

Una formulación numérica de volúmenes finitos de alto orden basada en el Método de Mínimos Cuadrados Móviles para flujo compresible

X. Nogueira, L. Cueto-Felgueroso, I. Colominas

Recibido: Enero 2010, Aceptado: Enero 2010

©Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, España 2010

Resumen En este artículo se presenta una metodología numérica para el cálculo de flujos compresibles tanto en mallas estructuradas como en mallas no estructuradas. El método de Mínimos Cuadrados Móviles (MLS) se utiliza para el cálculo de los gradientes y las derivadas de alto orden necesarias para la construcción de un método de volúmenes finitos de alto orden. Además, las propiedades multiescala del método MLS se utilizan para la construcción de un detector de ondas de choque, que permite la utilización de los métodos de limitación de pendiente con métodos de orden mayor que dos. Se muestran ejemplos numéricos de la precisión y robustez del método numérico presentado.

NUMERICAL SIMULATION OF COMPRESSIBLE FLOWS BY USING HIGHER-ORDER FINITE VOLUME SCHEMES BASED ON THE MOVING LEAST SQUARES METHOD

Summary In this work we show a numerical methodology for the resolution of compressible flows in both, structured and unstructured grids. The Moving Least Squares method (MLS) is used for the computation of the gradients and successive derivatives in a higher-order finite volume framework. Using the multireso-

lution properties of the MLS methodology, we define a shock-detection methodology. This new methodology allows the extension of slope limiters to finite volume methods with order higher than two. We present some numerical examples that show the accuracy and robustness of the numerical method.

1. Introducción

El método de volúmenes finitos tipo Godunov, es uno de los más ampliamente utilizados para resolver problemas de flujos compresibles en mallas no estructuradas [1–3]. En este tipo de mallas, el mayor problema para conseguir un método de alto orden reside en el cálculo de los gradientes y derivadas de alto orden que se requieren tanto para el cálculo del término viscoso de las ecuaciones de Navier-Stokes como para aumentar la precisión de los términos convectivos. Esta precisión será tanto mayor cuanto más alto sea el orden de la reconstrucción de las variables en el interior de la celda.

Los primeros intentos de obtener métodos de alto orden son las extensiones a dos y tres dimensiones del método MUSCL (*Monotone Upstream Schemes for Conservation Laws*) [4]. Estos intentos presentaban el problema de no ser completamente multidimensionales, pues estaban basados en extender directamente el procedimiento unidimensional. Quizás los métodos más exitosos en cuanto a multidimensionalidad han sido los esquemas *Residual Distribution* o *Fluctuation Splitting*, basados en la distribución de fracciones de una linealización conservativa del flujo por los nodos del elemento [5–7]. El principal problema de estos esquemas es que la linealización conservativa no está siempre disponible. Además presentan problemas para alcanzar órdenes

X. Nogueira, L. Cueto-Felgueroso*, I. Colominas
Grupo de Métodos Numéricos en Ingeniería, GMNI
Departamento de Métodos Matemáticos y de Representación
E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos, Universidad de A Coruña
Campus de Elviña, 15071 A Coruña, España
Tel.: 34 981 167 000; Fax: 34 981 167 170
e-mail: icolominas@udc.es

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

mayores que dos y en la discretización de los términos viscosos. Otro enfoque consiste en el cálculo de los gradientes mediante mínimos cuadrados o bien empleando reconstrucciones basadas en el teorema de Green-Gauss [8–11]. Sin embargo, mediante estos métodos es complicado alcanzar órdenes de convergencia mayores que dos.

La reconstrucción *k-exacta* [8,12] se basa en el cálculo de una expansión polinómica en el interior de cada celda que preserva la media de la variable en esa celda y reconstruye exactamente polinomios hasta grado k . Los coeficientes que definen ese polinomio se obtienen minimizando, en el sentido de mínimos cuadrados, el error en la estimación de los valores medios en algunas celdas vecinas (que definen una plantilla o *stencil*). Este método tiene problemas de condicionamiento cuando la malla se “estrecha” (algo común cerca de las paredes) y también en el tratamiento de los flujos viscosos.

Por otra parte, los esquemas tipo ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) [13,14] emplean una plantilla (*stencil*) adaptativa. Para cada celda se definen varios conjuntos de celdas vecinas, y se reconstruyen los valores medios de cada celda con aproximaciones polinómicas. Entre todos los polinomios obtenidos para todos los conjuntos de celdas vecinas asociados a cada celda, se escoge el menos *oscilatorio*. Si en vez de reconstruir los valores medios en cada celda se reconstruyen los valores en cada punto, es necesario construir los polinomios de forma que la reconstrucción sea conservativa. Una versión mejorada son los esquemas *Weighted ENO* (WENO) [14], en los que se obtiene una suma ponderada de polinomios para la reconstrucción a partir de los conjuntos de celdas vecinas y sus reconstrucciones asociadas. Estos métodos están bastante desarrollados para mallas estructuradas, pero su aplicación en mallas no estructuradas presenta problemas tanto de implementación como de coste y robustez.

Los métodos del tipo Galerkin Discontinuo (DG) [15–19] han sido extensivamente investigados en los últimos años. Estos métodos han centrado la atención tanto de la “comunidad” de investigadores, que emplean volúmenes finitos como de la que utilizan elementos finitos, al proporcionar un puente entre la aproximación mediante funciones de forma de elementos finitos y la tecnología de los métodos de Godunov, que obtiene muy buenos resultados en la simulación de flujos con ondas de choque. Para problemas puramente hiperbólicos el esquema resultante es muy compacto y da excelentes resultados para flujos suaves. Sin embargo, el tratamiento de los términos viscosos (de carácter elíptico) y de las discontinuidades junto con el considerable aumento en el número de grados de libertad, son los mayores inconvenientes de este método.

Por otra parte, el método de volúmenes (finitos) espectrales [20] utiliza reconstrucciones polinómicas a trozos obtenidas mediante nuevos grados de libertad creados dentro de cada volumen de control, mediante subdivisiones del volumen de control, para después construir un esquema de alto orden como en el método de volúmenes finitos. Este método, aunque menos preciso que DG, presenta ventajas en el tratamiento de ondas de choque, ya que es posible aplicar las técnicas de limitación desarrolladas para volúmenes finitos a cada subcelda.

Recientemente, se ha propuesto un método (FV-MLS) basado en una discretización de volúmenes finitos que utiliza mínimos cuadrados móviles (MLS), una técnica de interpolación muy utilizada en los llamados métodos sin malla o “*meshfree*” [21–25]. La interpolación MLS es empleada en este método para el cálculo de gradientes y derivadas sucesivas de las variables necesarios para la reconstrucción de las variables en el interior de cada volumen de control, permitiendo su empleo en mallas no estructuradas y obteniendo una reconstrucción verdaderamente multidimensional. La reconstrucción por mínimos cuadrados móviles es utilizada también para la reconstrucción directa de los flujos viscosos. Este tratamiento permite realizar una discretización clara y precisa de los términos viscosos. De este modo, el método FV-MLS permite alcanzar órdenes de convergencia elevados sin introducir nuevos grados de libertad. Por otra parte, al ser un método de tipo Godunov, permite un excelente tratamiento de las discontinuidades. En este artículo se presenta una metodología numérica completa para el cálculo de flujos compresibles, incluyendo el tratamiento de discontinuidades. La precisión del método se muestra mediante el cálculo del ruido generado por un par de vórtices. Se calculan además varios casos bidimensionales con ondas de choque presentes en el flujo, comprobando la validez de la metodología global presentada.

2. El Método de Volúmenes Finitos

En 1959 Godunov [2] presentó el primer esquema conservativo para la resolución de sistemas de leyes de conservación hiperbólicas no lineales, basado en la solución exacta de un problema de Riemann. Las formulaciones de volúmenes finitos actualmente empleadas son una evolución de este método.

En esta sección se pretenden introducir las ideas generales del método de volúmenes finitos, y por claridad, la exposición se realiza para el caso unidimensional.

Supongamos un sistema de leyes de conservación hiperbólica no lineales, definido en el dominio $x \in (0, L), t >$

0, de la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} &= 0 \\ \mathbf{U}(x, 0) &= \mathbf{U}^0(x) \\ \mathbf{U}(0, t) &= \mathbf{U}_l(t) \quad , \quad \mathbf{U}(L, t) = \mathbf{U}_r(t) \end{aligned} \quad (1)$$

donde \mathbf{U} es el vector de variables y $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ es conocido como el vector de *flujo*. Al ser una formulación diferencial, no es posible la resolución de problemas en los que la solución presente discontinuidades. Sin embargo, en flujos compresibles es frecuente la aparición de *ondas de choque*, esto es, un tipo de ondas de compresión que pueden aparecer cuando la velocidad del fluido supera a la velocidad del sonido local. La derivada de las variables en la dirección que atraviesa la onda de choque es muy elevada, por lo que desde un punto de vista matemático se puede asociar a una *discontinuidad* en la solución. Por tanto, es de gran interés que la formulación permita tratar soluciones discontinuas, para lo cual se debe resolver la forma integral de (1). Así, dividiendo el dominio en un conjunto de *volúmenes de control* (celdas o elementos) que no se solapan:

$$\int_{\Omega_I} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_I} \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} d\Omega = 0 \quad (2)$$

La ecuación (2) se aplica a cada volumen de control Ω_I . Aplicando el teorema de la divergencia a la integral de los flujos en (2) se obtiene:

$$\int_{\Omega_I} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_I} \mathbf{F}(\mathbf{U}) \mathbf{n} d\Gamma = 0 \quad (3)$$

en donde \mathbf{n} es la normal exterior unitaria al contorno Γ_I del volumen de control Ω_I . La hipótesis básica del método es que para un determinado instante t la solución es constante a trozos, tal y como se muestra en la Figura 1. Así, los datos para un instante t_n pueden ser vistos como pares de estados constantes $(\mathbf{U}_I^n, \mathbf{U}_{I+1}^n)$ separados por una discontinuidad en la interfaz entre celdas. Con una distribución de datos de este tipo, el valor del flujo $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ a través de cada interfaz Γ_I no estará definido de forma única. Para resolver este inconveniente, la propuesta de Godunov consiste en evaluar los flujos en la interfaz para un valor de las variables correspondiente a la solución de un problema de Riemann local centrado en la interfaz entre dos volúmenes de control, (denotadas en la Figura 1 como $I - \frac{1}{2}$ y $I + \frac{1}{2}$). Los valores iniciales del problema de Riemann así planteado son los valores de las variables a cada lado de la interfaz.

Para evaluar los flujos, el método original de Godunov resuelve cada problema de Riemann de forma exacta. Variaciones posteriores del método introducen unas funciones de *flujo numérico* que son soluciones aproximadas a dicho problema (ver por ejemplo [26] y [27]).

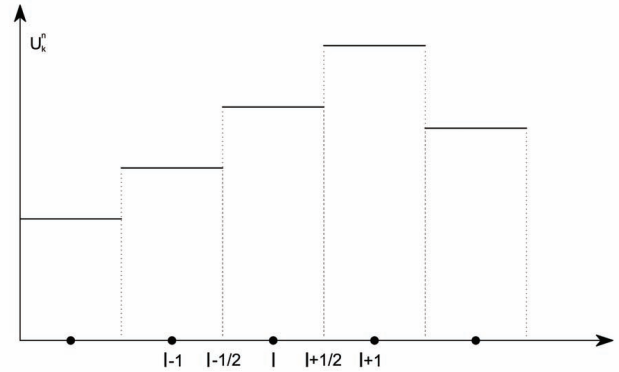


Figura 1. Solución constante a trozos para un instante n . En el eje x se indica el nodo I y sus vecinos, $I + 1$, $I - 1$. Las interfaces entre volúmenes de control se indican con la notación $I + \frac{1}{2}$, $I - \frac{1}{2}$

Estas funciones proporcionan un valor único del flujo a partir de los valores de las variables a ambos lados de la interfaz. Las funciones de flujo numérico incluyen términos de descentrado en función de la dirección de propagación de la información en el flujo, con el fin de tener en cuenta la naturaleza ondulatoria de las ecuaciones hiperbólicas. Estos métodos reciben el nombre de esquemas *upwind*.

De este modo, la discretización de la ecuación (3) en el espacio se puede escribir como:

$$A_I \frac{\partial U_I}{\partial t} + \mathbf{H}_{I+\frac{1}{2}}(U_I, U_{I+1}) - \mathbf{H}_{I-\frac{1}{2}}(U_{I-1}, U_I) = 0 \quad (4)$$

siendo \mathbf{H} una función de flujo numérico. El esquema dado por (4) es de primer orden en el espacio.

2.1. Construyendo esquemas de orden superior

Una forma posible de aumentar el orden de este esquema numérico consiste en mejorar la reconstrucción de la variable en el interior de la celda. Así, por ejemplo, se puede sustituir la hipótesis de solución constante en el interior de cada celda por una reconstrucción continua de la solución. Esta reconstrucción se puede hacer de diversas formas, siendo la más usual la reconstrucción polinómica. De este modo, la solución sigue siendo discontinua entre celdas, como se puede apreciar en la Figura 2, pero los valores de las variables en la interfaz ya no van a ser los valores de los centroides de las celdas adyacentes, sino un valor extrapolado. Esta forma de proceder recibe el nombre de *Método de Godunov Generalizado*. Así, el esquema MUSCL propuesto por

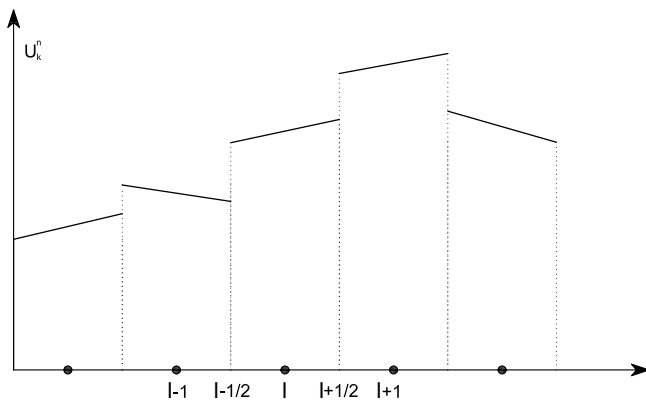


Figura 2. Reconstrucción lineal a trozos para un instante n . En el eje x se indica el nodo I y sus vecinos, $I + 1$, $I - 1$. Las interfaces entre volúmenes de control se indican con la notación $I + \frac{1}{2}$, $I - \frac{1}{2}$

Van Leer [4] utiliza reconstrucciones lineales alcanzando segundo orden. Este procedimiento fue más tarde extendido por otros autores [28] a representaciones parabólicas a trozos (PPM, *Piece-wise Parabolic Method*). Para mallas estructuradas, se han aplicado estos métodos de manera exitosa, empleando métodos unidimensionales de reconstrucción en cada dirección coordenada. Sin embargo, en el caso de mallas no estructuradas, la aplicación directa de estos métodos de reconstrucción es problemática, y aunque existen algunas soluciones, éstas presentan un marcado carácter unidimensional que hace que presenten una fuerte dependencia de la geometría de la malla.

Existen técnicas de reconstrucción con un carácter más multidimensional, como las técnicas de reconstrucción con ajuste por mínimos cuadrados [8] o formas discretas del teorema de Green-Gauss. La reconstrucción mediante mínimos cuadrados móviles, que se expondrá en el Apartado 3 también permite reconstrucciones con carácter multidimensional.

La idea general para aumentar el orden de la reconstrucción de las variables en cada celda consiste en la utilización de series de Taylor.

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \dots \quad (5)$$

en donde \mathbf{U}_I es el valor promedio asociado al centroide de la celda I , de coordenadas \mathbf{x}_I , y $\nabla \mathbf{U}_I$ es el gradiente de \mathbf{U} evaluado en el centroide de I .

De este modo, a partir del valor en el centroide de la celda, se *reconstruye* el valor de la variable en los puntos de integración en las interfaces entre elementos con el fin de evaluar la integral de contorno en (3). En resumen, el orden del esquema se aumenta mejorando la reconstrucción de las variables en el interior de la celda.

La principal dificultad a la hora de implementar métodos de alto orden para mallas no estructuradas utilizando esta idea reside en el cálculo de los gradientes y las derivadas de alto orden. Es por esto que la gran mayoría de los métodos existentes sólo alcanzan hasta el segundo orden. Sin embargo, una característica ventajosa de esta metodología para aumentar el orden de un esquema numérico es que, a diferencia de los métodos del tipo elementos finitos, se aumenta el orden sin aumentar el número de grados de libertad.

Por otra parte, hay tener en cuenta que en (5) intervienen valores promedios y derivadas evaluadas en *un punto*. Así, para órdenes mayores que uno, la reconstrucción (5) no conserva el valor medio, y se hace necesario modificar la discretización de la ecuación (3). De este modo, siguiendo a Venkatakrisnan [11] se puede escribir (3) como:

$$\frac{\partial \mathbf{V} \mathbf{A} \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{R}(\mathbf{U}) = 0 \quad (6)$$

siendo $\mathbf{R}(\mathbf{U})$ el vector residuo que aproxima la segunda integral de (3), \mathbf{V} es el tamaño (área en 2d) del elemento de control y \mathbf{A} es la matriz de masas. La matriz de masas aparece porque la variación del valor de \mathbf{U} dada por $\mathbf{R}(\mathbf{U})$ debería calcularse respecto al valor medio de \mathbf{U} en el volumen de control y no a los valores puntuales asociados con el centroide. De este modo, la matriz de masas relaciona el valor medio de la variable en un volumen de control con el valor puntual de la variable en el centroide de la celda. Así, el sistema dado por (6) está acoplado. En problemas no estacionarios, esto implica la necesidad de resolver un sistema de ecuaciones incluso con el uso de esquemas explícitos. Sin embargo, es posible utilizar una técnica conocida como *mass-lumping*, que consiste en reemplazar la matriz de masas por la matriz identidad. Esta técnica mantiene la precisión hasta segundo orden en esquemas de tipo *cell-centered* (con las variables calculadas en los centroides de las celdas) de volúmenes finitos, ya que aunque en la reconstrucción dada por (5) se utilizan valores puntuales, en el caso de la reconstrucción lineal coinciden con la reconstrucción en términos de valores promedio. Para esquemas de orden superior, es necesario introducir la matriz de masas. Es preciso remarcar que para el caso de problemas estacionarios, el *mass-lumping* puede emplearse sin restricción de orden.

Es posible prescindir de la matriz de masas si la reconstrucción (5) se realiza exclusivamente en función de valores promedio [11], para lo que se añaden ciertos términos con el fin de asegurar la conservación del valor promedio. Esto se ha hecho en este trabajo para alcanzar el tercer orden en problemas no estacionarios (ver Subapartado 4.4.1).

3. El Método *Movin Least Squares*(MLS)

El método FV-MLS reconstruye las derivadas sucesivas mediante una aproximación por mínimos cuadrados móviles (MLS). Este método fue propuesto en 1981 por Lancaster y Salkauskas [29] para la reconstrucción de superficies a partir de una serie de puntos arbitrariamente situados. Ha sido ampliamente analizado y utilizado en el contexto de los métodos sin malla [30,31,32]. A continuación se expondrán brevemente los fundamentos de este método.

3.0.1. Formulación general

Se considera una cierta función $u(\mathbf{x})$ definida en un dominio Ω . El método MLS reconstruye el valor de $u(\mathbf{x})$ en un determinado punto \mathbf{x} mediante un ajuste por mínimos cuadrados ponderados en un entorno de \mathbf{x} . Es decir:

$$u(\mathbf{x}) \approx \hat{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m p_i(\mathbf{x}) \alpha_i(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \quad (7)$$

donde $\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ es una base de funciones de dimensión m y $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}}$ es un conjunto de parámetros a determinar, tales que minimizan el siguiente funcional

$$J(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}}) = \int_{\mathbf{y} \in \Omega_{\mathbf{x}}} W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \left[u(\mathbf{y}) - \mathbf{p}^T(\mathbf{y}) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \right]^2 d\Omega_{\mathbf{x}} \quad (8)$$

$W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}}$ es un *kernel* (o función de suavizado) con soporte compacto ($\Omega_{\mathbf{x}}$) centrado en $\mathbf{z} = \mathbf{x}$. El parámetro h es la longitud de suavizado (*smoothing length*), y es una medida del tamaño de $\Omega_{\mathbf{x}}$. Este funcional puede considerarse como una medida del error cometido en la aproximación.

El proceso de minimización de J conduce a:

$$\int_{\mathbf{y} \in \Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{p}(\mathbf{y}) W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} u(\mathbf{y}) d\Omega_{\mathbf{x}} = \mathbf{M}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \quad (9)$$

siendo $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ la *matriz de momentos* definida como:

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{y} \in \Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{p}(\mathbf{y}) W(\mathbf{z} - \mathbf{y}, h) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} \mathbf{p}^T(\mathbf{y}) \quad (10)$$

En la aplicación práctica de este método, el dominio Ω es representado por un conjunto de puntos dispersos. Las integrales (9) y (10) se evalúan utilizando los puntos

que se encuentren en $\Omega_{\mathbf{x}}$ como puntos de cuadratura, obteniendo

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{z}) \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{W}(\mathbf{x}) \mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \quad (11)$$

El vector $\mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}}$

$$\mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} = (u(\mathbf{x}_1) u(\mathbf{x}_2) \cdots u(\mathbf{x}_{n_{\mathbf{x}}}))^T \quad (12)$$

contiene los valores nodales de la función $u_{\mathbf{x}}$ que va a ser reconstruida, evaluada en los $n_{\mathbf{x}}$ nodos pertenecientes a $\Omega_{\mathbf{x}}$. Esquemáticamente, esto se representa en la Figura 3.

La expresión discreta de la matriz de momentos es una matriz $m \times m$ dada por $\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{W}(\mathbf{x}) \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}^T$ donde $\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}}$, de dimensión $m \times n_{\mathbf{x}}$, y $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ de dimensión $n_{\mathbf{x}} \times n_{\mathbf{x}}$, se obtienen como

$$\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} = (p(\mathbf{x}_1) p(\mathbf{x}_2) \cdots p(\mathbf{x}_{n_{\mathbf{x}}})) \quad (13)$$

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}) = \text{diag} \{W_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\} \quad i = 1, \dots, n_{\mathbf{x}} \quad (14)$$

De este modo, de (11) y (8) se deduce que la interpolación MLS se puede expresar de la siguiente forma

$$\hat{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{W}(\mathbf{x}) \mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} = \mathbf{N}^T(\mathbf{x}) \mathbf{u}_{\Omega_{\mathbf{x}}} = \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}}} N_j(\mathbf{x}) u_j \quad (15)$$

Así, análogamente a la interpolación del tipo elementos finitos, la aproximación se puede hacer en términos de las funciones de forma definidas en el sentido de mínimos cuadrados móviles (MLS), calculadas como:

$$\mathbf{N}^T(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}}} \mathbf{W}(\mathbf{x}) \quad (16)$$

3.1. La base de funciones

La base de funciones $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ tiene un papel crucial en la precisión de la aproximación por mínimos cuadrados móviles. En [30] se presentan una serie de ensayos numéricos que muestran que para una base de polinomios de orden r , el orden nominal de precisión en el cálculo de las derivadas de orden s es aproximadamente $(r - s + 1)$. La aproximación MLS es capaz de reconstruir exactamente cualquier combinación lineal de funciones incluidas en la base, por lo que es de gran importancia elegirla de manera adecuada. Normalmente se utilizan bases de funciones polinómicas, aunque es posible utilizar también otras bases de funciones [33].

El concepto de completitud se refiere a la capacidad de un esquema para reproducir exactamente polinomios y sus derivadas sucesivas. Así, por ejemplo, una base polinómica que da lugar a esquemas que proporcionan completitud cuadrática es

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}) = (1, x, y, z, xy, xz, yz, x^2, y^2, z^2) \quad (17)$$

siendo (x, y, z) las coordenadas cartesianas del vector (\mathbf{x}) .

Para obtener una reconstrucción cúbica, habría que añadir los términos de tercer orden:

$$(x^2y, x^2z, y^2x, y^2z, z^2x, z^2y, xyz, x^3, y^3, z^3) \quad (18)$$

La relación entre el método MLS y otros como el *Reproducing Kernel Particle Method* (RKPM) es muy estrecha [21]. Una de las mejoras que introduce el RKPM es definir localmente y escalar los monomios que forman la base. Esta modificación hace que se mejore mucho el condicionamiento de la matriz de momentos. De este modo, si las funciones de forma $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ se van a evaluar en un punto \mathbf{x}_I , la base de funciones (17) se evalúa en $\mathbf{p}\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_I}{h}\right)$. Por tanto, la expresión (16) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\mathbf{N}^T(\mathbf{x}_I) = \mathbf{p}^T(\mathbf{0})\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}_I)\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}_I}}\mathbf{W}(\mathbf{x}_I) = \mathbf{p}^T(\mathbf{0})\mathbf{C}(\mathbf{x}_I) \quad (19)$$

siendo

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}_I) = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{x}_I)\mathbf{P}_{\Omega_{\mathbf{x}_I}}\mathbf{W}(\mathbf{x}_I) \quad (20)$$

3.2. Cálculo de derivadas

Las derivadas de la función $u(\mathbf{x})$ se obtienen de forma aproximada a partir de las derivadas de la función $\hat{u}(\mathbf{x})$ de forma

$$\frac{\partial u}{\partial x_\alpha} \approx \left. \frac{\partial \hat{u}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_I} = \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \left. \frac{\partial \mathbf{N}_j(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_I} u_j \quad (21)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \approx \left. \frac{\partial^2 \hat{u}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_I} = \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \left. \frac{\partial^2 \mathbf{N}_j(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_I} u_j \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 u}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} &\approx \left. \frac{\partial^3 \hat{u}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_I} \\ &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \left. \frac{\partial^3 \mathbf{N}_j(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_I} u_j \end{aligned} \quad (23)$$

donde los subíndices α, β, γ varían desde 1 hasta 3. Las derivadas de las funciones de forma MLS se pueden obtener derivando la expresión (19):

$$\frac{\partial \mathbf{N}^T(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha} \mathbf{C}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}^T(\mathbf{0}) \frac{\partial \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} &= \frac{\partial^2 \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \mathbf{C}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}^T(\mathbf{0}) \frac{\partial^2 \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + \\ &+ \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\beta} \frac{\partial \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \mathbf{N}^T(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} &= \\ &\frac{\partial^3 \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} \mathbf{C}(\mathbf{x}) + \frac{\partial^2 \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \frac{\partial \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial^2 \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha \partial x_\gamma} \frac{\partial \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\beta} + \\ &+ \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha} \frac{\partial^2 \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\beta \partial x_\gamma} + \frac{\partial^2 \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\beta \partial x_\gamma} \frac{\partial \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\beta} \frac{\partial^2 \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\gamma} + \\ &+ \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\gamma} \frac{\partial^2 \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + \mathbf{p}^T(\mathbf{0}) \frac{\partial^3 \mathbf{C}(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta \partial x_\gamma} \end{aligned} \quad (26)$$

Con el fin de reducir el esfuerzo de cálculo de las derivadas de las funciones de forma, es posible utilizar “*derivadas difusas*”. Las derivadas difusas resultan de no considerar las derivadas sucesivas de la matriz $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ dada por la ecuación (20). Así, las derivadas primeras y segundas “completas” de las funciones de forma se aproximan por medio de las derivadas difusas siguientes:

$$\frac{\partial \mathbf{N}^T(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha} \approx \frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha} \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad (27)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{N}^T(\mathbf{x})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \approx \frac{\partial^2 \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad (28)$$

Los resultados obtenidos con esta técnica son casi tan precisos como con la utilización de las derivadas completas. Además se puede demostrar [34] que las derivadas difusas convergen de modo óptimo a las derivadas exactas. Debido al hecho de haber escalado localmente los monomios de la base polinómica, el término $\mathbf{p}^T(\mathbf{0})$ y sus derivadas sucesivas van a ser vectores con sólo un término no nulo, que tendrá un valor constante de 1 en el caso de $\mathbf{p}^T(\mathbf{0})$ y será dependiente de h para sus derivadas. Por ejemplo, el valor de $\frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha}$ será:

$$\frac{\partial \mathbf{p}^T(\mathbf{0})}{\partial x_\alpha} = \left(0, \frac{1}{h}, 0, 0, \dots, 0 \right) \quad (29)$$

por lo que las derivadas difusas de las funciones de forma se obtienen directamente a partir de las filas de $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ multiplicadas por parámetros dependientes de la longitud de suavizado h . En este trabajo se han calculado las derivadas primeras con su expresión “completa”, mientras que para las derivadas de orden superior se han utilizado derivadas difusas.

3.3. Las funciones de ponderación (funciones *kernel*)

El objetivo del kernel es la de *ponderar* la importancia de cada punto que interviene en la interpolación. Los kernels que se emplean más frecuentemente son *splines* y funciones exponenciales [35]. Así, uno de los kernels más utilizado es el *spline cúbico*:

$$W(s) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}s^2 + \frac{3}{4}s^3 & s \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2-s)^3 & 1 < s \leq 2 \\ 0 & s > 2 \end{cases} \quad (30)$$

siendo $s = \left| \frac{x-x_I}{h} \right|$. Las funciones kernel están definidas en un soporte compacto, limitado por la longitud de suavizado (*smoothing length*) h . En un problema bidimensional, si la misma longitud de suavizado se utiliza para cada dirección, el soporte será un círculo de radio $2h$ (ver Figura 3), mientras que en el caso tridimensional, sería una esfera. Es posible utilizar diferentes longitudes de suavizado para cada dirección, y en ese caso, el kernel debe definirse de algún modo. Así, si se define el kernel como el producto de los kernels de cada dirección, se obtiene un rectángulo en 2D (ver Figura 4) y un prisma en 3D. Otros tipos de definiciones son posibles, pudiéndose obtener otras geometrías (por ejemplo elípticas). También es posible utilizar un kernel para una dirección y otros diferentes para el resto de direcciones. El uso de kernels anisótropos es recomendable en el caso de distribuciones de nodos muy diferentes en cada dirección. Por ejemplo, en el caso de capas límite la discretización espacial se lleva a cabo refinando mucho más la dirección normal a la pared que las otras direcciones. En estos casos la aplicación de un kernel isótropo provoca un mal condicionamiento de la matriz de momentos, pudiendo suceder que \mathbf{M} no sea invertible, o que su cálculo presente errores inaceptables.

En los siguientes apartados se presenta la metodología haciendo uso de un kernel no isótropo.

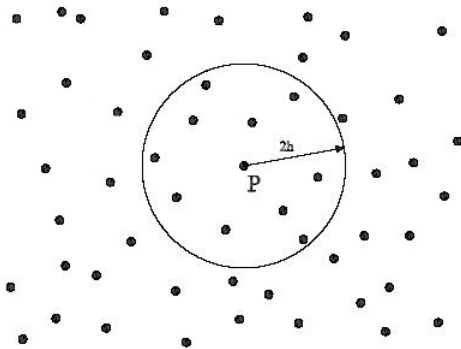


Figura 3. Soporte compacto Ω_x centrado en P

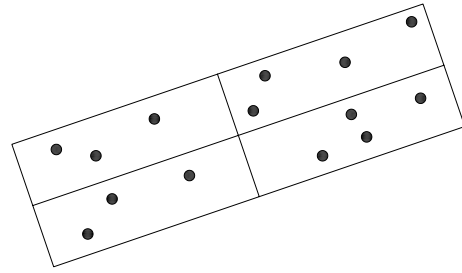


Figura 4. Soporte rectangular, obtenido a partir de diferentes longitudes de suavizado, y tomando el kernel como el producto de los kernels en cada dirección

3.3.1. Caso bidimensional

En este caso, se calculan los ejes principales de inercia de la nube de puntos. La dirección de estos ejes (Figura 5) se puede encontrar mediante

$$\tan(2\alpha) = \frac{2I_{xy}}{I_{xx} - I_{yy}} \quad (31)$$

por lo que, haciendo un cambio de coordenadas, con $\beta = -\alpha$:

$$\mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \mathbf{x} \quad (32)$$

se obtienen las longitudes de suavizado en cada una de las nuevas direcciones:

$$\begin{aligned} h_{x^*} &= \kappa_x \max(\|x_j - x_I\|) \quad j = 1, \dots, n_{x_I} \\ h_{y^*} &= \kappa_y \max(\|y_j - y_I\|) \quad j = 1, \dots, n_{x_I} \end{aligned} \quad (33)$$

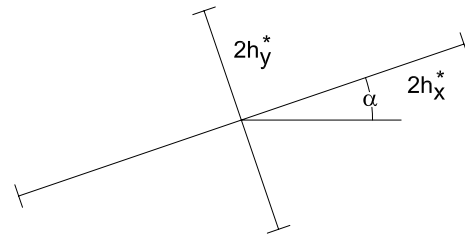


Figura 5. Orientación de los ejes de inercia en 2D

El kernel rectangular vendrá dado por:

$$W = W_{x^*} W_{y^*} \quad (34)$$

En consecuencia, las derivadas en coordenadas globales pueden escribirse como:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial N}{\partial x^*} \\ \frac{\partial N}{\partial y^*} \end{pmatrix} \quad (35)$$

mientras que las derivadas segundas vienen dadas por la expresión:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 N}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 N}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 N}{\partial x^{*2}} & \frac{\partial^2 N}{\partial x^* \partial y^*} \\ \frac{\partial^2 N}{\partial y^* \partial x^*} & \frac{\partial^2 N}{\partial y^{*2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & -\sin \beta \\ \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (36)$$

La obtención de las derivadas de órdenes más elevados es directa.

En el caso de kernels que no sean isótropos, la matriz de momentos está peor condicionada que en el caso isótropo. Así, para realizar la inversión de \mathbf{M} en la práctica, se hace necesario emplear métodos especiales, como el método SVD (*Singular Value Decomposition*).

3.3.2. Caso tridimensional

El procedimiento para construir kernels tridimensionales es el mismo que para el caso bidimensional. En el caso de utilizar un kernel no isótropo basado en splines la implementación en ordenador es un poco más laboriosa debido a la necesidad de calcular los ejes de inercia de cada nube de puntos [30, 36]. Sin embargo, la utilización de un kernel exponencial (37) facilita en gran medida la implementación del código, y presenta una mayor robustez en mallados no estructurados:

$$W(x, x', \kappa) = \frac{e^{-\left(\frac{s}{c}\right)^2} - e^{-\left(\frac{d_m}{c}\right)^2}}{1 - e^{-\left(\frac{d_m}{c}\right)^2}} \quad (37)$$

con $s = |x_i - x^*|$, $d_m = 2max(|x_i - x^*|)$, $i = 1, \dots, n_{x_i}$, $c = \frac{d_m}{\kappa}$. Además κ es un parámetro de forma y x^* es un punto de referencia alrededor del cual se centra la función kernel. El kernel en tres dimensiones se obtiene multiplicando los kernels unidimensionales en cada dirección:

$$\begin{aligned} W(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \kappa_x, \kappa_y, \kappa_z) = \\ W(x, x', \kappa_x)W(y, y', \kappa_y)W(z, z', \kappa_z) \end{aligned} \quad (38)$$

El kernel en dos dimensiones se construye de forma análoga.

Es posible que los parámetros de forma en cada dirección ($\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$) sean diferentes, construyéndose de este modo un kernel no isótropo.

4. Aplicación a las ecuaciones de Navier-Stokes

El método FV-MLS combina la utilización de técnicas de aproximación MLS con un esquema de alto orden de volúmenes finitos del tipo de Godunov generalizado, aplicable a mallas no estructuradas. Como ya se ha comentado, la obtención de altos órdenes en estas mallas con esquemas tradicionales de volúmenes finitos está limitado por el cálculo de los gradientes y de las derivadas sucesivas. La utilización del esquema MLS permite superar esta limitación, dado que permite la obtención de buenas aproximaciones a partir de conjuntos de puntos dispersos. Así, en el ámbito de la Mecánica de Fluidos Computacional, el método FV-MLS utiliza la aproximación MLS para el tratamiento de:

- Flujos no viscosos: Cálculo de gradientes y derivadas sucesivas para la extrapolación de los valores de las variables a las interfaces entre volúmenes de control. Con estas derivadas se consigue una reconstrucción de alto orden de las variables en cada celda, mediante el uso de desarrollos polinómicos de Taylor. Los puntos donde se evaluarán las funciones de forma MLS van a ser los centroides de las celdas.
- Flujos viscosos: Los flujos viscosos se obtienen directamente en la interfaz. Como se verá posteriormente, este enfoque permite una discretización más precisa y mucho más clara de los términos difusivos que las empleadas habitualmente por otros métodos de alto orden. Los puntos donde se evaluarán las funciones de forma MLS van a ser los puntos de integración en las interfaces de los volúmenes de control.

4.1. Ecuaciones de Navier-Stokes y modelo numérico

Las ecuaciones de Navier-Stokes tridimensionales escritas en forma conservativa son:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\mathbf{F}_x - \mathbf{F}_x^V)}{\partial x} + \frac{\partial (\mathbf{F}_y - \mathbf{F}_y^V)}{\partial y} + \frac{\partial (\mathbf{F}_z - \mathbf{F}_z^V)}{\partial z} = 0 \quad (39)$$

siendo

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \\ \rho E \end{pmatrix} \quad (40)$$

$$\mathbf{F}_x = \begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_x v_z \\ \rho v_x H \end{pmatrix} \quad \mathbf{F}_y = \begin{pmatrix} \rho v_y \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_y^2 + p \\ \rho v_y v_z \\ \rho v_y H \end{pmatrix} \quad \mathbf{F}_z = \begin{pmatrix} \rho v_z \\ \rho v_x v_z \\ \rho v_y v_z \\ \rho v_z^2 + p \\ \rho v_z H \end{pmatrix} \quad (41)$$

$$\mathbf{F}_x^V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ v_x \tau_{xx} + v_y \tau_{xy} + v_z \tau_{xz} - q_x \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F}_y^V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ v_x \tau_{xy} + v_y \tau_{yy} + v_z \tau_{yz} - q_y \end{pmatrix} \quad (42)$$

$$\mathbf{F}_z^V = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zz} \\ v_x \tau_{xz} + v_y \tau_{yz} + v_z \tau_{zz} - q_z \end{pmatrix}$$

con

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \quad (43)$$

$$H = E + \frac{p}{\rho} \quad (44)$$

y

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2\mu \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \\ \tau_{yy} &= 2\mu \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (45)$$

$$\tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \quad (46)$$

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{xz} = \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{yz} = \mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) \quad (47)$$

$\mathcal{F} = (\mathbf{F}_x, \mathbf{F}_y, \mathbf{F}_z)$ es el flujo no viscoso, y $\mathcal{F}^V = (\mathbf{F}_x^V, \mathbf{F}_y^V, \mathbf{F}_z^V)$ el flujo viscoso. \mathbf{U} es el vector de variables conservativas, $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ es la velocidad, μ es la viscosidad efectiva del fluido, H es la entalpía, E es la energía total, e es la energía interna y ρ es la densidad.

El flujo térmico $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$, se calcula mediante la ley de Fourier:

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad q_z = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \quad (48)$$

Se asume que la viscosidad depende de la temperatura, y que esta dependencia sigue la ley de Sutherland:

$$\mu = \mu_\infty \frac{T_{ref} + S_0}{T + S_0} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{1,5} \quad (49)$$

donde el subíndice *ref* se refiere a un valor de referencia y $S_0 = 110,4K$ es una constante empírica (Temperatura de Sutherland).

Las ecuaciones de Euler se obtienen despreciando el efecto de la viscosidad, con lo que resultan de considerar nulos los flujos viscosos, es decir, $\mathcal{F}^V = (0, 0, 0)$

La ecuación a resolver es la que resulta de aplicar la discretización resultante de la aplicación del método de volúmenes finitos:

$$V_I \frac{\partial \mathbf{U}_I}{\partial t} = \sum_{i \text{ edge}=1}^{nedge_I} \sum_{j \text{ gau}=1}^{ngau_I} [(\mathcal{F}^V - \mathcal{F}) \cdot \mathbf{n}]_{igau} \mathcal{W}_{igau} \quad (50)$$

en la ecuación (50), V_I es el área (en 2D) o el volumen (en 3D) del volumen de control I , $nedge_I$ es el número de aristas (2D) o caras (3D) de I , \mathbf{U}_I es el valor medio de \mathbf{U} en I (asociado al centroide), $ngau_I$ es el número de puntos de cuadratura y \mathcal{W}_{igau} son los pesos de integración.

En este trabajo se han usado tres puntos de cuadratura en la interfaz, utilizando la reconstrucción MLS cúbica.

4.2. La nube de puntos

Al combinar el método MLS con un esquema de volúmenes finitos, es necesario definir los puntos que van a intervenir en la reconstrucción MLS. El método MLS es capaz de reconstruir una función a partir de una nube de puntos dispersos, ya que se trata de un método de aproximación "sin malla". Por otro lado, el método FV-MLS, al estar basado en un esquema del tipo volúmenes finitos, necesita una malla y los valores de las variables se calculan o bien en los centroides de

cada volumen finito o bien en los vértices, según sea el esquema de volúmenes finitos empleado. En este caso, el esquema que se ha utilizado calcula los valores de las variables conservadas en cada centroide. Así, los centroides van a ser los puntos que conforman las diferentes nubes para la aplicación del método MLS.

Para llevar a cabo los cálculos, es necesario definir una serie de plantillas (*stencils*) que determinen la nube de nodos para cada punto donde se evalúa la aproximación. Si las nubes de vecinos no cambian en el tiempo, sólo es necesario realizar la construcción de las plantillas una vez, como parte del preproceso. Para evitar que la matriz de momentos \mathbf{M} sea singular o esté mal condicionada, la nube de puntos vecinos debe cumplir ciertos requisitos. Así, el número de vecinos debe ser superior a m (el número de funciones de la base). En la práctica, el número de vecinos se toma un poco mayor que m . Es importante recordar que el tamaño de \mathbf{M} no depende del número de vecinos incluidos en la nube, sino del número de funciones de la base. Por otra parte, la nube debe ser lo más compacta posible para evitar la influencia de puntos excesivamente alejados del punto de evaluación y mantener el carácter local y la eficiencia del esquema.

En las Figuras 6 y 7 se muestran las plantillas utilizadas para los casos bidimensionales. Es posible apreciar en ellas que en las plantillas de los puntos próximos a la pared se han añadido una serie de *celdas fantasma*. Estas celdas tienen sus centroides situados en los puntos medios de los lados sobre el contorno e intervienen en la reconstrucción como un punto más de la nube. Su función es la de mejorar la imposición de las condiciones de contorno, y su valor se obtiene extrapolando desde las celdas adyacentes o imponiendo en ellos el valor de las condiciones de contorno, si eso fuera posible.

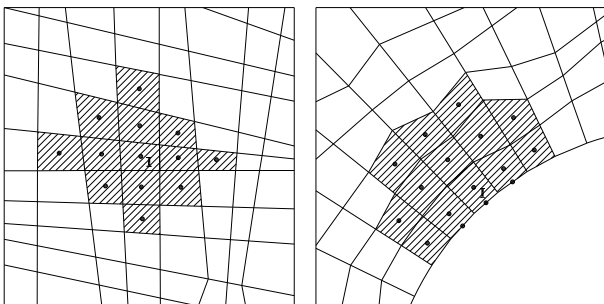


Figura 6. Plantilla para la aproximación MLS. Evaluación en los centroides: puntos interiores y paredes

En el caso tridimensional las plantillas siguen el mismo esquema. En el caso de celdas adyacentes a la pared, se buscan las celdas vecinas más cercanas hasta com-

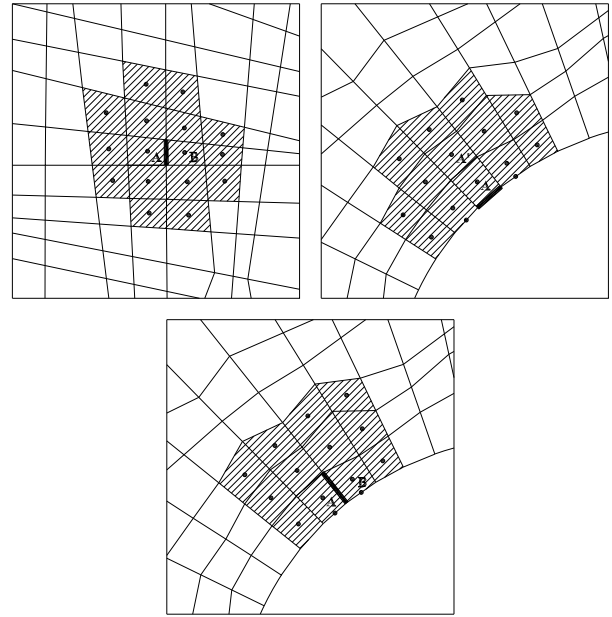


Figura 7. Plantilla para la aproximación MLS. Evaluación en las aristas: puntos interiores y paredes

pletar el número de celdas requerido para que la matriz de momentos \mathbf{M} esté bien condicionada.

Aunque el empleo de nubes adaptables (tipo ENO) es posible, en este trabajo sólo se han empleado nubes fijas, definidas en el preproceso. Una vez determinado el conjunto de celdas que forman la nube de puntos para la utilización del método MLS, se puede obtener la longitud de suavizado h que define la medida del soporte compacto del kernel. Ésta es proporcional a la máxima distancia entre el punto de evaluación \mathbf{x}_I y los nodos de la nube:

$$h = k \max(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I\|) \quad (51)$$

Los valores de k más adecuados están entre 0.52 y 0.7, si se usa como kernel el spline cúbico (30). Con el kernel exponencial (37), se ha tomado el valor $k = 1$. Estos valores no tienen por qué ser los mismos para las nubes definidas para los centroides (empleadas para los términos hiperbólicos) y las definidas para los puntos de integración en las interfaces (empleadas para los términos viscosos) que se muestran en la Figura 7. La elección del valor de k , así como de los valores de los parámetros de forma κ en el caso del kernel exponencial, tiene influencia sobre las propiedades de dispersión y disipación de la metodología de volúmenes finitos con interpolación basada en esquemas de mínimos cuadrados móviles [37].

4.3. La aproximación MLS

Los esquemas de alto orden estándar se construyen mediante la sustitución de una representación constante de la solución dentro de cada volumen de control por una representación *continua* (normalmente polinomial) de las variables del flujo en el interior de cada celda. Debido al hecho de que las variables reconstruidas continúan siendo discontinuas en la interfaz de las celdas, la discretización de los términos viscosos debe realizarse con precaución.

Este procedimiento es muy diferente al del método FV-MLS, que trabaja con valores *puntuales* de las variables conservadas, asociadas con los centroides de las celdas. La representación espacial dada por la aproximación MLS es *continua* y de un alto orden de precisión. De este modo la aproximación de los términos elípticos (por ejemplo, los términos viscosos en las ecuaciones de Navier-Stokes) es directa. Esta facilidad para la aproximación de los términos viscosos representa una gran ventaja frente a métodos como el de Galerkin Discontinuo, en el que la discretización de los términos viscosos es problemática al tratarla de manera discontinua.

El tratamiento de los términos hiperbólicos es diferente. En este caso, se *rompe* la representación continua de la solución para obtener una representación continua *en cada celda* mediante el uso de series de Taylor. De este modo se obtiene un método que puede aprovechar el buen funcionamiento de la técnica de volúmenes finitos con los términos hiperbólicos (ya que es un método tipo Godunov generalizado) pero que presenta una discretización mucho más clara y precisa de los términos elípticos, al mantener la representación continua de estos términos. En las secciones siguientes se muestra en detalle cómo se realiza el proceso de reconstrucción.

Es importante destacar el hecho de que al utilizar aproximaciones MLS las derivadas se calculan a partir de puntos situados en todas las direcciones (en una celda interior estándar). De esta forma, a diferencia de la metodología de cálculo de derivadas utilizado tradicionalmente en esquemas MUSCL, la información no proviene sólo de una dirección. Esto implica una precisión mucho mayor de las derivadas calculadas mediante MLS. Por otra parte, es conocido el hecho de que, en el caso de ondas propagándose en direcciones oblicuas a la malla, el carácter unidimensional en el cálculo de las derivadas introduce disipación adicional. El carácter multidimensional de las derivadas calculadas a partir de las aproximaciones MLS reduce la disipación adicional introducida en estos casos.

4.4. Cálculo de Flujos

4.4.1. Flujos no viscosos

Para aplicar un esquema de volúmenes finitos es preciso un método de reconstrucción para evaluar las variables en los puntos de integración en las interfaces de cada volumen de control. Una forma común de realizar esta reconstrucción es mediante el empleo de series de Taylor. Así, la reconstrucción lineal de las variables conservadas en el interior de cada celda I se puede expresar como:

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (52)$$

\mathbf{U}_I es el valor medio de \mathbf{U} en la celda I (valor asociado al centroide), \mathbf{x}_I denota las coordenadas cartesianas del centroide y $\nabla \mathbf{U}_I$ es el gradiente de la variable en el centroide. Se asume que el gradiente es constante en cada celda, y que la variable reconstruida es discontinua entre dos celdas. Las derivadas necesarias para la reconstrucción se calculan empleando el método MLS. Con esta operación se rompe la continuidad de la representación espacial de la variable dada por los centroides de las celdas.

Análogamente, la reconstrucción cuadrática viene dada por:

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)^T \mathbf{H}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (53)$$

donde \mathbf{H}_I es la matriz hessiana evaluada en el centroide de la celda I .

Para una reconstrucción cúbica:

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)^T \mathbf{H}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \frac{1}{6} \Delta^2 \mathbf{x}_I^T \mathbf{T}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (54)$$

con

$$\Delta^2 \mathbf{x}_I^T = \left((x - x_I)^2 (y - y_I)^2 (z - z_I)^2 \right) \quad (55)$$

$$\mathbf{T}_I = \begin{pmatrix} \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x^3} & 3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x^2 \partial y} & 3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x^2 \partial z} \\ 3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x \partial y^2} & \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial y^3} & 3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial y^2 \partial z} \\ 3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x \partial z^2} & 3 \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial y \partial z^2} & \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial z^3} \end{pmatrix} \quad (56)$$

Como ya se ha comentado, en problemas no estacionarios es necesario modificar la reconstrucción para

expresarla en términos de valores promedios. Así, se introducen términos adicionales en (53) y (54) que aseguran la conservación de la media:

$$\frac{1}{V_I} \int_{\mathbf{x} \in \Omega_I} \mathbf{U}(\mathbf{x}) d\Omega = \mathbf{U}_I \quad (57)$$

siendo V_I el área del volumen de control en el caso bidimensional y su volumen en el caso tridimensional. De este modo, la reconstrucción cuadrática para problemas no estacionarios se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\mathbf{x}) &= \mathbf{U}_I + \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I)^T \mathbf{H}_I (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \\ &- \frac{1}{2V_I} \left[I_{xx} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial x^2} + 2I_{xy} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial x \partial y} + 2I_{xz} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial x \partial z} + \right. \\ &\left. + 2I_{yz} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial y \partial z} + I_{yy} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial y^2} + I_{zz} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (58)$$

con:

$$\begin{aligned} I_{xx} &= \int_{\Omega} (x - x_I)^2 d\Omega, \\ I_{yy} &= \int_{\Omega} (y - y_I)^2 d\Omega, \\ I_{zz} &= \int_{\Omega} (z - z_I)^2 d\Omega \\ I_{xy} &= \int_{\Omega} (x - x_I)(y - y_I) d\Omega, \\ I_{xz} &= \int_{\Omega} (x - x_I)(z - z_I) d\Omega \\ I_{yz} &= \int_{\Omega} (y - y_I)(z - z_I) d\Omega \end{aligned} \quad (59)$$

La incorporación de estos términos no reduce el orden de la aproximación dada por (53), y permite obtener una reconstrucción basada en promedios en lugar de en valores puntuales. De este modo es posible la utilización de la técnica de *mass lumping*. En el caso de problemas no estacionarios permite alcanzar hasta tercer orden.

Las derivadas de las variables se calculan directamente en los centroides de las celdas, mediante MLS. Así los gradientes de una función vectorial \mathbf{U} se escriben como:

$$\nabla \mathbf{U}_I = \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \nabla N_j(\mathbf{x}_I)$$

mientras que las derivadas segunda y tercera se obtienen de:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathbf{U}_I}{\partial x^2} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^2 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 \mathbf{U}_I}{\partial x \partial y} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^2 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 \mathbf{U}_I}{\partial y^2} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^2 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial y^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x^3} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^3 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial x^3} & \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x^2 \partial y} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^3 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial x^2 \partial y} \\ \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial x \partial y^2} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^3 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial x \partial y^2} & \frac{\partial^3 \mathbf{U}_I}{\partial y^3} &= \sum_{j=1}^{n_{\mathbf{x}_I}} \mathbf{U}_j \frac{\partial^3 N_j(\mathbf{x}_I)}{\partial y^3} \end{aligned}$$

Como se ha visto anteriormente, en lugar de calcular las derivadas completas es posible la utilización de derivadas difusas.

Una vez calculado el valor de las variables en los puntos de integración del contorno de las celdas, se utiliza una función de flujo numérico para evaluar los flujos no viscosos. Aquí se ha utilizado el flujo de Hänel [38] para los problemas con ondas de choque y el flujo de Roe [26] para los problemas sin discontinuidades, ya que son dos de los más utilizados en la bibliografía. Sin embargo, es posible utilizar cualquier otra función de flujo numérico.

En caso de soluciones que no sean suaves, es decir, en presencia de ondas de choque, es necesario el uso de algún método de limitación. En este caso es posible utilizar cualquiera de las técnicas desarrolladas para métodos de volúmenes finitos. La técnica más habitual en volúmenes finitos es el uso de limitadores de pendiente (*slope limiters*). Sin embargo, esta técnica no es directamente aplicable a métodos numéricos de alto orden. En el Apartado 5 se presenta una metodología desarrollada por los autores para detección de ondas de choque, que permite generalizar el uso de los limitadores de pendiente con métodos de orden mayor que dos.

4.4.2. Flujos viscosos

La discretización de los términos viscosos es problemática para los métodos que emplean aproximaciones polinomiales continuas a trozos. En los términos hiperbólicos tiene sentido hablar de una dirección de propagación de la información, que permite plantear un problema de Riemann a ambos lados de la interfaz y definir un único valor del flujo. Sin embargo, en el caso de los términos viscosos, de carácter elíptico, esto no es posible. Así, por ejemplo, los esquemas de segundo orden emplean a menudo la media de las derivadas de las variables del flujo a cada lado de la interfaz para calcular los flujos viscosos. Esto no es aceptable para aproximaciones de orden más elevado. Métodos del tipo Galerkin Discontinuo (DG), recurren a descomponer el sistema de segundo orden original en otro de primer orden. El problema de esta aproximación radica en la introducción de grados de libertad adicionales. Además, aparece la necesidad de introducir un nuevo flujo numérico, cuya definición plantea problemas teóricos y que constituye

una de las diferencias entre unos métodos DG y otros. El método FV-MLS realiza una reconstrucción *centrada* de los flujos viscosos en los puntos de integración de las interfaces, usando la información de las celdas vecinas mediante el empleo del método MLS. Es importante remarcar que esta reconstrucción es *continua* y de alto orden.

La evaluación de las tensiones viscosas (47) requiere interpolar el vector velocidad $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$, la temperatura T , y sus gradientes correspondientes $\nabla \mathbf{v}$ y ∇T , en cada punto de integración \mathbf{x}_{iq} . Mediante el uso de las funciones de forma MLS, éstos pueden obtenerse como:

$$\mathbf{v}_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} \mathbf{v}_j N_j(\mathbf{x}_{iq}), \quad T_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} T_j N_j(\mathbf{x}_{iq}) \quad (60)$$

y

$$\nabla \mathbf{v}_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} \mathbf{v}_j \otimes \nabla N_j(\mathbf{x}_{iq}), \quad \nabla T_{iq} = \sum_{j=1}^{n_{iq}} T_j \nabla N_j(\mathbf{x}_{iq}) \quad (61)$$

donde n_{iq} es el número de centroides vecinos (que pertenecen a la nube de puntos del punto de integración iq). Los flujos difusivos se evalúan entonces mediante la ecuación (42).

Así, este método permite que el orden de la reconstrucción de los términos viscosos sea el mismo que el obtenido en la reconstrucción de los flujos no viscosos [23].

Es importante remarcar que en mallas fijas, el cálculo de las funciones de forma MLS y de sus derivadas se realiza sólo una vez, al principio de los cálculos y como parte del preproceso. Esto implica que el coste adicional de cálculo es reducido. De este modo, el coste adicional en el cálculo de las derivadas se reduce a realizar la operación dada por la ecuación (21), que implica $N \times n_{\mathbf{x}_I}$ productos y $N \times n_{\mathbf{x}_I}$ sumas adicionales por cada derivada de cualquier orden ($n_{\mathbf{x}_I}$ es el número de elementos en cada plantilla). Cabe mencionar que el orden del esquema es aumentado sin incrementar el número de grados de libertad. Los resultados, en términos de precisión, son comparables a los obtenidos con el método de Galerkin discontinuo [23].

5. Aplicación de filtros MLS Para la detección de ondas de choque

La aparición de ondas de choque es un fenómeno frecuente en problemas de flujo compresible, y representa un problema añadido a la simulación de tales flujos. El teorema de Godunov establece que no es posible la existencia de métodos lineales que sean monótonos y de

orden mayor que uno, por lo que es necesario recurrir a técnicas especiales para la resolución de problemas en los que aparezcan fuertes gradientes, como es el caso de las ondas de choque. En los apartados anteriores se ha presentado la formulación de un método de alto orden para la simulación de flujo compresible. Sin embargo, para poder aprovechar toda su precisión en flujos en los que se presenten ondas de choque, es necesario introducir alguna técnica para que el esquema numérico mantenga su estabilidad y conserve su precisión. Entre las técnicas posibles para la resolución de flujos con ondas de choque con esquemas lineales están la introducción de disipación artificial o la construcción de métodos TVD (*Total Variation Diminishing*) [46]. Un enfoque diferente lo dan los métodos ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) y WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) [13,14], en los que se escoge el *stencil* que menos oscile entre todos los posibles, o una combinación convexa de ellos.

La aplicación de limitadores de pendiente (*slope limiters*), ha demostrado ser una técnica robusta y que ha dado buenos resultados prácticos. Normalmente se han diseñado para aproximaciones de segundo orden, y limitan la reconstrucción de la siguiente forma:

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \chi_I \nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \quad (62)$$

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

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_I + \chi_I (\nabla \mathbf{U}_I \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) + \dots) \quad (63)$$

Sin embargo, la aplicación del coeficiente de limitación (χ_I) (desarrollado para limitar las primeras derivadas) a las derivadas de orden superior presenta problemas, que pueden dar lugar a anomalías en los resultados de la simulación.

Así, si se quiere utilizar este tipo de métodos con esquemas de orden elevado, es necesario introducir mejoras en las técnicas de limitación. Un posible procedimiento consiste en la utilización selectiva del proceso de limitación sólo en aquellos puntos en los que sea necesario. En el resto de puntos se continuará con el esquema de alto orden. Este enfoque requiere el desarrollo de técnicas de detección, que indiquen los puntos en los que se activará la limitación.

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

de forma MLS, aprovechando sus propiedades multiescala. Así, una propiedad interesante de las aproximaciones MLS es su conexión con *wavelets*, donde se utiliza para estimación de error y adaptatividad [47]. Las *wavelets* se definen por medio de una función *wavelet* (Ψ) y una función de escala. Es posible definir una función *wavelet* a partir de las funciones de forma MLS.

Cuando se realiza una aproximación MLS:

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} u_j N_j^h(\mathbf{x}) \quad (64)$$

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

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

De este modo, las reconstrucciones MLS de \mathbf{U} con diferente nivel de resolución se escriben como;

$$\mathbf{U}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j N_j^{\kappa_H}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{U}^{\kappa_L}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j N_j^{\kappa_L}(\mathbf{x}) \quad (65)$$

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

Así, la *función wavelet* puede escribirse como:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{N}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) - \mathbf{N}^{\kappa_L}(\mathbf{x}) \quad (66)$$

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

$$\mathbf{U}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^{\kappa_L}(\mathbf{x}) + \Psi(\mathbf{x}) \quad (67)$$

siendo

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j \Phi_j(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_I} \mathbf{U}_j (\mathbf{N}^{\kappa_H}(\mathbf{x}) - \mathbf{N}^{\kappa_L}(\mathbf{x})) \quad (68)$$

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

La función $\Psi(\mathbf{x})$ actúa como un indicador de la regularidad de $\mathbf{U}(\mathbf{x})$. Así, cuando $\Psi(\mathbf{x})$ supere cierto valor, el limitador se activará, permaneciendo desactivado en todos los demás puntos. Este procedimiento podría ser visto como una generalización para mallas no estructuradas del filtrado selectivo basado en *wavelets* propuesto en [48] para diferencias finitas. De hecho, la operación realizada en (68) es un filtrado de paso alto.

Sin embargo, surge el problema de definir a partir de qué valor de $\Psi(\mathbf{x})$ se considera que la solución no es regular. Así, es preciso definir el *valor umbral* a partir del cual se activará el limitador. En este trabajo se ha tomado la densidad como variable de referencia, y se define el valor umbral en función del gradiente de la variable de referencia en la celda I .

$$T_v = C_{lc} |\nabla \rho|_I (A_I)^{\frac{1}{d}} / M \quad (69)$$

siendo M el número de Mach, A_I es el tamaño (área en 2D) del volumen de control I , d es el número de dimensiones espaciales del problema, y C_{lc} es un parámetro. Si $C_{lc} = 0$, entonces no hay limitación selectiva. Es evidente que a medida que el parámetro C_{lc} se incrementa, el esquema tenderá a disminuir el número de celdas limitadas. Esto puede causar problemas de estabilidad, que se resuelven disminuyendo el valor del parámetro. Lamentablemente, actualmente no es posible estimar a priori un valor óptimo del parámetro, y éste dependerá del problema considerado. Sin embargo, en nuestra experiencia, un valor de $C_{lc} = 0,32$ es adecuado en términos de precisión y robustez. Este valor ha sido utilizado en todos los ejemplos numéricos presentados en este trabajo. Una línea actual de investigación de nuestro grupo consiste en el desarrollo de técnicas de determinación automática de este coeficiente.

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

$$|\Psi_\rho| = \left| \sum_{j=1}^{n_I} \rho_j (N_j^{\kappa_H}(\mathbf{x}) - N_j^{\kappa_L}(\mathbf{x})) \right| > T_v \quad (70)$$

Cuando se aplica un limitador el efecto es el de transformar las propiedades del esquema numérico en las que tendría un esquema de menor orden. Además,

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

Por motivos de estabilidad, cuando el detector active el algoritmo de limitación en una celda determinada, se activará en todas las celdas de su *stencil*.

En los ejemplos numéricos de los Subapartados 6.4, 6.5 se ha empleado el limitador de Barth y Jespersen [8]. Este método impone *monotonidad* en la solución tras realizar la reconstrucción polinómica en el interior de cada celda. Para ello se *limita* el valor del gradiente y de las derivadas sucesivas de forma que la reconstrucción no cree ningún nuevo máximo o mínimo según la ecuación (63). Cuando el limitador está activo, la reconstrucción vuelve a ser de primer orden. Cuando $\chi_I = 0$ la limitación es total y el esquema es de primer orden, mientras que si $\chi_I = 1$ no hay limitación. Así, la variable $U(\mathbf{x})$ verifica que

$$U^{min} \leq U(\mathbf{x})_I \leq U^{max} \quad (71)$$

siendo

$$U^{min} = \min_{j \in \mathcal{A}_I} (U_j) \quad U^{max} = \max_{j \in \mathcal{A}_I} (U_j) \quad (72)$$

en donde \mathcal{A}_I es el conjunto de los primeros vecinos de la celda I , siendo posibles otras configuraciones. La condición (71) se impone en los puntos de integración, de modo que en cada punto de cuadratura se calcula el valor sin limitar U_i^q , y se halla χ_I^q de acuerdo con la siguiente expresión:

$$\chi_I^q = \begin{cases} \min \left(1, \frac{U^{max} - U_I}{U_I^q - U_I} \right) & U_I^q - U_I > 0 \\ \min \left(1, \frac{U^{min} - U_I}{U_I^q - U_I} \right) & U_I^q - U_I < 0 \\ 1 & U_I^q - U_I = 0 \end{cases} \quad (73)$$

Cuando se aplica limitación selectiva, este algoritmo es aplicado sólo en las celdas en las que se verifica la expresión dada por (70). En general, el método propuesto es aplicable a cualquier algoritmo de limitación de pendiente.

6. Ejemplos numéricos

A continuación se muestran una serie de ejemplos numéricos. Con el primero de ellos, la propagación de un pulso acústico, se comprobará el orden de convergencia del método. Seguidamente se resuelve la ecuación de onda lineal unidimensional, con la que se examinará la influencia de los parámetros de la función kernel en las propiedades del esquema numérico. Además, utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelve el problema de dos vórtices rotando en torno al mismo centro,

y se obtiene el campo acústico producido. Este problema muestra la precisión y estabilidad de la formulación propuesta. La baja amplitud de las ondas que forman el campo acústico hace que cualquier inestabilidad del esquema numérico lo distorsione.

El caso del flujo subsónico alrededor de un perfil aerodinámico tiene por finalidad mostrar el incremento en precisión obtenido con la utilización del método de detección de choques. Finalmente, para mostrar la efectividad de dicha metodología, se muestran ejemplos de flujo transónico y supersónico.

En todos los ejemplos se ha utilizado un soporte para los centroides como el mostrado en la Figura 6, formado por 13 elementos para celdas interiores y 16 (13 elementos + 3 celdas fantasma) para las celdas próximas a la pared. En el caso de los flujos viscosos se han usado soportes como los utilizados en la Figura 7.

6.1. Propagación de un pulso acústico

A continuación, como comprobación del orden de convergencia se resuelve el problema de la propagación de un pulso acústico, con el método FV-MLS de tercer orden.

Las ecuaciones de Euler se resuelven en el cuadrado $[-50, 50] \times [-50, 50]$, que es lo suficientemente extenso como para evitar los efectos de las reflexiones en los contornos en el instante de tiempo en el que se realiza la comparación.

La solución inicial está dada por:

$$\rho = 1 \quad (74)$$

$$p_0 = 1/\gamma \quad (75)$$

$$p = p_0 + \epsilon_1 \cdot e^{-\alpha_1 r^2} \quad (76)$$

$$v_x = v_y = 0 \quad (77)$$

donde v_x, v_y son las componentes de la velocidad, p es la presión, ρ es la densidad, $\epsilon_1 = 0,01$ es la amplitud del pulso y r es la distancia desde el origen de coordenadas.

El parámetro $\alpha_1 = \frac{\ln 2}{b^2}$ está relacionado con la mitad del ancho de la curva gaussiana, b , que se toma como $b = 3$. El subíndice 0 indica el estado sin perturbar en las ecuaciones (75) y (76). La solución analítica ha sido deducida en [39] por Tam y Webb, y tiene como expresión:

$$p = \frac{\epsilon_1}{2\alpha_1} \int_0^\infty e^{\left(\frac{-\xi^2}{4\alpha_1}\right)} \cos(\xi t) J_0(\xi \eta) \xi d\xi \quad (78)$$

donde en este caso $\eta \equiv r$, y J_0 es la función de Bessel de orden cero.

Para la discretización temporal, se ha utilizado un método Runge-Kutta de cuarto orden:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{U}_1 &= \mathbf{U}^n + \frac{1}{3} \Delta t k_1 \\
 \mathbf{U}_2 &= \mathbf{U}^n + \left(k_2 - \frac{1}{3} k_1 \right) \Delta t \\
 \mathbf{U}_3 &= \mathbf{U}^n + (k_1 - k_2 + k_3) \Delta t \\
 \mathbf{U}^{(n+1)} &= \mathbf{U}^n + \frac{1}{8} (k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4) \Delta t \\
 k_1 &= \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) \quad k_2 = \mathbf{L}(\mathbf{U}_1) \\
 k_3 &= \mathbf{L}(\mathbf{U}_2) \quad k_4 = \mathbf{L}(\mathbf{U}_3)
 \end{aligned} \tag{79}$$

El paso temporal utilizado se ha escogido lo suficientemente pequeño para minimizar los errores debidos a la discretización temporal. Las características de convergencia del esquema de volúmenes finitos se evalúan calculando la norma L_2 del error en la presión para un tiempo adimensional $t = 10,606$ en una serie de mallas cartesianas refinadas sucesivamente. Los resultados se presentan en la Tabla 1, y confirman que el esquema de volúmenes finitos alcanza la convergencia correcta (de tercer orden).

Tabla 1. Convergencia espacial del método FV-MLS de tercer orden en el problema del pulso acústico

Malla	Error (Norma L_2)	Ratio
40×40	7,14 E-05	—
50×50	4,26 E-05	2,31
60×60	2,60 E-05	2,71
65×65	2,07 E-05	2,75
70×70	1,67 E-05	2,78
75×75	1,38 E-05	2,84

6.2. Ecuación de onda lineal unidimensional

Para ilustrar le influencia del parámetro de la función kernel sobre el funcionamiento del método, presentamos un ejemplo unidimensional. Este ejemplo es el primer caso del *First ICASE/LaRC Workshop on Benchmark Problems in Computational Aeroacoustics* [41], y está diseñado con el fin de evaluar las propiedades de dispersión y disipación de un método numérico. El objetivo es resolver la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{80}$$

con la siguiente condición inicial

$$u(x, 0) = 0,5e^{\left[-\ln(2)\left(\frac{x}{3}\right)^2\right]} \tag{81}$$

El problema se define con variables adimensionales con las siguientes escalas:

- Escala de longitud = Δx
- Escala de velocidad = c_∞ (velocidad del sonido ambiente)
- Escala de tiempo = $\frac{\Delta t}{c_\infty}$
- Escala de densidad = ρ_∞ (densidad ambiente)
- Escala de presión = $\rho_\infty c_\infty^2$

La onda a transportar se puede considerar como la suma de multitud de ondas armónicas de diferentes frecuencias y amplitudes. Así, el esquema va a tener que resolver ondas de frecuencias muy dispares, y si no es capaz de resolverlas adecuadamente, la solución será una onda muy distorsionada. El dominio de cálculo se define entre $-20 \leq x \leq 450$, y se obtienen resultados para diferentes instantes de tiempo, $t = 100$, $t = 400$.

En las Figuras 8 y 9 se muestra la solución para varios valores del parámetro de forma κ_x del kernel exponencial (37). Se observa el mayor carácter disipativo de la solución con $\kappa_x = 4$, junto con mayores errores de dispersión. Así, un valor recomendable sería $\kappa_x = 1$, ya que el valor de $\kappa_x = 6$ marca el límite de estabilidad del esquema numérico y podría conducir a inestabilidades en problemas multidimensionales. Un análisis más detallado de la influencia del kernel se puede consultar en [40]. Por otra parte, cuando se utiliza el spline cúbico, la variación del parámetro k no tiene tanta influencia en la solución como en el caso del kernel exponencial. Para este kernel, un valor de $k = 0,6$ ó $k = 0,7$ ofrece resultados óptimos en términos de estabilidad y precisión. Para este kernel, el límite de estabilidad viene dado por un valor de $k = 0,5$.

En problemas de propagación de ondas, la resolución del esquema numérico es crucial para la obtención de una solución precisa. Con resolución nos referimos a que el número de onda modificado del esquema numérico coincida con el número de onda real en el mayor rango posible del espectro. Así, el aumento de orden del esquema FV-MLS hace que la resolución espectral aumente y que además la disipación se introduzca en frecuencias más altas [40]. En la Figura 10 se muestra una comparativa en dos instantes $t = 100$ y $t = 400$, con $\Delta x = 1$ entre el método FV-MLS de tercer orden y el método MUSCL de segundo orden con derivadas calculadas mediante diferencias centradas de segundo y cuarto orden. Se muestra también el método FV-MLS de segundo orden, que coincide con los resultados obtenidos por el método MUSCL con derivadas de cuarto

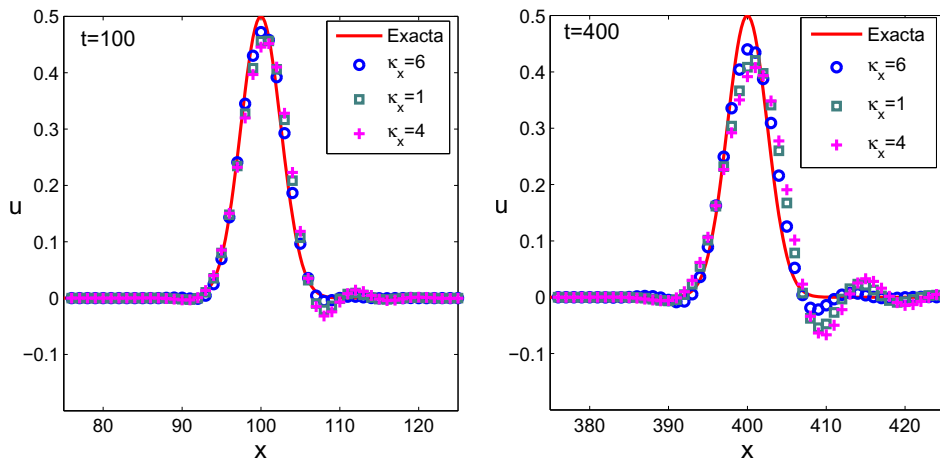


Figura 8. Solución FV-MLS de tercer orden al primer ejemplo del *First ICASE/LaRC Workshop on Benchmark Problems in Computational Aeroacoustics* para diferentes instantes de tiempo y diferentes valores del parámetro de forma (κ_x) del kernel exponencial (37), con $CFL = 0,6$, $\Delta x = 1$

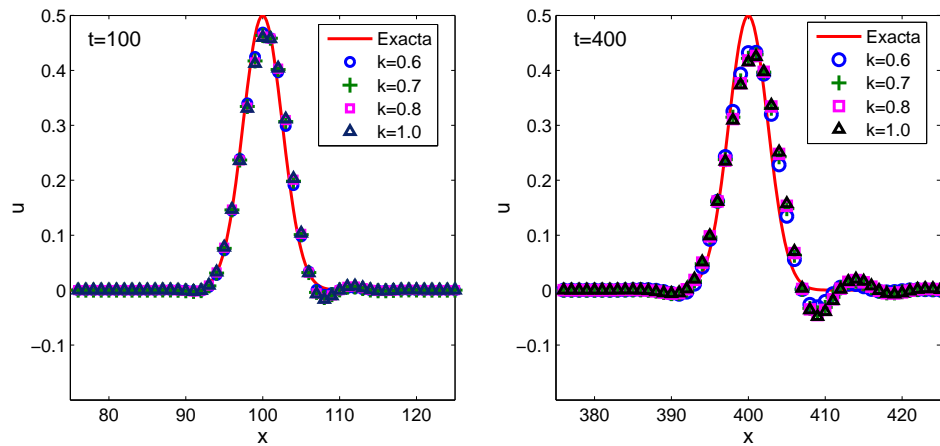


Figura 9. Solución FV-MLS de tercer orden al primer ejemplo del *First ICASE/LaRC Workshop on Benchmark Problems in Computational Aeroacoustics* para diferentes instantes de tiempo y diferentes valores del parámetro de forma (k) del kernel spline cúbico, con $CFL = 0,6$, $\Delta x = 1$

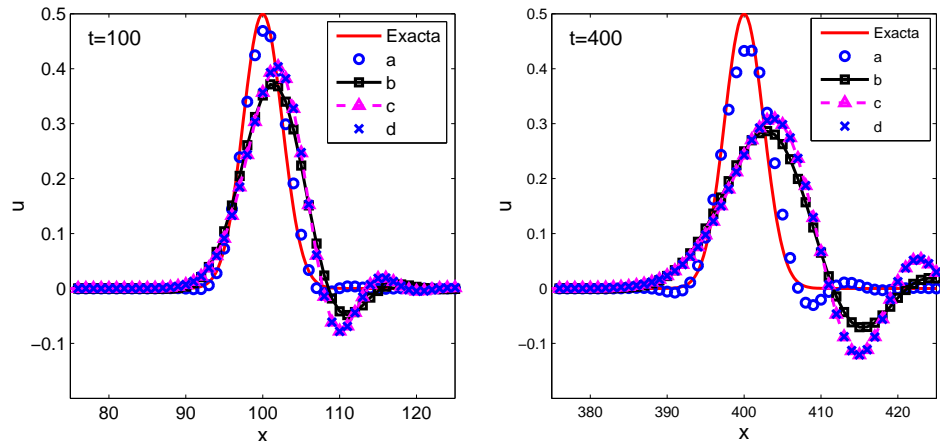


Figura 10. Primer ejemplo del *First ICASE/LaRC Workshop on Benchmark Problems in Computational Aeroacoustics*. Se muestra una comparativa en $t = 100$ y $t = 400$, con $\Delta x = 1$ entre el método FV-MLS de tercer orden (a) ($CFL = 0,6$, kernel exponencial) y el método MUSCL con cálculo de derivadas con diferencias centradas de segundo (b) y cuarto orden (c). Se muestra también el método FV-MLS de segundo orden (d)

orden. Sin embargo, esta equivalencia no se mantiene en problemas multidimensionales. La mejora en los resultados sobre el método MUSCL es evidente, y es aún más pronunciada en problemas multidimensionales [42].

La menor disipación introducida por el método de mayor orden hace posible la resolución de problemas en los que la amplitud de las ondas es muy pequeña, como por ejemplo en problemas de aeroacústica. Un ejemplo de problemas de este tipo se muestra en la Subapartado 6.3.

6.3. Dos vórtices rotando en torno al mismo centro

El siguiente ejemplo numérico muestra las capacidades de cálculo del método FV-MLS de tercer orden. Se calcula la evolución de un par de vórtices idénticos que rotan en torno al mismo centro en un medio en reposo. Se utiliza una malla no estructurada de unos 48000 elementos, utilizando el kernel exponencial (38), con $\kappa_x = \kappa_y = 3$ para el cálculo de derivadas para la reconstrucción de Taylor en los términos hiperbólicos, y $\kappa_x = \kappa_y = 1$ para el cálculo de los flujos viscosos. La configuración del problema se ha tomado de [43]. Una representación esquemática del problema se muestra en la Figura 11.

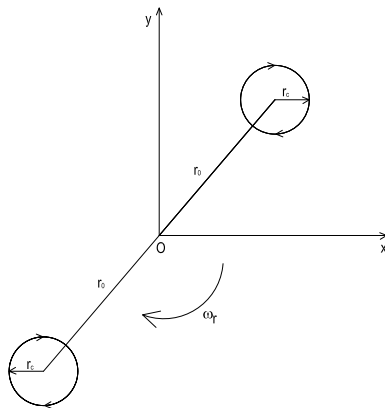


Figura 11. Representación esquemática del problema de dos vórtices rotando en torno al mismo centro

Los dos vórtices están separados inicialmente una distancia de $2r_0$. La distribución inicial de la velocidad tangencial de cada vórtice viene dada por:

$$V_\theta(r) = -\frac{\Gamma r}{2\pi(r_c^2 + r^2)} \quad (82)$$

siendo r la distancia radial desde el centro de cada vórtice, de radio r_c . La frecuencia angular del flujo conjunto es $\Omega_r = 2\pi f_r = \Gamma/\pi r_0^2$, el período es $T_r = 8\pi^2/r_0^2/\Gamma$ y el número de Mach de rotación es $M_r = \Gamma/4\pi r_0 c_0$. Se

han tomado los siguientes valores, $M_r = 1/9$, $r_c/r_0 = 2/9$, y el número de Reynolds $Re = \Gamma/\nu = 7500$.

Los centros de los dos vórtices se van acercando hasta que terminan por unirse. A partir de ese momento el conjunto evoluciona como un único vórtice. Para representar el campo sonoro utilizaremos la dilatación, $\Theta = \nabla \cdot \mathbf{v}$, siendo $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$. Así, en la Figura 12 se aprecia el patrón de doble espiral típica de una fuente cuadrupolar rotatoria [44,45] en un instante de la simulación.

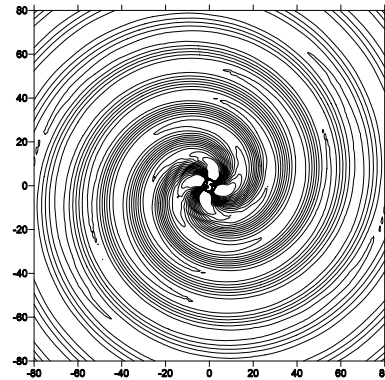


Figura 12. Campo de dilatación del problema de dos vórtices rotando en torno al mismo centro. Se representan niveles de dilatación de -15 a 15

6.4. Flujo subsónico alrededor de un perfil aerodinámico

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

Así, se va a resolver el flujo en 2D alrededor de un perfil NACA 0012. El flujo en la corriente libre viene dado por un número de Mach igual a 0,63, y un ángulo de incidencia (α) de 2° . Estas condiciones del flujo se corresponden con un flujo suave alrededor del perfil, sin aparición de choques. Los coeficientes de arrastre y de sustentación calculados mediante un método hodográfico son $C_D = 0$ y $C_L = 0,335$. La malla utilizada es de cuadriláteros con 64 elementos sobre la cuerda del perfil (en cada cara). El número total de elementos es de 5322. Se ha utilizado el limitador de Barth y Jespersen (BJ) [8]. El método FV-MLS de tercer orden con y sin detector basado en MLS ha sido empleado en los cálculos.

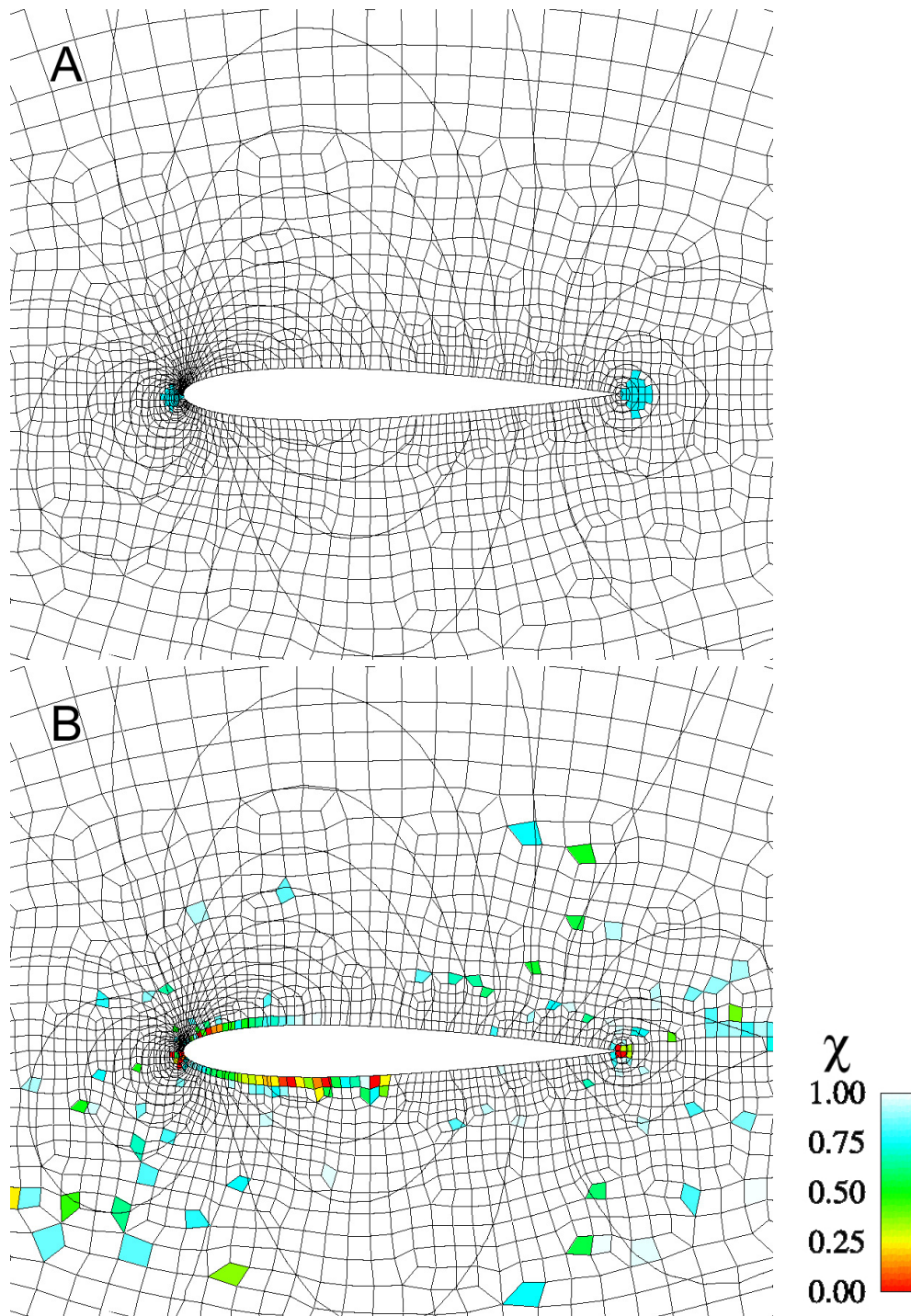


Figura 13. Flujo subsónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0,63$, $\alpha = 2$. En la Figura A se muestran las celdas donde el limitador está activo (sombreadas). En la Figura B se muestran las celdas en los que el limitador BJ está limitando ($\chi \neq 1$), un valor rojo indica un valor de $\chi = 0$, es decir esquema de primer orden, mientras que un color azul indica un valor de χ próximo a uno. Se muestran además las isolíneas de número de Mach

En la Figura 13 se muestran las isolíneas correspondientes al número de Mach obtenidas en cada caso, y las celdas en donde el limitador esta activo. Se observa

que el limitador BJ está activo en algunas celdas pese a la ausencia de choques en la solución. De este modo, se introduce una disipación adicional que no es necesaria

Tabla 2. Flujo subsónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0,63$, $\alpha = 2$. Coeficiente de sustentación (C_L) y coeficiente de arrastre (C_D). BJ se refiere al limitador de Barth y Jespersen

Esquema	C_L	C_D
Cálculos teóricos	0,335	0
BJ tercer orden	0,3183	5,29E-03
BJ tercer orden limitación selectiva	0,328	1,24E-03

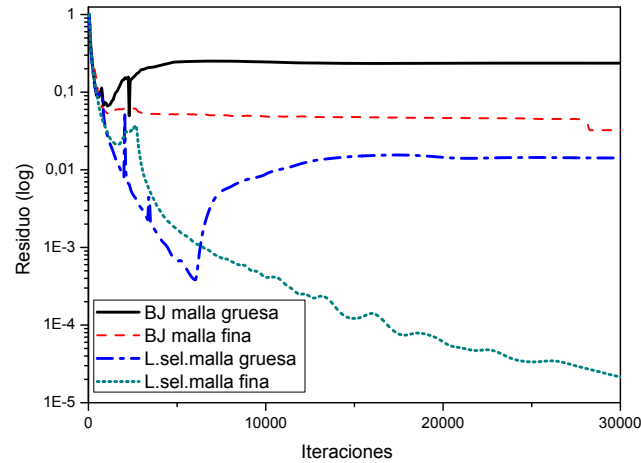


Figura 14. Flujo subsónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0,63$, $\alpha = 2$. Convergencia de la solución empleando el limitador BJ con y sin el detector (limitación selectiva). Se muestra el residuo en la densidad

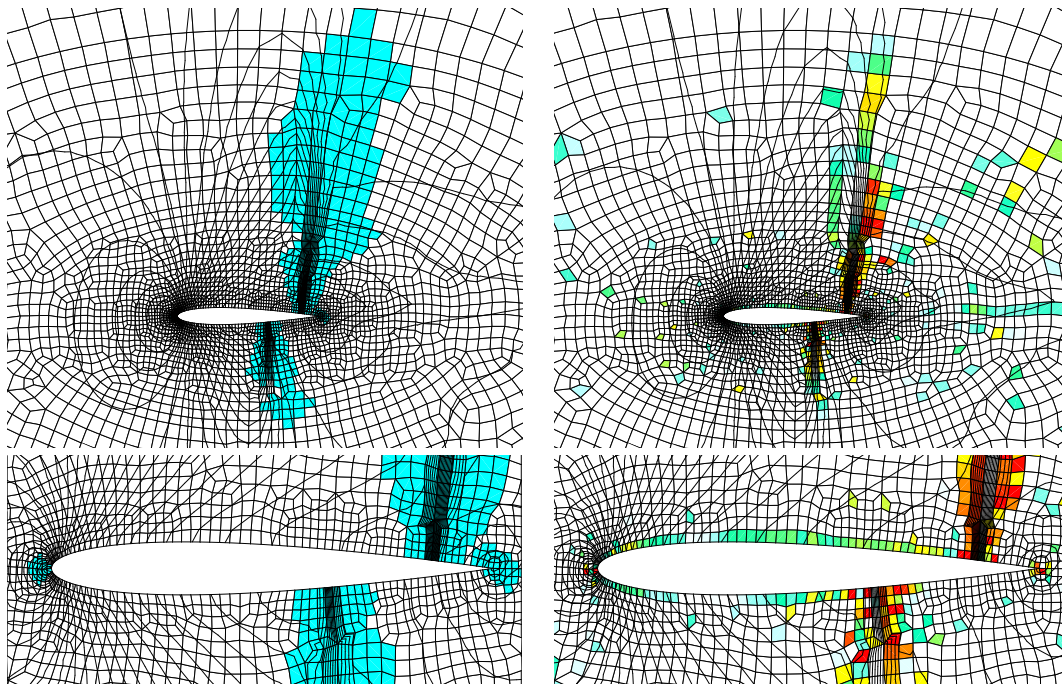


Figura 15. Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, $Mach=0,85$, $\alpha = 1$. A la izquierda se muestran las celdas donde el limitador está activo (sombreadas). A la derecha se muestran las celdas en las que el limitador BJ está limitando ($\chi \neq 1$), un valor rojo indica un valor de $\chi = 0$, es decir esquema de primer orden, mientras que un color azul indica un valor de χ próximo a uno. En la parte inferior se muestra una vista más próxima al perfil

Tabla 3. Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, Mach=0,85, $\alpha = 1$. Coeficiente de sustentación (C_L) y coeficiente de arrastre (C_D) para diversos esquemas

Esquema	C_L	C_D
BJ segundo orden (malla 5322 elementos)	0,363	5,99-02
BJ cuarto orden (malla 5322 elementos)	0,365	5,98-02
BJ cuarto orden limitación selectiva (malla 5322 elementos)	0,368	5,89E-02
Referencia malla fina [21] (malla 12243 elementos)	0,369	5,86E-02

para la estabilidad del esquema numérico, y que provoca anomalías en las curvas de número de Mach cerca de la superficie del perfil. Se observa que con la utilización del detector basado en MLS estas anomalías desaparecen. En la Tabla 2 se muestran los valores obtenidos de los coeficientes de arrastre y de sustentación. La mejora obtenida al utilizar el detector basado en MLS es evidente. Se observa que el coeficiente de arrastre (C_D) se reduce más de cuatro veces.

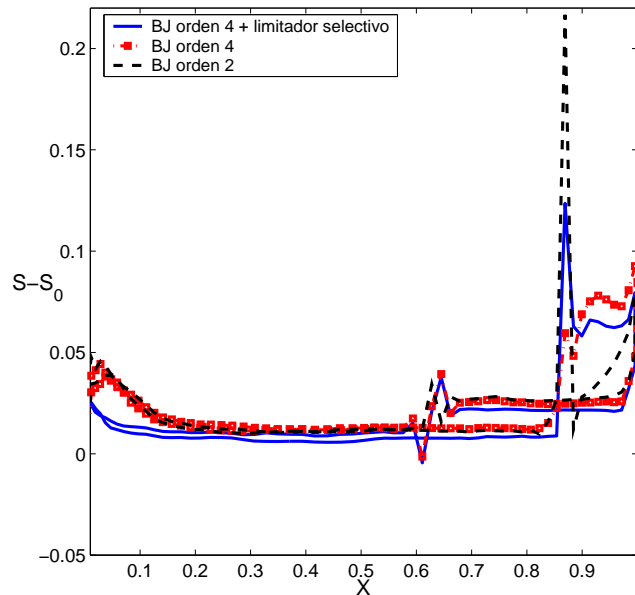
Frecuentemente, el empleo de *slope limiters* impide la convergencia total del esquema, debido a que el limitador permanece activo incluso frente a errores del orden del error de máquina. Así, pequeñas variaciones de la solución en celdas adyacentes provocan su activación, y el valor del residuo se “estanca”. En la Figura 14 se muestra la evolución del residuo de la densidad. En general, la utilización del detector basado en MLS permite obtener una mejora en la convergencia.

6.5. Flujo transónico alrededor de un perfil aerodinámico

A continuación, se muestra un ejemplo transónico. El número de Mach es 0,85 y el ángulo de incidencia (α) de 1° . Con esta configuración se van a formar dos choques, uno en el intradós del perfil y el otro en el extradós, como se puede observar en la Figura 15, en donde se muestran los contornos del número de Mach y las celdas en las que el limitador está activo. Se observa, que los choques son bien detectados por el método. La malla utilizada en los cálculos es la misma que en el caso anterior.

Los resultados para varios esquemas se muestran en la Tabla 3. La solución de referencia se ha obtenido mediante un método de segundo orden con limitador BJ en una malla de 12243 celdas. De nuevo se observan unos resultados más próximos a los de referencia con la aplicación del filtro selectivo. En la Figura 15 se aprecia claramente la mejora introducida al utilizar el

limitador selectivo. El limitador no está activo en las celdas aguas arriba y aguas abajo del choque, mientras que el limitador BJ está limitando en la mayor parte de las celdas adyacentes al perfil. Además, la entropía generada en el contorno del perfil es menor antes de los choques (Figura 16), indicando el carácter menos disipativo del esquema numérico con limitación selectiva. Nótese que con la limitación selectiva se obtienen unos resultados prácticamente iguales que los obtenidos por el esquema de segundo orden en una malla con más del doble de elementos.

**Figura 16.** Flujo transónico a través de un perfil NACA 0012, Mach=0,85, $\alpha = 1$. Generación de entropía en la superficie del perfil. S_0 es la entropía en la corriente libre. La limitación selectiva reduce la generación de entropía, y este efecto es mayor aguas arriba del choque. El uso de un esquema de cuarto orden con limitación BJ no reduce la generación de entropía

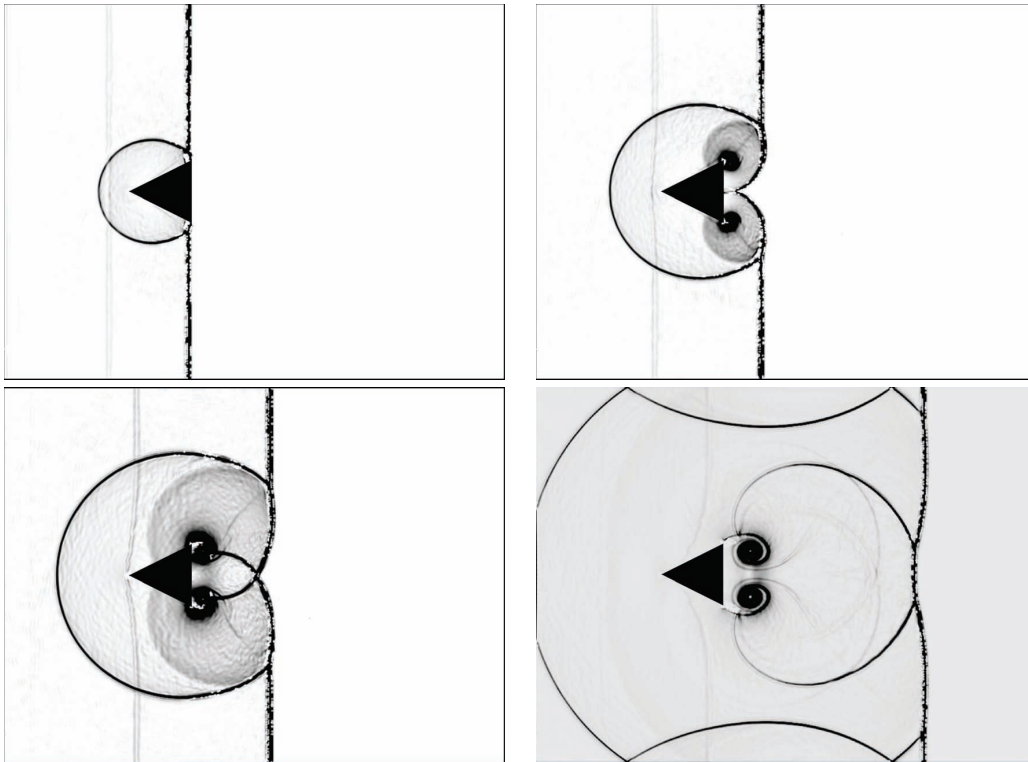


Figura 17. Interacción de una onda de choque con un cuerpo triangular. En la figura se representan imágenes Schlieren numéricas de la densidad para diferentes instantes de tiempo. De izquierda a derecha y de arriba a abajo, se representan los instantes de tiempo adimensional $t = 1,5$, $t = 2$, $t = 2,5$, $t = 4$

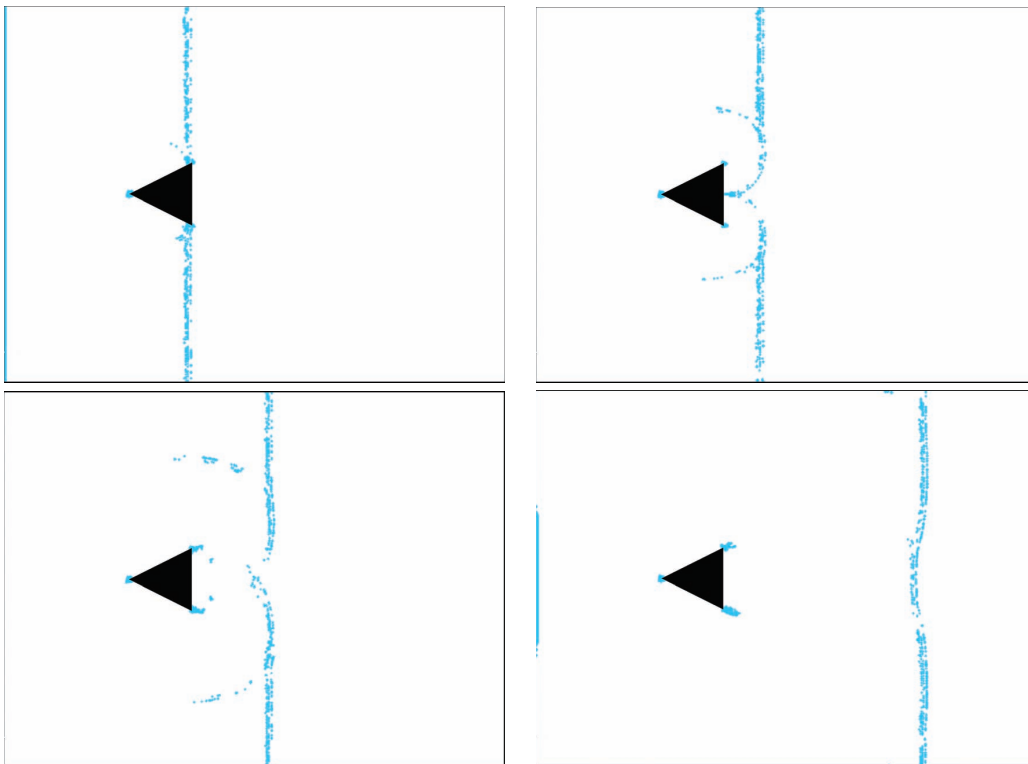


Figura 18. Interacción de una onda de choque con un cuerpo triangular. El sombreado indica las celdas en las que el algoritmo de limitación está activo para los instantes de tiempo adimensional $t = 1,5$, $t = 2$, $t = 2,5$, $t = 4$

6.6. Interacción de una onda de choque con un cuerpo triangular en dos dimensiones

Este ejemplo muestra la interacción de una onda de choque con un cuerpo triangular. La onda de choque se mueve en dirección al cuerpo triangular, y su número de Mach es $M_s = 1,3$. Para este caso existen datos experimentales en forma de imágenes Schlieren [49]. El dominio computacional es el rectángulo $[-2, 6] \times [-3, 3]$, y los vértices del triángulo se sitúan en los puntos $v_1 = (0, 0)$, $v_2 = (1, 0,5)$, $v_3 = (1, -0,5)$. En la superficie del triángulo y en los contornos superior e inferior del dominio, se imponen condiciones de contorno de pared con deslizamiento. En los contornos de entrada y salida, se impone la condición exacta según las condiciones de Rankine-Hugoniot. La onda de choque inicialmente está situado en $x = -1$. Las condiciones iniciales antes (1) y después (2) del choque, son las siguientes, obtenidas de acuerdo con las relaciones de Rankine-Hugoniot:

$$\rho_1 = 2,122 \quad \rho_2 = 1,4$$

$$p_1 = 1,805 \quad p_2 = 1,0$$

$$v_1^x = 0,442 \quad v_2^x = 0,0$$

Las velocidades en la dirección y son nulas.

El problema se resuelve en una malla no estructurada de 471571 elementos, utilizando el método FV-MLS de tercer orden y el limitador de Jawahar, [50]. Como método de integración temporal se ha utilizado el método TVD Runge-Kutta de tercer orden propuesto por Shu y Osher [51].

En la Figura 17 se muestran las imágenes Schlieren numéricas obtenidas en la simulación. Estas imágenes muestran el módulo del gradiente de densidad. Para acentuar las características débiles del flujo se aplica una función de sombreado no lineal. Los resultados concuerdan perfectamente con los resultados experimentales de [49], así como con otras simulaciones [52,53]. Se observa cómo la onda de choque inicial genera una onda de choque reflejada circular al incidir sobre el cuerpo triangular. Se observa además la formación de reflexiones regulares de Mach en la parte inferior y superior del triángulo. Una vez que la onda de choque principal atraviesa el cuerpo triangular, se producen dos expansiones simétricas que producen la difracción de los *tallos* de Mach y la creación de dos vórtices. En la Figura 18 se muestra que el sensor MLS es capaz de seguir la evolución de un choque no estacionario.

7. Conclusiones

En este artículo se ha presentado una metodología numérica para el cálculo de flujos compresibles tanto en mallas estructuradas como en mallas no estructuradas. El método de Mínimos Cuadrados Móviles (MLS) se utiliza para el cálculo de los gradientes y las derivadas sucesivas necesarias para la construcción de un método de volúmenes finitos de alto orden. Con la metodología propuesta se consigue un método de gran precisión que no necesita la introducción de grados de libertad adicionales. Las propiedades de dispersión y disipación del esquema numérico dependen de la elección de la función kernel, y por tanto de la elección de los parámetros que la definen. Así, si se utiliza el kernel determinado por el spline cúbico, un valor del parámetro $k = 0,6 - 0,7$ obtiene los mejores resultados en términos de precisión y estabilidad. Valores inferiores para la discretización de los términos hiperbólicos pueden dar lugar a inestabilidades, debido a que los errores de dispersión no son disipados suficientemente. En el caso del kernel exponencial, un valor de $\kappa = 1$ es recomendable.

Se ha mostrado la mayor precisión del método FV-MLS en comparación con un método MUSCL. El aumento de coste computacional no es elevado si se tienen mallas fijas, ya que el cálculo de vecinos, funciones de forma y sus derivadas sólo ha de realizarse una vez, como parte del preproceso, y el aumento en la precisión es considerable. Así, la mayor precisión del esquema FV-MLS de tercer orden permite su aplicación a problemas de interés en ingeniería que requieran métodos muy precisos para su resolución, como por ejemplo, problemas de aeroacústica.

Por otra parte, se ha desarrollado un detector de ondas de choque que permite la utilización de los métodos de limitación de pendiente con esquemas de orden mayor que dos y que mejora los resultados obtenidos mediante el empleo de técnicas tradicionales de limitación de pendiente. Mediante la limitación selectiva propuesta, se consigue aumentar la precisión de la solución, al mantener el orden de convergencia teórico del esquema numérico en las regiones alejadas de las ondas de choque. En las zonas de grandes gradientes, el esquema numérico vuelve a ser de orden uno, manteniendo la monotonicidad. La metodología propuesta depende de un parámetro C_{lc} . En nuestra experiencia, un valor de $C_{lc} = 0,32$ obtiene buenos resultados en términos de robustez y precisión. La robustez del esquema puede aumentarse reduciendo este parámetro, pero a costa de un mayor número de celdas en las que el limitador esté activo, con la consiguiente mayor disipación introducida. Por otra parte, se ha mostrado que la utilización de la metodología de limitación selectiva propuesta permite

una mejora en la convergencia del esquema numérico, en comparación con el uso de otros métodos de limitación de pendiente habitualmente utilizados. Así, es posible el empleo del método FV-MLS en problemas que requieran la resolución de flujo compresible en geometrías complejas utilizando mallas no estructuradas.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la *Subdirección Xeral de I+D de la Xunta de Galicia* (Proyectos PGIDIT06TAM26201PR y expediente 2007/09), el Ministerio de Educación y Ciencia (Proyectos DPI2006-15275 y DPI2007-61214) y la Universidade da Coruña.

Referencias

- Barth T.J. (1995) *Aspects of unstructured grids and finite-volume solvers for the Euler and Navier-Stokes equations*, VKI Lecture Series 1994-95.
- Godunov S.K. (1959) A Finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics, *Mat. Sbornik*. 47:357–393.
- Harten A., Lax P., Van Leer B. (1983) On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM Rev.* 25:35–61.
- Van Leer B. (1979) Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method, *Journal of Computational Physics*. 32(1):101–136.
- Deconinck H., Paillère H., Struijs R., Roe P.L. (1993) multidimensional upwind schemes based on fluctuation-splitting for systems of conservation Laws. *Computational Mechanics*. 11: 323–340.
- Paillère H., Boxho J., Degrez G., Deconinck H., (1996) Multidimensional upwind residual distribution schemes for the convection-diffusion equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 23:923–936.
- Roe P.L., (1994-1995) *Multidimensional upwinding. Motivation and concepts*. VKI Lecture Series 1994-1995.
- Barth T.J., Jespersen D.C. (1989) The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. *AIAA*. 89-0366.
- Frink N.T. (1992) Upwind scheme for solving the Euler equations on unstructured tetrahedral meshes. *AIAA Journal*. 30:70–77.
- Jahawar P., Kamath H. (2000) A high-resolution procedure for Euler and Navier-Stokes computations on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*. 164:165–203.
- Venkatakrisnan V. (1995) Convergence to steady state solutions of the Euler equations on unstructured grids with limiters. *Journal of Computational Physics*. 118:120–130.
- Barth T.J. (1993) Recent developments in high order k-exact reconstruction on unstructured meshes. *AIAA* paper 93-0068.
- Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S. (1987) Uniformly high order essentially nonoscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics* 71:231–303.
- Shu C.W. (1997) *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*. ICASE Report 97-65.
- Bassi F., Rebay S. (1997) A higher-order accurate discontinuous finite element solution of the 2D Euler equations. *Journal of Computational Physics*. 138:251–285.
- Bassi F., Rebay S. (1997) A higher-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*. 131:267–279.
- Cockburn B., Shu C.W. (2001) Runge-Kutta discontinuous Galerkin methods for convection dominated problems. *Journal on Scientific Computing* 16:173–261.
- Dolejší V. (2004) On the discontinuous Galerkin method for the numerical solution of the Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 45:1083–1106.
- Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. (2000) *The finite element method. Volume 3: Fluid dynamics*, Butterworth-Heinemann.
- Wang Z.J. (2002) Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids. *Journal of Computational Physics* 178:210-251.
- Cueto-Felgueroso L., (2005) Partículas, volúmenes finitos y mallas no estructuradas: Simulación numérica de problemas de dinámica de fluidos. Tesis Doctoral. http://www.tesisenred.net/TDR-0421106-144832/index_a_n.html
- Cueto-Felgueroso L., Colominas I., Nogueira X., Navarrina F., Casteleiro M., (2007) Finite volume solvers and Moving Least-Squares approximations for the compressible Navier-Stokes equations on unstructured grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 196:4712–4736.
- Nogueira X., Cueto-Felgueroso L., Colominas I., Gómez H., Navarrina F., Casteleiro M. (2009) On the accuracy of Finite Volume and Discontinuous Galerkin discretizations for compressible flow on unstructured grids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 78:1553–1584.
- Cueto-Felgueroso L., Colominas I. (2008) High-order finite volume methods and multiresolution reproducing kernels. *Archives of Computational Methods in Engineering*. 15(2):185–228.
- Nogueira X., Colominas I., Cueto-Felgueroso L., Khehladi S., Navarrina F., Casteleiro M. (2009) Resolution of Computational Aeroacoustics problems on unstructured grids with a higher-order finite volume scheme. *Journal of Computational and Applied Mathematics* doi:10.1016/j.cam.2009.08.067.
- Roe P.L. (1981) Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes, *Journal of Computational Physics*. 43:357-372.

27. Van Leer B. (1982) *Flux vector splitting for the Euler equations*, Lecture Notes in Physics, 170. Springer Verlag.
28. Colella P., Woodward P. (1984) The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal on Computational Physics*. 54:174-201.
29. Lancaster P., Salkauskas K. (1981) Surfaces generated by moving least squares methods. *Mathematics of Computation* 3(155):141-158.
30. Gossler A. (2001) *Moving Least-Squares: a numerical differentiation method for irregularly spaced calculation points*. SANDIA Report. SAND2001-1669.
31. Li S., Liu W.K. (1996) Moving least square reproducing kernel method part II: Fourier Analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 139:159-193.
32. Liu W.K., Li S., Belytschko T. (1997) Moving least square reproducing kernel method part I: Methodology and convergence. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 143:113-154.
33. Belytschko T., Krongauz Y., Organ D., Fleming M., Krysl P. (1996) Meshless methods: An overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 13:3-47.
34. Huerta A., Vidal Y., Villon P. (2004) Pseudo-divergence-free Element Free Galerkin method for incompressible fluid flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 193:1119-1136.
35. Liu G.R., Liu, M.B. (2003) *Smoothed Particle Hydrodynamics. A meshfree particle method*, World Scientific Publishing Co.Pte.Ltd.
36. Owen J.M., Villumsen J.V., Shapiro P.R., Martel H. (1998) Adaptive smoothed particle hydrodynamics: Methodology II. *The Astrophysical Journal Supplement Series*. 116:155-209.
37. Nogueira X. (2009) Formulaciones de mínimos cuadrados móviles y de volúmenes finitos de alto orden para la simulación numérica de flujos compresibles. Tesis Doctoral. <http://ruc.udoc.es/dspace/handle/2183/5671>.
38. Hänel D., Schwane R., Seider G. (1987) On the accuracy of upwind schemes for the solution of the Navier-Stokes equations. *AIAA paper* 87-1005.
39. Leveque R.J. (1990) *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhauser Verlag, Basel.
40. Liu W.K, Hao W., Chen Y., Jun S., Gosz J. (1997) Multiresolution Reproducing Kernel Particle Methods. *Computational Mechanics*. 20:295-309.
41. Sjögreen B., Yee H.C. (2004) Multiresolution wavelet based adaptive numerical dissipation control for high order methods. *Journal of Scientific Computing*. 20:211-255.
42. Tam C.K.W., Webb J.C. (1993) Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics. *Journal of Computational Physics*. 107:262-281.
43. Hardin J.C., Ristorcelli J.R., Tam C.K.W. (1995) *ICASE/LaRC workshop on benchmark problems in computational aeroacoustics*. NASA Conference Publication 3300.
44. Nogueira X., Cueto-Felgueroso L., Colominas I., Khehladi S. (2010) On the simulation of wave propagation with a higher-order finite volume scheme based on Reproducing Kernel Methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 199(23-24):1471-1490.
45. Nogueira X., Cueto-Felgueroso L., Colominas I., Gómez H. (2010) Implicit Large Eddy Simulation of non-wall-bounded turbulent flows based on the multiscale properties of a high-order finite volume method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 199(9-12):615-624.
46. Bogey C., Bailly C., Juvé D. (2002) Computation of flow noise using source terms in linearized Euler's Equations. *AIAA Journal*. 40(2):235-243.
47. Lee D.J., Koo S.O. (1995) Numerical study of sound generation due to a spinning vortex pair. *AIAA Journal*. 33(1):20-25.
48. Powell A. (1964) Theory of vortex sound. *Journal of the Acoustical Society of America*. 36(1):177-195.
49. Van Dyke M. (2005) *An album of fluid motion*. The Parabolic Press, Stanford, California.
50. Jawahar P., Kamath H. (2000) A High-resolution procedure for Euler and Navier-Stokes computations on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*. 164(1):165-203.
51. Shu C.W., Osher S. (1988) Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*. 77:439-471.
52. Dumbser M., Käser M., Titarev V.A., Toro E.F. (2007) Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics* 226:204-243.
53. Castro C.E., Toro E.F. (2008) Solvers for the high-order Riemann problem for hyperbolic balance laws. *Journal of Computational Physics* 227:2481-2513.