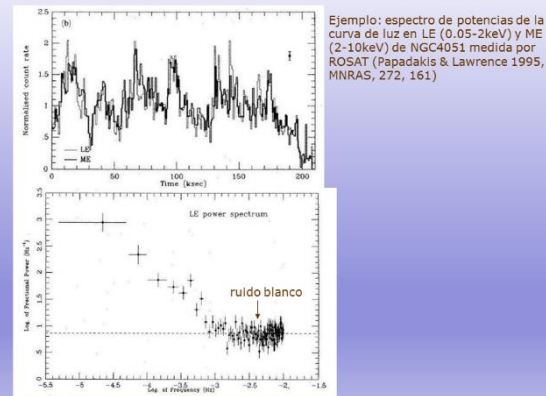
$$f(t) = \mathcal{F}^{-1}[\hat{f}(\omega)](t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

Método espectral

El método espectral es una técnica numérica utilizada en la simulación de la dinámica de fluidos y otros sistemas físicos en los que las variables están descritas por ecuaciones diferenciales parciales. El método espectral se basa en la expansión de las variables en funciones de base, como polinomios o funciones sinusoidales, que permiten representar la solución de la ecuación diferencial parcial como una suma finita de términos. Generalmente implican el uso de la transformada de Fourier.

EJEMPLOS

Métodos espectrales: espectro de potencias

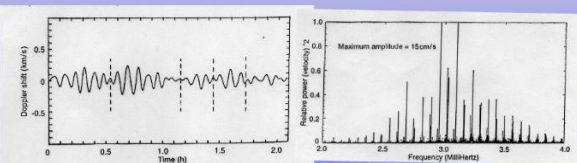


Métodos espectrales: espectro de potencias

Se define la potencia de una señal $s(t)$ a una frecuencia ν , como $P(\nu) = |S(\nu)|^2$ $-\infty \leq \nu \leq \infty$ donde

$$S(\nu) = \text{FT}(s(t)) = \int_{-\infty}^{\infty} dt s(t) e^{-2\pi i \nu t} \quad S(\nu) = \text{DFT}(s(t)) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} s_k e^{-2\pi i \nu t_k}$$

donde FT denota Fourier transform. Alternativamente, la potencia también se define como $P(\nu) = |S(\nu)|^2 + |S(-\nu)|^2 = 2|S(\nu)|^2$ $0 \leq \nu \leq \infty$. El espectro de potencias mide la contribución a la varianza de una cierta frecuencia ν .



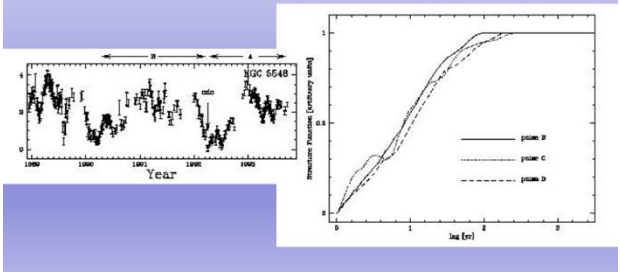
Métodos espectrales: función de estructura

Se define la función de estructura de una señal $s(t)$, como

$$SF(t) = \frac{1}{T} \int_0^T [s(t+\tau) - s(\tau)]^2 d\tau \quad SF(\Delta t) = \langle [s(t+\Delta t) - s(t)]^2 \rangle$$

donde SF denote structure function.

SF da cuenta del incremento de la variación como función de t , es decir, mide la escala de t en la que se produce la variación máxima (Simoneti et al....???)



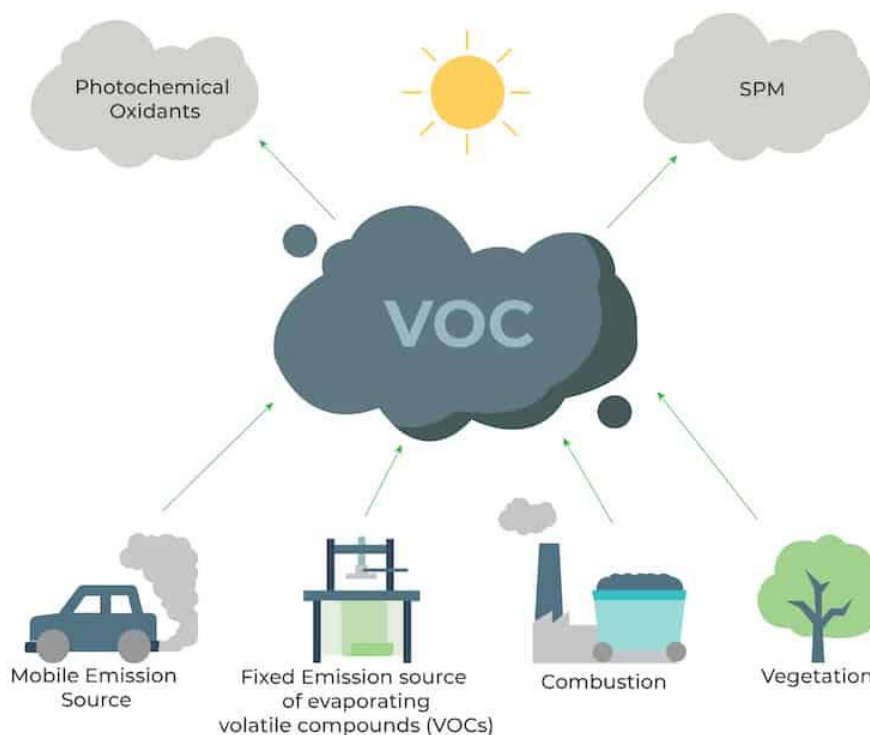
VOC'S

Los VOC's (Compuestos Orgánicos Volátiles) son sustancias químicas orgánicas que se evaporan fácilmente a temperatura ambiente y se encuentran comúnmente en productos de uso diario, como pinturas, productos de limpieza, pegamentos, combustibles y muchos otros.

Los VOC's pueden tener efectos perjudiciales en la salud humana y en el medio ambiente. La exposición prolongada a algunos VOC's puede provocar irritación de los ojos, la nariz y la garganta, dolores de cabeza, náuseas y mareos, así como también daños en el hígado, los riñones y el sistema nervioso central.

Además, los VOC's son una importante fuente de contaminación del aire en áreas urbanas y pueden contribuir a la formación de smog y al cambio climático. Algunos VOC's también pueden reaccionar con otros contaminantes atmosféricos y formar ozono troposférico, un gas que puede causar problemas respiratorios graves.

Para reducir la exposición a los VOC's, se pueden tomar medidas como usar productos que contengan bajos niveles de VOC's o no contengan VOC's, ventilando adecuadamente las áreas donde se usan productos que contienen VOC's, y limitando el uso de productos que emiten VOC's en espacios cerrados.



Ley de Courant-Friedrich-Lewy

La Ley de Courant-Friedrich-Lewy (CFL) es un criterio importante en la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) que modelan fenómenos físicos. La ley establece que, para una solución numérica estable y precisa, el tamaño del paso de tiempo utilizado en el cálculo debe ser proporcional al tamaño de la malla espacial utilizada en el cálculo.

En términos más precisos, la Ley de CFL establece que el tamaño del paso de tiempo utilizado en una solución numérica no puede ser mayor que un factor de la relación entre el tamaño de la malla espacial y la velocidad característica del fenómeno que se está modelando. En otras palabras, la Ley de CFL establece una relación crítica entre el tamaño del paso de tiempo y el tamaño de la malla espacial, que debe ser satisfecha para garantizar una solución numérica estable y precisa.

La Ley de CFL se utiliza ampliamente en la simulación numérica de una amplia variedad de fenómenos físicos, desde la dinámica de fluidos hasta la mecánica cuántica. La ley es particularmente importante en la solución numérica de EDP hiperbólicas, que modelan fenómenos en los que las ondas se propagan a través de un medio.

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{||v_{max}||}$$

Nesting

La anidación o nesting en dinámica de fluidos se refiere al uso de múltiples modelos de simulación de fluidos, cada uno con diferentes niveles de detalle o resolución espacial, para simular un sistema de fluidos complejo.

Por lo general, se utilizan modelos de alta resolución para simular las áreas más importantes o críticas del sistema de fluidos, mientras que se usan modelos de baja resolución para áreas menos importantes. Los resultados de los modelos de alta resolución se utilizan como entrada para los modelos de baja resolución, lo que permite una simulación más rápida y eficiente de todo el sistema de fluidos.

La técnica de nesting se utiliza en muchos campos de la dinámica de fluidos, como la predicción del tiempo y del clima, la modelización de tsunamis y la simulación de la propagación de contaminantes en el medio ambiente. Al permitir una mayor precisión en las áreas críticas del sistema de fluidos y al mismo tiempo reducir los tiempos de simulación, la técnica de nesting permite una mejor comprensión y predicción de los sistemas de fluidos complejos.

MM5 y WRF

MM5 y WRF son modelos numéricos de simulación atmosférica utilizados en la predicción del tiempo y el clima. A continuación, se presentan algunas de las características y diferencias entre ambos modelos:

- Modelo MM5:

Fue desarrollado por el Centro Nacional de Investigaciones Atmosféricas (NCAR) y la Universidad Estatal de Pensilvania en 1980.

Utiliza una malla de coordenadas escalonadas para representar la topografía del terreno.

Incluye una amplia gama de opciones de parametrización física para la atmósfera y la superficie terrestre.

Ha sido utilizado en investigaciones climáticas y meteorológicas, así como en la predicción del tiempo a corto y largo plazo.

- Modelo WRF:

Fue desarrollado por el NCAR, la Administración Nacional Oceánica y Atmosférica (NOAA) y otras organizaciones en 2004.

Utiliza una malla de coordenadas escalonadas y una malla no escalonada para representar la topografía del terreno.

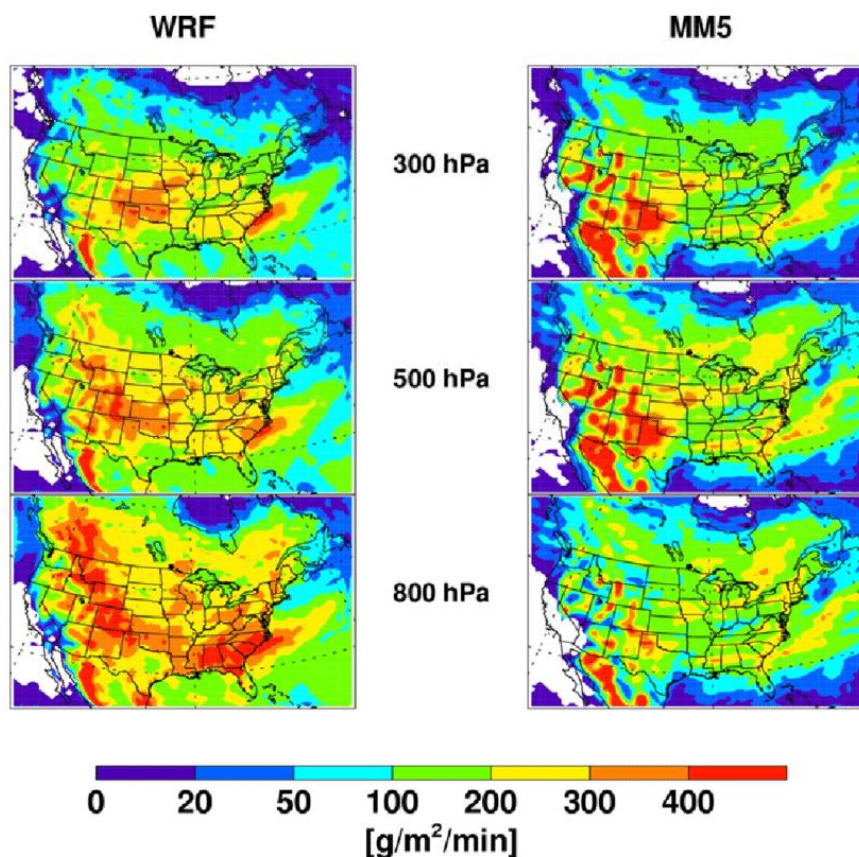
Incluye una amplia gama de opciones de parametrización física, incluyendo la opción de utilizar esquemas físicos específicos para diferentes áreas geográficas.

Está diseñado para ser altamente escalable, lo que significa que puede ser utilizado para simulaciones de alta resolución en computadoras de alto rendimiento.

Ha sido utilizado en la predicción del tiempo a corto y largo plazo, así como en la investigación climática y meteorológica.

En general, ambos modelos son muy utilizados en la investigación y la predicción del tiempo y el clima, y cada uno tiene sus propias fortalezas y debilidades. La elección de un modelo específico dependerá de las necesidades de la simulación y de las capacidades del usuario.

EJEMPLO DE ESTADOS UNIDOS



CIESIN

CIESIN (Centro de Información sobre el Medio Ambiente y la Seguridad Humana) es un centro de investigación e información situado en la Universidad de Columbia en Nueva York. El centro se enfoca en la investigación interdisciplinaria sobre temas relacionados con el medio ambiente y la seguridad humana, y trabaja en colaboración con organizaciones y gobiernos de todo el mundo para abordar estos problemas.

El trabajo de CIESIN se centra en el análisis y la integración de datos geoespaciales y sociales para comprender mejor los vínculos entre el medio ambiente y la salud humana, la seguridad alimentaria, la migración y la planificación del desarrollo. La organización trabaja en estrecha colaboración con otras instituciones académicas, gubernamentales y no gubernamentales para recopilar y compartir datos ambientales, demográficos y socioeconómicos a nivel global.

Entre los proyectos más destacados de CIESIN se encuentran:

- El Programa de Evaluación de la Tierra Global (GLA), que utiliza datos de satélites y modelos climáticos para evaluar la salud y la productividad de la tierra en todo el mundo.
- El Proyecto de Atlas de Desarrollo Humano, que proporciona información detallada sobre las condiciones de vida y los indicadores socioeconómicos en todo el mundo.
- El Sistema de Información Geográfica de Desplazamiento Forzado (DSG), que utiliza datos espaciales y sociales para comprender mejor las causas y los efectos del desplazamiento forzado.

netCDF

netCDF (Network Common Data Form) es un formato de archivo utilizado para almacenar datos científicos y de ingeniería. Fue desarrollado por Unidata y se utiliza ampliamente en la comunidad científica para el intercambio de datos y la distribución de datos a través de redes.

El formato netCDF es capaz de almacenar datos multidimensionales y de alta dimensionalidad, lo que lo hace especialmente útil para la ciencia de datos y la visualización de datos. Puede almacenar datos en una variedad de tipos, incluyendo enteros, flotantes, cadenas de caracteres y complejos.

Además de su formato de archivo, netCDF también incluye una biblioteca de software, llamada netCDF Library, que permite a los usuarios leer y escribir archivos netCDF. La biblioteca está disponible en múltiples plataformas y lenguajes de programación, incluyendo C, **Fortran** y Python.

Entre las características más importantes de netCDF se incluyen:

- Capacidad para almacenar datos multidimensionales y de alta dimensionalidad.
- Admite múltiples tipos de datos, incluyendo enteros, flotantes y complejos.
- Permite la definición de metadatos y atributos para los datos.
- Permite el acceso eficiente a datos en archivos grandes mediante la lectura y escritura de subconjuntos de datos.

CFD

CFD (Computational Fluid Dynamics) es una técnica de modelado numérico utilizada para analizar el comportamiento de los fluidos y los gases. CFD se basa en las leyes de la física, que gobiernan el comportamiento de los fluidos, y utiliza métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales parciales complejas que describen el flujo de fluidos.

CFD se utiliza en una amplia variedad de aplicaciones, desde el diseño de aviones y automóviles hasta en la investigación en oceanografía y la evaluación de la calidad del aire. El modelado numérico permite a los ingenieros y científicos simular el comportamiento de los fluidos en situaciones complejas que serían difíciles o imposibles de analizar mediante métodos experimentales.

Para realizar simulaciones CFD, se dividen los fluidos en pequeñas células de control, que se utilizan para calcular las propiedades del fluido en cada punto del dominio de la simulación. Se utilizan diferentes modelos matemáticos para describir las propiedades del fluido, como la viscosidad, la velocidad y la presión. Los resultados de la simulación se presentan en forma de gráficos y visualizaciones que muestran el comportamiento del fluido en el dominio simulado.

Entre las ventajas de CFD se incluyen:

- Capacidad para analizar el comportamiento de los fluidos en situaciones complejas.
- Permite la simulación de escenarios que serían difíciles o imposibles de analizar mediante métodos experimentales.
- Puede ahorrar tiempo y costos en la realización de experimentos físicos.

Conclusiones

En conclusión, la dinámica de fluidos es un campo de la física que se encarga del estudio de los fluidos en movimiento. Debido a la complejidad y la imposibilidad de resolver analíticamente muchos problemas en este campo, se han desarrollado modelos computacionales de simulación que permiten obtener soluciones aproximadas y estimaciones numéricas de diversos fenómenos de interés.

Aunque los modelos de simulación son una herramienta muy útil para entender y predecir el comportamiento de los fluidos en diferentes situaciones, es importante tener en cuenta sus limitaciones y la necesidad de validarlos con experimentos para asegurar su precisión y confiabilidad en diferentes condiciones.

En resumen, la dinámica de fluidos y los modelos computacionales de simulación son una parte fundamental de la investigación en ingeniería, física y otras disciplinas relacionadas, y su aplicación se extiende desde el diseño de sistemas de transporte hasta la comprensión de fenómenos naturales como el clima y la oceanografía.

Referencias bibliográficas

<https://www.esss.co/es/blog/dinamica-de-fluidos-computacional-que-es/>

<https://www.elsevier.es/es-revista-revista-internacional-metodos-numericos-calculo-338-resumen-modelacion-simulacion-fluido-dinamica-computacional-sistema-S0213131516300128>

https://www.juntadeandalucia.es/medioambiente/portal/landing-page-%C3%ADndice/-/asset_publisher/zX2ouZa4r1Rf/content/principales-contaminantes-atmosf-c3-a9ricos/20151#:~:text=Un%20contaminante%20es%20toda%20sustancia,medio%20ambiente%20en%20su%20conjunto

<https://ingenieriabasica.es/las-ecuaciones-de-navier-stokes/>

<https://repositorio.unican.es/xmlui/bitstream/handle/10902/20494/Lazaro%20Julian%20Victor.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

<https://www.ehu.eus/~mepvaarf/ficheros/introespectrales.pdf>

<https://www.solerpalau.com/es-es/blog/voc-los-compuestos-organicos-volatiles/>

http://www.ideam.gov.co/documents/21021/21132/Validaci%C3%B3n_Modelos_MM5_WRF_%28Ruiz.pdf/13192c3b-a59f-4114-9eb0-220d3c897cef

<http://www.ciesin.org/>

[https://pro.arcgis.com/es/pro-app/latest/help/data/multidimensional/what-is-netcdf-data.htm#:~:text=El%20netCDF%20\(formulario%20de%20datos,del%20viento%20y%20la%20direcci%C3%B3n.](https://pro.arcgis.com/es/pro-app/latest/help/data/multidimensional/what-is-netcdf-data.htm#:~:text=El%20netCDF%20(formulario%20de%20datos,del%20viento%20y%20la%20direcci%C3%B3n.)