

# Implementación de un esquema de densificación local de la malla en un código numérico para el estudio de escurrimientos

## 1. Objetivo

En el presente trabajo nos proponemos implementar mejoras en un código de alta performance para el estudio de escurrimientos alrededor de distintas geometrías utilizando para ello métodos de alto orden para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo viscoso e incompresible. El código *Incompact3d* (el cual viene siendo descrito y utilizado en números anteriores de la revista *Atenea*) utiliza el método de las diferencias finitas y se puede utilizar para simulación directa (DNS) o para simulación de grandes escalas (LES). Este código es una herramienta intermedia entre un resolutor totalmente espectral de las ecuaciones de Navier-Stokes (limitado a geometrías académicas a través de la representación de Fourier o Chebyshev) y códigos más versátiles. Cabe remarcar que el código tiene la particularidad de poder densificar la malla conservando al mismo tiempo el alto orden para un mejor estudio de los fenómenos en zonas de interés y un menor requerimiento de memoria de máquina. Existen muchos métodos propuestos los cuales tienen como

objetivo realizar la densificación de la grilla cartesiana con el propósito de aumentar la resolución en una determinada zona del dominio o de disminuir la cantidad total de puntos utilizados para su discretización.

Partiendo de un código en diferencias finitas en una grilla cartesiana que cuenta con la posibilidad de densificar la malla en una dirección hacia el centro, se procurará la densificación en la otra dirección. A la vez, implementaremos nuevas subrutinas que permitan al código realizar la densificación en ambas direcciones simultáneamente con el objetivo de reducir la cantidad de puntos necesarios para la simulación de ciertos fenómenos y/o de aumentar la resolución en la zona central. A fin de llevar a cabo dicha implementación, se efectuarán modificaciones en algoritmos ya existentes, modificando y/o reemplazando el algoritmo del gradiente biconjugado preconditionado abordado en el trabajo presentado en el número anterior de la revista *Atenea*.

## 2. Antecedentes

El trabajo anteriormente citado ha permitido explicar:

(1) el procedimiento de obtención de la matriz que resulta de resolver la ecuación de Poisson en el espacio espectral densificando la grilla en dos direcciones simultáneamente hacia el centro; (2) las modificaciones necesarias a fin de conservar la equivalencia entre los esquemas de derivadas con la grilla densificada; (3) las modificaciones a realizar en las condiciones de estabilidad para los esquemas de discretización temporal. Asimismo, ha sido descrito el método del gradiente biconjugado y las modificaciones requeridas para adaptarlo al código *incompact3d*.

En el trabajo citado, la matriz resultante de la densificación es del tipo diagonal dispersa, lo cual dificulta enormemente el poder utilizar muchos nodos en el dominio computacional, dado que esta matriz genera grandes requerimientos de memoria y eficiencia computacional.

Si bien para cierto intervalo de grados de densificación se logra obtener un error menor que para el caso de grilla regular, el máximo grado de densificación no es el que podría esperarse obtener dado que éste se encuentra aproximadamente por debajo del 20 %.

### 3. Desarrollo

#### 3.1. Densificación de la Grilla en Dos Direcciones

Para este trabajo se eligió utilizar la misma función de refinamiento en ambas direcciones, pero se utilizaron factores distintos con la finalidad de poder controlar el grado de densificación en cada dirección independientemente. De esta manera se puede tener un control más amplio en cómo se desea refinar la malla.

Es importante remarcar que el densificado es mayor a medida que los factores de refinamiento tienden a cero. Por el contrario, para obtener una malla quasi homogénea con este tipo de funciones, se podría lograr adoptando valores cercanos a cien para los factores correspondientes.

Con las funciones de stretching determinadas y sus coeficientes completamente definidos, el paso que sigue en el trabajo fue implementarlas en el código. Sin entrar en detalles, se definió una nueva subrutina de generación de grilla que toma como argumentos de entrada los valores de los coeficientes de refinamiento. Hay que recordar que se genera una segunda grilla que contiene los nodos decalados, para el cálculo del campo de presiones.

Además de ambas mallas en el espacio físico con el refinado correspondiente, se generan mallas con la misma cantidad de nodos en cada dirección pero con una distribución homogénea, que son las mallas para el cálculo en el espacio espectral.

Otra implementación que se tuvo que realizar en el código fue modificar todas las subrutinas que calculan las derivadas primera y segunda en la nueva dirección refinada, esto requirió seguir la lógica de ejecución del código para detectar los momentos en los cuales es requerido utilizar algún valor relacionado con el refinamiento.

#### 3.2. Cálculo del Laplaciano del Campo de Presiones

El desarrollo sigue los lineamientos propuestos en [8] y se comienza el desarrollo planteando la derivada de la presión  $p$  respecto a  $x$  evaluada en el punto  $(x_i, y_j)$ . Se expresa la serie de Fourier de la presión en un punto dado de la siguiente manera

$$p(x_i, y_j) = p_{ij} = \sum_{l=-\frac{n_x}{2}}^{\frac{n_x}{2}-1} \sum_{m=-\frac{n_y}{2}}^{\frac{n_y}{2}-1} \hat{p}_{lm} e^{i k_x r_i} e^{i k_y s_j}$$

entonces la primer derivada queda como

$$\left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{x_i, y_j} = \frac{1}{h'(r_i)} \left. \frac{\partial p}{\partial r} \right|_{r_i, s_j} = \left( \sum_{q=-1}^1 \hat{a}_q e^{i k_x r_i} \right) \left( \sum_{l=-\frac{n_x}{2}}^{\frac{n_x}{2}-1} \sum_{m=-\frac{n_y}{2}}^{\frac{n_y}{2}-1} i k_x^* T_y \hat{p}_{lm} e^{i k_x r_i} e^{i k_y s_j} \right)$$

En la anterior expresión se tienen las Transformadas Discretas de Fourier tanto para la función de stretching y para la derivada primera de la presión respecto a la variable  $r$ , que es la coordenada del espacio computacional. Continuando con el cálculo, se expande la sumatoria del primer paréntesis y se desarrolla el producto

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{x_i, y_j} &= \left( \hat{a}_{-1} e^{-i r_i} + \hat{a}_0 + \hat{a}_1 e^{i r_i} \right) \left( \sum_l \sum_m i k_x^* T_y \hat{p}_{lm} e^{i k_x r_i} e^{i k_y s_j} \right) \\ &= \sum_l \sum_m i T_y \left[ k_x^*(l+1) \hat{a}_{-1} \hat{p}_{l+1, m} + k_x^*(l) \hat{a}_0 \hat{p}_{l, m} + k_x^*(l-1) \hat{a}_1 \hat{p}_{l-1, m} \right] e^{i k_x r_i} e^{i k_y s_j} \end{aligned}$$

Luego de trabajar algebraicamente y acomodando todos los factores que acompañan a los

coeficientes de Fourier, se obtiene

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right|_{x_i, y_j} &= \frac{1}{h'(r_i)} \frac{\partial}{\partial r} \left( \left. \frac{\partial p}{\partial r} \right|_{r_i, s_j} \right) \\ &= \sum_l \sum_m \left\{ \begin{aligned} &-\hat{a}_1^2 k_x^*(l-1) k_x^*(l-2) T_y^2 \hat{p}_{l-2, m} \\ &-\hat{a}_0 \hat{a}_1 k_x^*(l-1) T_y^2 \left( k_x^*(l) + k_x^*(l-1) \right) \hat{p}_{l-1, m} \\ &-\left[ \hat{a}_0^2 \left( k_x^*(l) \right)^2 T_y^2 + \hat{a}_{-1} \hat{a}_1 k_x^*(l) T_y^2 \left( k_x^*(l-1) + k_x^*(l+1) \right) \right] \hat{p}_{l, m} \\ &-\hat{a}_0 \hat{a}_{-1} k_x^*(l+1) T_y^2 \left( k_x^*(l) + k_x^*(l+1) \right) \hat{p}_{l+1, m} \\ &-\hat{a}_{-1}^2 k_x^*(l+1) k_x^*(l+2) T_y^2 \hat{p}_{l+2, m} \end{aligned} \right\} e^{i k_x r_i} e^{i k_y s_j} \end{aligned}$$

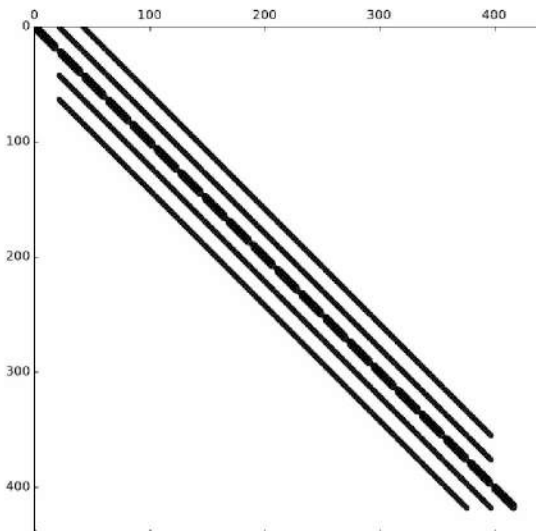
En rojo están remarcados los coeficientes de Fourier correspondientes al campo de presiones de tal manera de poder identificar fácilmente los factores que los acompañan. Es interesante observar el impacto que tiene la implementación de las funciones de stretching en el cálculo de la serie de Fourier, ya que su complejidad queda directamente determinada por la cantidad de términos en los cuales se puede representar la función de refinamiento.

### 3.3. Ensamble de la Matriz de Coeficientes

La metodología utilizada para confeccionar la matriz de coeficientes tiene sustento en la estrategia de numeración natural row ordering. El sistema lineal a resolver es

$$\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{D}}$$

La siguiente figura muestra la disposición de los coeficientes no nulos de la matriz. Se puede observar la diagonal principal con un mayor espesor que las otras cuatro, lo que indica que ahí están concentradas las cinco diagonales principales. Claramente es una matriz del tipo esparsa, lo cual implica que hay que seleccionar el método adecuado para resolver el sistema de ecuaciones.



### 3.4. Resolución del Sistema Lineal

El código originalmente hace una descomposición del tipo LU [2,7] para resolver el sistema de ecuaciones cuando se refina en una dirección. Para el caso desarrollado de densificación en dos direcciones y en vistas de que la matriz obtenida es esparsa [14, 15], se consideró la utilización del método del Gradiente Biconjugado (BiCG) ya que su uso es recomendado en [3]. Este método es de tipo iterativo, que a diferencia de los métodos directos la solución va convergiendo dada una norma elegida al resultado según una tolerancia determinada mediante sucesivas iteraciones. En cada iteración, se calcula el residuo de la solución hallada y se va corrigiendo mediante una dirección de búsqueda [7]. El método BiCG se diferencia del Gradiente Conjugado (CG) en que puede resolver sistemas en los cuales la matriz no es simétrica y no requiere que sea autoadjunta. Pero sí es requerido que la misma sea definida positiva. En este trabajo se encontró que la matriz de coeficientes B reúne todos estos requerimientos.

### 3.5. Límite de los Coeficientes de Densificado

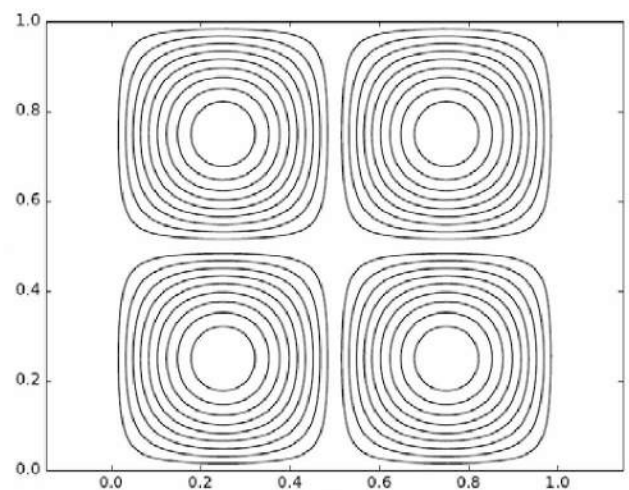
En este trabajo se comprobó empíricamente que existe un cierto valor umbral para los coeficientes de densificado de la malla por debajo de los cuales el problema se torna inestable y no se consigue ninguna solución. Dicho límite es de aproximadamente  $\beta = \delta = 0.44$ . Incluso, es independiente de la dirección en la cual se realice el refinado. En la referencia bibliográfica consultada [3], fue encontrado que el concepto de que una matriz sea diagonalmente dominante es importante para poder explicar este comportamiento. Allí se menciona que aunque se cumpla esta condición, a medida que tiende a debilitarse, los métodos iterativos comienzan a converger más lentamente.

## 4. Validación

### 4.1. Vórtices de Taylor-Green

Existen algunas soluciones analíticas de las ecuaciones de Navier-Stokes para determinados problemas, una de ellas fue propuesta por Taylor y Green. Consiste en una solución no estacionaria a partir de una estructura inicial de vórtices cuya intensidad decae con el tiempo debido a la disipación por la viscosidad del fluido.

La siguiente figura muestra las líneas de corriente para el momento inicial. Los vórtices de la esquina superior izquierda e inferior derecha tienen un sentido de giro horario, mientras que los otros dos giran en sentido anti-horario.



### 4.2. Medida del Error

Para comparar los resultados obtenidos con la nueva implementación del refinamiento de la malla con aquellos obtenidos para el código original, se utilizan dos medidas del error. La raíz del error cuadrático medio se define como

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n_x n_y} \sum_i^{n_x} \sum_j^{n_y} (|\mathbf{v}_{ij}^{an}| - |\mathbf{v}_{ij}^{sim}|)^2}$$

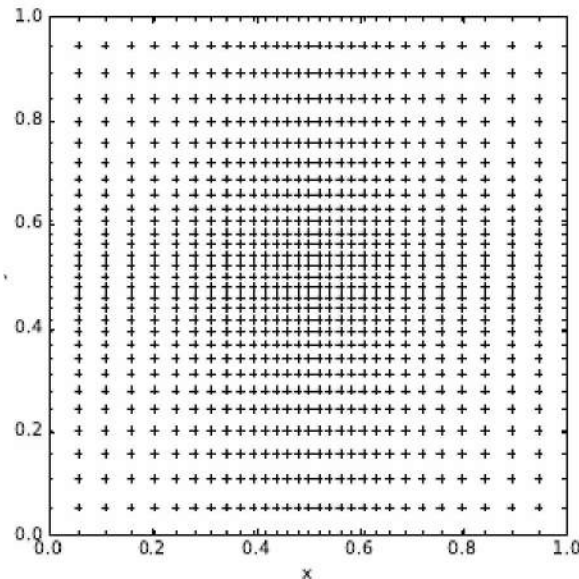
Por otra parte, el error angular se utiliza mucho en óptica y análisis de imágenes. Su medida ha sido utilizada por Barron [4] en dichas disciplinas y por Gronskis [19] para visualización del error en la validación del código. Su expresión es

$$\Lambda_{ij} = \arccos \left( \frac{\mathbf{v}_{ij}^{an} \cdot \mathbf{v}_{ij}^{sim}}{|\mathbf{v}_{ij}^{an}| |\mathbf{v}_{ij}^{sim}|} \right)$$

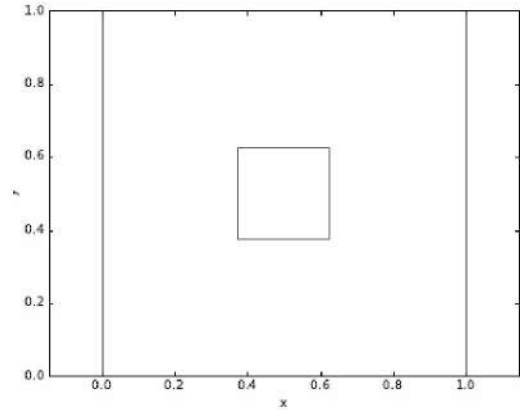
Esta representación es conveniente pues maneja bien las magnitudes de los vectores velocidad, ya sean altas o muy pequeñas, sin la amplificación inherente en la medida relativa de la diferencia de los vectores.

### 5. Resultados

El caso analizado corresponde al empleo del mismo coeficiente de refinamiento en direcciones x e y y misma cantidad de nodos en ambas direcciones. Se observa un comportamiento consistente con el hecho por el cual al aumentar el densificado en ambas direcciones el error se incrementa, tanto para el dominio completo como para la región considerada para el error localizado.



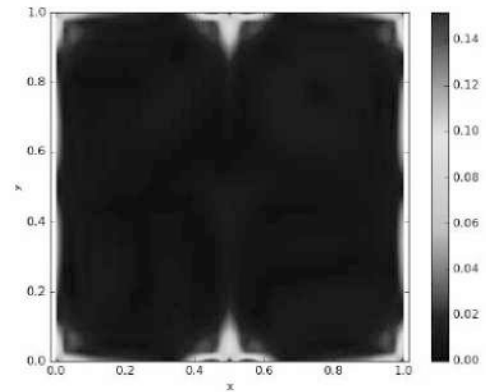
(a) Esquema de refinamiento.



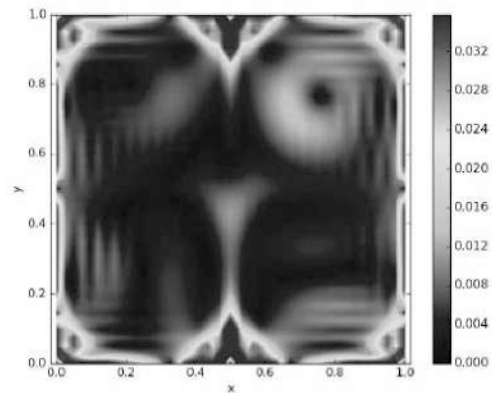
(b) Zona de refinamiento en verde.

Figura 3.2: Región para el cálculo del error.

Esta tendencia se pone de manifiesto en las figuras 3.5, 3.7, 3.11 y 3.13. El comportamiento se observa en las dos configuraciones de tamaño de malla utilizados. En ambas configuraciones, el error angular más elevado se concentra en ciertas zonas de los bordes del dominio.



(a) Con error máximo.



(b) Límite superior ajustado.

Figura 3.5: Error angular para  $n_x = n_y = 51$  y  $\beta = \delta = 0,8$ .

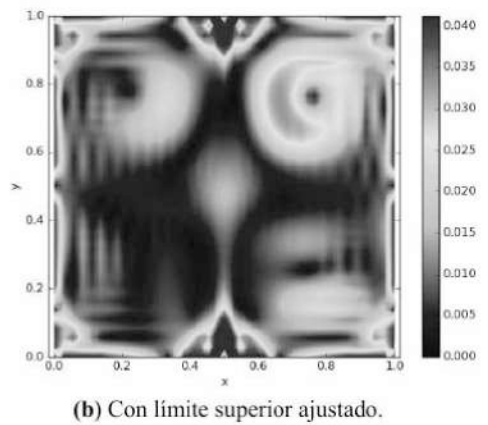
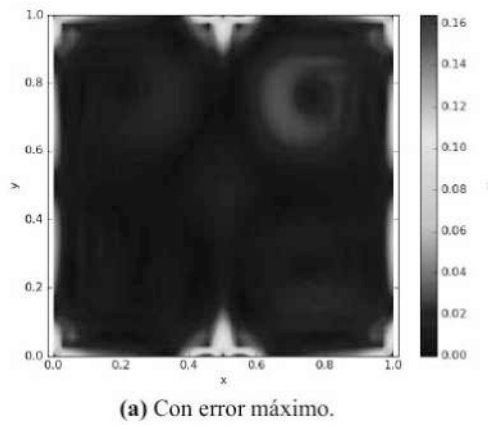


Figura 3.7: Error angular para  $n_x = n_y = 51$  y  $\beta = \delta = 0,45$ .

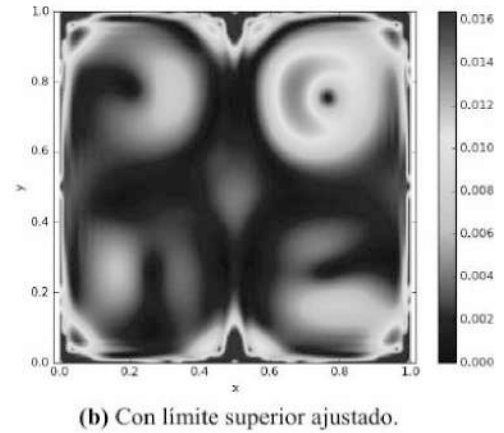
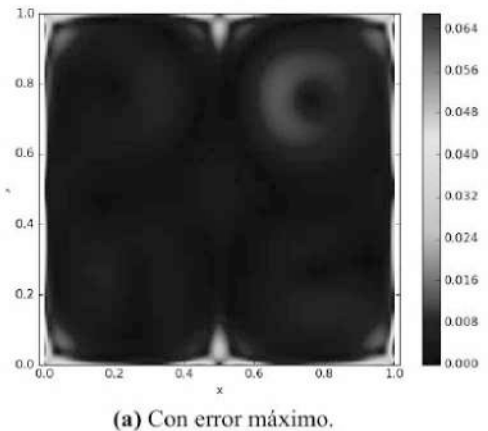


Figura 3.11: Error angular para  $n_x = n_y = 101$  y  $\beta = \delta = 0,8$ .

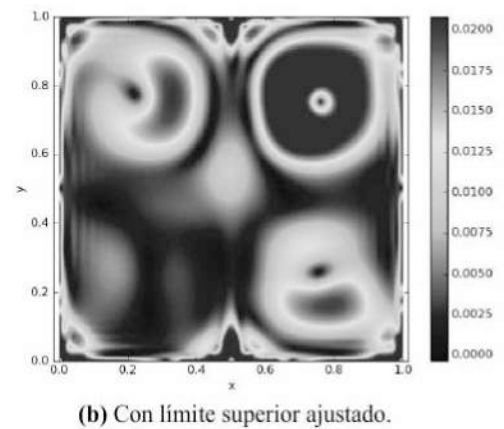
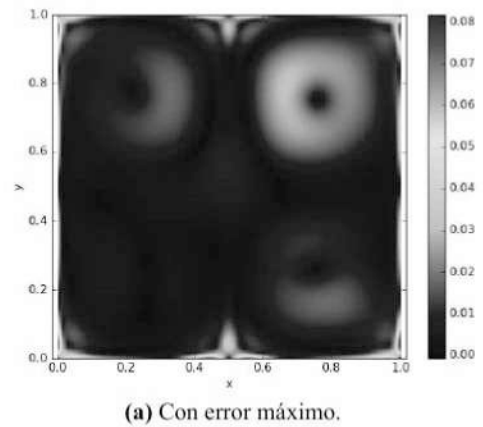


Figura 3.13: Error angular para  $n_x = n_y = 101$  y  $\beta = \delta = 0,45$ .

## 6. Conclusiones

En el presente trabajo se logró realizar la implementación del densificado en ambas direcciones simultáneamente en un dominio bidimensional. Los resultados del desarrollo obtenido para los coeficientes de la matriz que resuelve el sistema lineal de ecuaciones para el campo de presiones

son satisfactorios, ya que guardan una semejanza a los que fueron obtenidos por [3] para el refinamiento en dos direcciones en un dominio tridimensional, a pesar de que utiliza un esquema diferente para la discretización espacial.

Del mismo modo, los coeficientes mencionados son similares a aquellos que obtuvo el autor del código original en su tesis [12] para el densificado en una sola dirección.

Se obtuvo un procedimiento de cálculo adecuado para la determinación de los coeficientes que forman la matriz del sistema, siempre teniendo en cuenta el esquema de discretización espacial y el tipo de funciones de refinamiento.

En vista de los resultados obtenidos para el problema de los vórtices de Taylor-Green, el código se desempeña satisfactoriamente al haber sido implementado el densificado en ambas direcciones. Los tiempos de ejecución del programa lógicamente se incrementan al aplicar un mayor grado de refinamiento en la grilla. Esto se debe a que el algoritmo del Gradiente Biconjugado requiere una cierta cantidad de iteraciones internas para lograr la solución en cada incremento de tiempo y a medida que el refinamiento se acentúa, la matriz del sistema lineal comienza a perder la propiedad

de ser diagonal dominante. Esto repercute directamente en la dificultad que encuentra el algoritmo para resolver el sistema, pues la matriz comienza a comportarse como mal condicionada.

## Referencias bibliográficas

[1] Johnson N. L. The legacy and future of CFD at Los Alamos, 1996 Canadian CFD Conference,

Ottawa, Canada, June 3-4 1996.

[2] A.B. Cain, J.H. Ferziger, W.C. Reynolds, Discrete orthogonal function expansions for non-

uniform grids using the fast fourier transform, *J. Comp. Phys.* 56 (1984) 272–286.

[3] E.J. Avital, N.D. Sandham, K.H. Luo, Stretched cartesian grids for solution of the

incompressible Navier–Stokes equations, *Int. J. Numer. Methods Fluids* 33 (2000) 897–918.

[4] P. S. Lowery and W.C. Reynolds. Numerical simulation of a spatially-developing forced,

mixing layer. Tf 26, Stanford University, 1986.

[5] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni, T.A. Zang, *Spectral Methods in Fluid Dynamics*,

Springer-Verlag, New York, 1988.

[6] J. W. Cooley, P. A. W. Lewis, and P. D. Welch. The fast fourier transform algorithm:

Programming considerations in the calculation of sine, cosine, and laplace transforms., *J. Sound*

*Vib.*, 12 :315–337, 1970.

[7] S.K. Lele, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *J. Comp. Phys.* 103

(1992) 16–42.

[8] Lesieur M and Metais O 1993 *Turbulence and coherent vortices* (In *Computational Fluid*

*Dynamics*, eds. Lesieur M, Comte P and Zinn-Justin J, Elsevier, New York).

[9] Lamballais E 1996 *Simulations numériques de la turbulence dans un canal plan tournant* PhD

thesis Institut National Polytechnique de Grenoble.

[10] Silvestrini J H and Lamballais E 2002 *Direct numerical simulation of wakes with virtual*

*cylinders* *Int. J. Comp. Fluid Dynam.* 16(4), 305-314.

[11] Gronskis A 2009 *Numerical Models to study external flows controlled by EHD actuation* PhD

thesis, Universidad de Buenos Aires.

[12] Laizet S 2005 *Developpement d'un code de calcul combinant des schémas de haute précision*

*avec une méthode de frontiere immergée pour la simulation des mouvements turbillonnaires en aval d'un bord de fuite*, PhD thesis Université de Poitiers.