

Introducción a la CFD

La mecánica de fluidos computacional, o en inglés, 'Computational Fluids Dynamics' (CFD) es una herramienta de cálculo numérico usada para simular el comportamiento de sistemas donde fluidos, transferencias de calor y otros procesos físicos relacionados interactúan entre sí. Funciona resolviendo las ecuaciones del fluido (en una forma especial) sobre la región de interés, con condiciones de contorno conocidas sobre esa región

Historia de la CFD

Durante muchos años, los ordenadores se han usado para resolver problemas fluidos. Numerosos programas han sido desarrollados para resolver problemas o casos específicos. A partir de mediados de los años 70, el conocimiento matemático requerido para generalizar los algoritmos comenzó a estar disponible y solvers CFD de propósito general comenzaron a desarrollarse. Estos aparecieron a principios de los años 80, y en sus inicios requirieron de ordenadores muy potentes, de un profundo conocimiento de dinámica de fluidos y grandes cantidades de tiempo para preparar simulaciones, lo que limitó el campo de las CFD inicialmente a la investigación.

Los avances recientes en potencia de proceso, junto con la manipulación interactiva en 3D de modelos han hecho que el proceso de crear un modelo CFD y analizarlo resulte una labor mucho menos intensiva, reduciendo tiempo y costes. Los solvers más avanzados contienen algoritmos que consiguen soluciones robustas del campo fluido en un tiempo razonable.

Como resultado de estos factores, las CFD son ahora una herramienta ya establecida, ayudando a reducir los tiempos de diseño.

Matemáticas del CFD

Las ecuaciones que describen los intercambios de cantidad de movimiento, calor y masa son conocidas como las ecuaciones de Navier Stokes. Estas ecuaciones en derivadas parciales fueron obtenidas a principios del siglo XIX y no existe una solución genérica analítica exceptuando muy pocos casos; aunque pueden ser discretizadas y resueltas de forma numérica.

Las ecuaciones necesarias para describir otros procesos, tales como la combustión, pueden ser resueltas en conjunción con las ecuaciones de NS. A menudo, un modelo aproximado se usa para estas ecuaciones adicionales; siendo la turbulencia un ejemplo particularmente importante.

Existen diferentes métodos para resolver el problema. El más común, y en el que el solver en el cual realizaremos los cálculos (ANSYS CFX) se basa, es conocido como la técnica de volúmenes finitos.

De esta forma la región de interés se divide en pequeñas subregiones, llamadas volúmenes de control. Las ecuaciones son discretizadas y resueltas de forma iterativa para cada volumen de control. Como resultado, se obtiene una aproximación del valor de cada variable en los puntos especificados a través del dominio. De esta forma se consigue obtener una imagen completa del comportamiento del fluido.

El set de ecuaciones resueltas por el software usado (CFX), como ya se dijo antes, son la versión no estacionaria de las ecuaciones de NS, en su forma de conservación. En concreto:

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (5.2.1)$$

Ecuación de cantidad de movimiento

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \times \vec{U}) = \nabla \cdot \left(-p \cdot \delta + \mu (\nabla \vec{U} + (\nabla \vec{U})^T) \right) + S_M \quad (5.2.2)$$

Ecuación de la energía

$$\frac{\partial \rho \cdot h_{tot}}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \cdot h_{tot}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S_E \quad (5.2.3)$$

Donde

$$h_{tot} = h(p, T) + \frac{1}{2} U^2 \quad (5.2.4)$$

Si el trabajo viscoso no es despreciable, entonces es necesario añadir un término adicional en el lado derecho de la ecuación de la energía (5.2.3) para tener en cuenta el efecto del cortante viscoso, con lo que pasa a ser:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \cdot h_{tot}}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \cdot h_{tot}) \\ = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot \left(\mu \nabla \vec{U} + (\nabla \vec{U})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{U} \cdot \delta \vec{U} \right) + S_E \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

Como puede observarse, existen 7 incógnitas (u,v,w,p,T,ρ,h) en las 5 ecuaciones obtenidas, pero puede cerrarse el problema añadiendo dos ecuaciones algebraicas termodinámicas: la ecuación de estado (que relaciona densidad con presión y temperatura) y la ecuación constitutiva, que relaciona entalpía con temperatura y presión.

Si la contribución de la energía cinética a la energía total puede despreciarse, entonces la ecuación de la energía (5.2.3) puede simplificarse a:

$$\frac{\partial \rho \cdot h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \cdot h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S_E \quad (5.2.6)$$

Puede encontrarse un estudio detallado de las ecuaciones de estado usadas por el programa de CFD usado en este proyecto (ANSYS CFX), así como otra mucha información adicional, en la referencia ^[1.5].

Metodología

La CFD puede ser usada para determinar las prestaciones de un componente en estado de diseño, o puede ser usada para analizar dificultades existentes en un componente ya existente y ayudar a conseguir un diseño mejorado.

Por ejemplo, puede encontrarse que la caída de presión en un componente como el siguiente es excesiva:

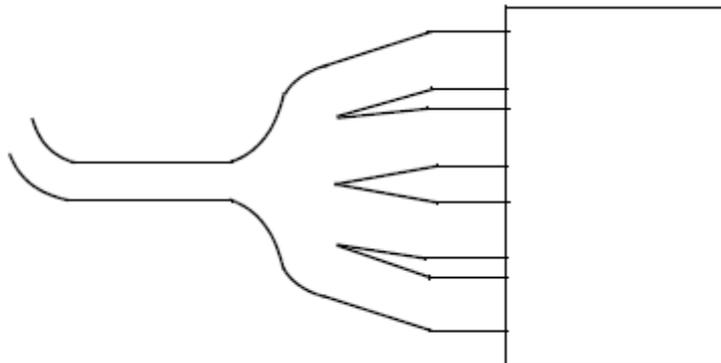


Ilustración 24

El primer paso es identificar la región de interés:

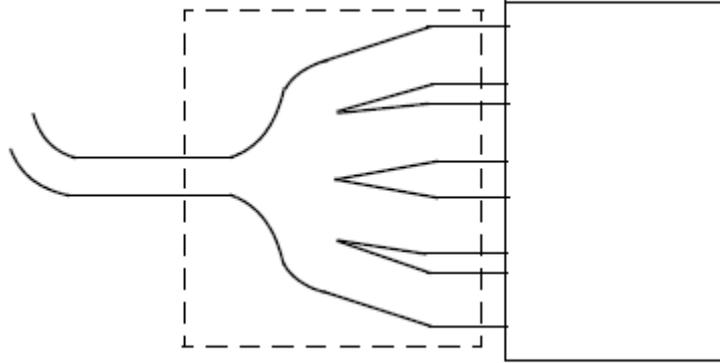


Ilustración 25

Tras lo cual se define la geometría de esta región. Si la geometría ya existe en CAD, puede ser importada directamente. El siguiente paso es generar la malla. Después de importar la malla dentro del preprocesador, se definen otros elementos de la simulación, incluyendo las condiciones de contorno (entradas, salidas, etc...) y las propiedades del fluido.

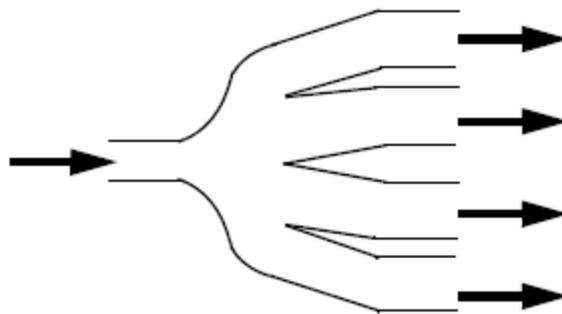


Ilustración 26

El solver entonces se pondrá en funcionamiento para producir un fichero de resultados, el cual contendrá las variaciones de velocidad, presión y cualquier otra variable a través de la región de interés.

Los resultados pueden visualizarse y proveer al ingeniero de una comprensión completa del comportamiento del fluido a través de la región de interés.

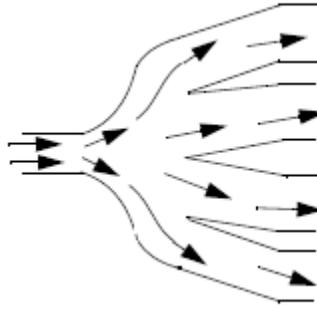


Ilustración 27

Esto le permitirá diseñar modificaciones que puedan ser testeadas cambiando únicamente la geometría del modelo CFD y observando el efecto producido.

De esta forma, el proceso de llevar a cabo una simulación CFD se puede dividir en cuatro componentes:

- Creación de la geometría y de la malla. Este proceso interactivo es la primera etapa del preproceso. El objetivo es producir una malla como entrada al preprocesador físico. Antes de que una malla sea creada, es necesario que se genere una geometría cerrada y sólida. La malla y la geometría pueden crearse en cualquier herramienta específica (en este proyecto se usa ANSYS CFX-MESH, pero para mallas estructuradas puede usarse ANSYS ICEM-CFD)

Los pasos básicos incluyen:

1. Definir la geometría de la región de interés
2. Crear las regiones de fluido, las regiones sólidas y las superficies donde se aplicarán las condiciones de contorno.
3. Configurar las propiedades apropiadas de la malla.

Esta etapa de preproceso está altamente automatizada en la mayoría de los paquetes actuales.

- Establecimiento de las propiedades físicas. Este proceso conforma la segunda etapa del preproceso y es usado para generar las entradas necesarias para el solver. Se seleccionan los modelos físicos que serán incluidos en la simulación y se especifican las condiciones de contorno y las propiedades del fluido.
- Solver. A la parte del programa encargado de resolver el problema CFD se denomina Solver. Genera los resultados requeridos en un proceso no interactivo. El problema CFD es resuelto como sigue:

1. Las ecuaciones en derivadas parciales son integradas sobre todos los volúmenes de control de la región de interés. Esto es equivalente a aplicar una ley de conservación básica (para la masa o cantidad de movimiento) en cada volumen de control.
2. Estas ecuaciones integrales se convierten a un sistema de ecuaciones algebraicas generando un set de aproximaciones para los valores de las ecuaciones integrales
3. Las ecuaciones algebraicas son resueltas de forma iterativa

Se requiere una aproximación iterativa a causa de la no linealidad de las ecuaciones, y si la solución se aproxima a la solución exacta, se dice que converge. Para cada iteración, se reporta un error (o residual) como medida de la conservación general de las propiedades del fluido.

Cómo de cerca está la solución final de la solución exacta depende de un número de factores, incluyendo el tamaño y la forma de los volúmenes de control y el tamaño de los residuales finales. Los procesos físicos complejos, tales como la combustión y la turbulencia, son normalmente modelados usando relaciones empíricas. Las aproximaciones tomadas en estos modelos contribuyen también a las diferencias entre la solución CFD y el flujo real.

El proceso de iteración no requiere interacción del usuario.

- Postproceso. Llamamos postprocesador al componente usado para analizar, visualizar y presentar los resultados de forma interactiva. El postproceso incluye cualquier cosa, desde obtención de valores puntuales hasta complejas secuencias de animación.

Discretización

Las soluciones analíticas de las ecuaciones de NS existen sólo para los casos más simples bajo condiciones ideales. Para obtener soluciones para flujos reales, tiene que adoptarse una aproximación numérica, donde las ecuaciones son reemplazadas por aproximaciones algebraicas que puedan ser resueltas usando un método numérico.

Discretización de las ecuaciones

Esta aproximación incluye discretizar el dominio espacial en volúmenes de control finitos, usando una malla. Las ecuaciones son integradas sobre cada volumen de control, de forma que cada parámetro (masa, cantidad de movimiento, energía, etc...) es conservado en cada uno de ellos.

La figura siguiente muestra una malla típica tridimensional, cuya superficie del volumen finito es representado por el área sombreada:

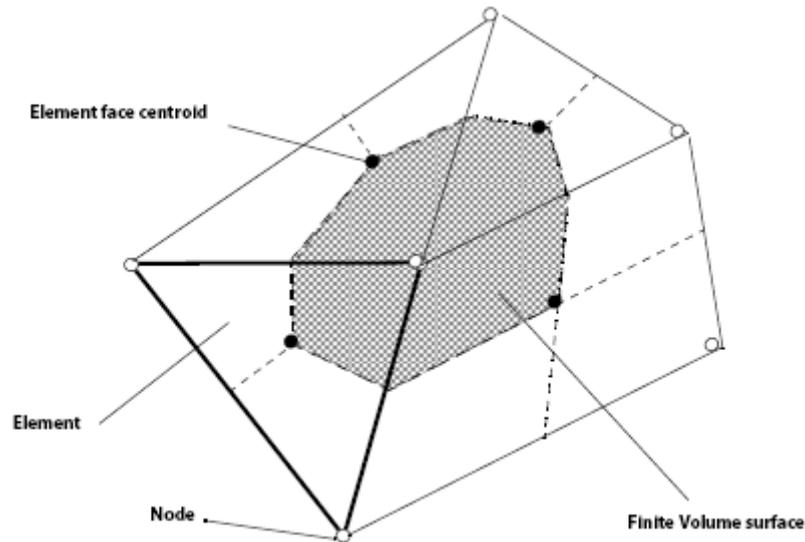


Ilustración 28

Está claro que cada nodo está rodeado por un set de superficies que se ajustan al volumen finito. Todas las variables de la solución y las propiedades del fluido se guardan en cada uno de los nodos de cada elemento.

Considerando las ecuaciones promediadas para la masa, cantidad de movimiento y energía, expresado en cartesianas:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (5.4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) \quad (5.4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_{\text{eff}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad (5.4.3)$$

Estas ecuaciones son integradas sobre un volumen de control, aplicando el teorema de la divergencia de Gauss para convertir algunas integrales de volumen en integrales de superficie. Para los volúmenes de control que no se deformen a lo largo del tiempo, la derivada del tiempo puede moverse fuera de las integrales de volumen y las ecuaciones pasan a ser:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho U_j dn_j = 0 \quad (5.4.4)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho U_i dV + \int_S \rho U_j U_i dn_j = - \int_S P dn_j + \int_S \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S_{U_i} dV \quad (5.4.5)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho U_j \phi dn_j = \int_S \Gamma_{eff} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dn_j + \int_V S_\phi dV \quad (5.4.6)$$

Donde V y S denotan respectivamente regiones volumétricas y superficiales, y dn_j corresponde a cada una de las componentes diferenciales cartesianas del vector normal exterior a la superficie. Las integrales de superficie son integraciones de flujos mientras que las integrales de volumen representan fuentes o términos de acumulación. Cambios en estas ecuaciones debidas a la deformación del volumen de control pueden encontrarse en ^[1.5]. Esto es particularmente importante para problemas no estacionarios con geometría cambiante.

El primer paso para resolver estas ecuaciones continuas de forma numérica es aproximarlas usando funciones discretas. Considere un elemento de malla aislado:

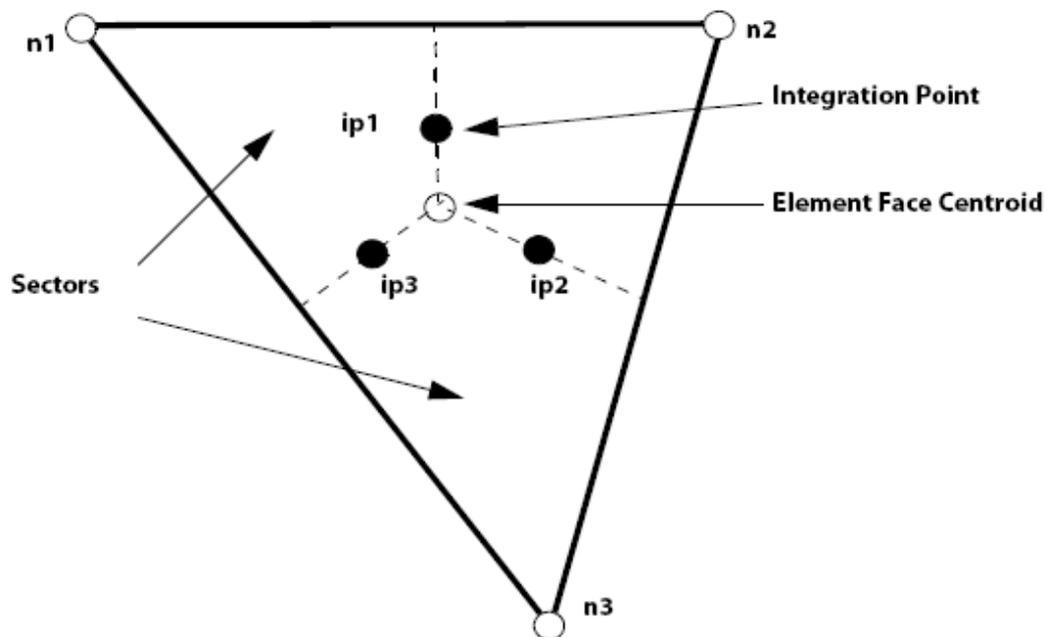


Ilustración 29

Los flujos superficiales tienen que ser representados de forma discreta en los puntos de integración para completar la conversión de las ecuaciones

contínuas a la forma discreta. Los puntos de integración (ipn) están localizados en el centro de cada segmento superficial¹ del elemento 3D.

La forma discreta de las ecuaciones integrales pueden expresarse como:

$$V \cdot \left(\frac{\rho - \rho^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} (\rho U_j \Delta n_j)_{ip} = 0 \quad (5.4.7)$$

$$\begin{aligned} V \cdot \left(\frac{\rho U_i - \rho^0 U_i^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} (U_i)_{ip} \\ = \sum_{ip} (P \Delta n_i)_{ip} + \sum_{ip} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{ip} + S_{U_i} \cdot V \end{aligned} \quad (5.4.8)$$

$$V \cdot \left(\frac{\rho \phi - \rho^0 \phi^0}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} \phi_{ip} = \sum_{ip} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{ip} + S_{\phi} \cdot V \quad (5.4.9)$$

Donde V es el volumen de control, el subíndice ip denota un punto de integración, la sumatoria es para todos los puntos de integración del volumen finito, Δn_j es el vector normal exterior discreto y Δt es el paso del tiempo. Nótese que se aplica una integración de Euler de primer orden, aunque pueden aplicarse métodos de segundo orden. El superíndice "0" se refiere a los elementos del paso anterior. El flujo de masa discreto a través de una superficie del volumen finito (\dot{m}_{ip}) puede obtenerse de:

$$\dot{m}_{ip} = (\rho U_j \Delta n_j)_{ip} \quad (5.4.10)$$

Funciones de forma

El campo de soluciones se guarda en los nodos de la malla. Sin embargo, varios términos en las ecuaciones mostradas requieren ser evaluados en los puntos de integración. Por esta razón, tiene que encontrarse una forma para calcular la variación de la solución dentro de un elemento. Esto es posible usando funciones de forma.

Una variable ϕ varía dentro de un elemento:

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{nodos}} N_i \cdot \phi_i \quad (5.4.11)$$

¹ Denominamos segmento superficial al segmento que une el centro de una cara con el centro de uno de los lados de ésta última.

Siendo N_i la función de forma para el nodo i y ϕ_i el valor de la variable en el nodo i . El sumatorio se aplica sobre cada uno de los nodos de un elemento. Además, las funciones de forma cumplen las siguientes propiedades:

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nodos}}} N_i = 1 \quad (5.4.12)$$

$$\text{En el nodo } j, \quad N_j = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (5.4.13)$$

En el software usado (ANSYS CFX), las funciones de forma son todas lineales en coordenadas paramétricas. Por ejemplo, para un elemento hexaédrico:

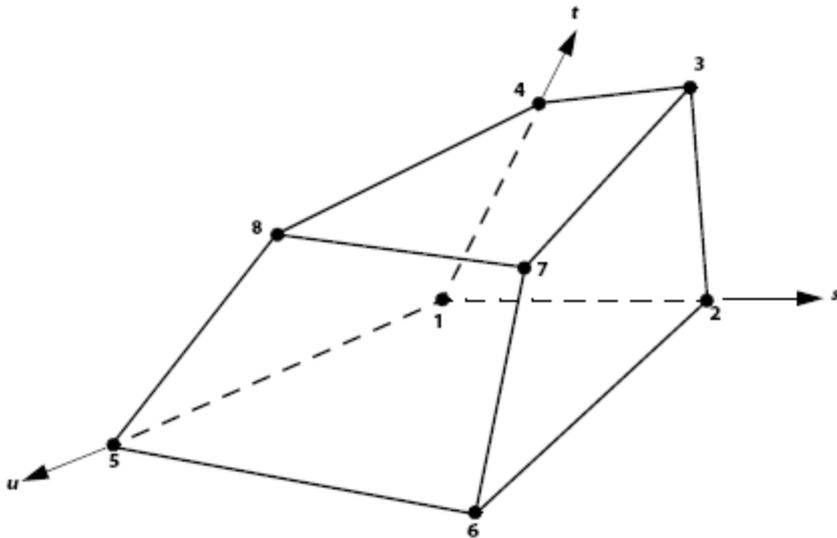


Ilustración 30

Las funciones de forma para cada nodo serán:

$$N_1(s, t, u) = (1 - s)(1 - t)(1 - u) \quad (5.4.14)$$

$$N_2(s, t, u) = s(1 - t)(1 - u) \quad (5.4.15)$$

$$N_3(s, t, u) = st(1 - u) \quad (5.4.16)$$

$$N_4(s, t, u) = (1 - s)t(1 - u) \quad (5.4.17)$$

$$N_5(s, t, u) = (1 - s)(1 - t)u \quad (5.4.18)$$

$$N_6(s, t, u) = s(1 - t)u \quad (5.4.19)$$

$$N_7(s, t, u) = stu \quad (5.4.20)$$

$$N_8(s, t, u) = (1 - s)tu \quad (5.4.21)$$

Las funciones de forma también se usan para calcular varias cantidades geométricas, tales como las coordenadas de integración ip , vectores de superficie, etc... Esto es posible porque la ecuación (5.4.11) también es aplicable a las coordenadas:

$$y = \sum_{i=1}^{N_{\text{nodos}}} N_i \cdot y_i \quad (5.4.22)$$

Sistema de ecuaciones acopladas

El set de ecuaciones lineales que se obtienen al aplicar el método de volúmenes finitos a todos los elementos del dominio son ecuaciones de conservación discretas. El sistema de ecuaciones puede ser escrita de la forma:

$$\sum_{nb_i} a_i^{nb} \phi_i^{nb} = b_i \quad (5.4.23)$$

Donde ϕ es la solución, b el miembro derecho de la ecuación (RHS, Right Hand Side), 'a' los coeficientes de la ecuación, 'i' es el número identificativo del volumen finito o nodo en cuestión y 'nb' significa 'neighbour', o vecino, pero también incluye los coeficientes centrales multiplicadores de la solución en la localización enésima. El nodo puede tener cualquier número de vecinos, con lo

que el método es aplicable tanto a mallas estructuradas como no estructuradas.

Para ecuaciones escalares (como por ejemplo la ecuación de la entalpía), a_i^{nb} , ϕ_i^{nb} y b_i son números, pero para las ecuaciones acopladas de masa y cantidad de movimiento son vectores de 4 componentes, que pueden ser expresados como:

$$a_i^{nb} = \begin{bmatrix} a_{uu} & a_{uv} & a_{uw} & a_{up} \\ a_{vu} & a_{vv} & a_{vw} & a_{vp} \\ a_{wu} & a_{wv} & a_{ww} & a_{wp} \\ a_{pu} & a_{pv} & a_{pw} & a_{pp} \end{bmatrix}_i^{nb} \quad (5.4.24)$$

$$\phi_i^{nb} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ p \end{bmatrix}_i^{nb} \quad (5.4.25)$$

$$b_i = \begin{bmatrix} b_u \\ b_v \\ b_w \\ b_p \end{bmatrix} \quad (5.4.26)$$

Aquí se puede ver como efectivamente las ecuaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento están totalmente acopladas y se resuelven a la vez. Las ventajas de este método sobre uno desacoplado son evidentes: robustez, eficiencia, generalidad y simplicidad. Sin embargo, es necesaria una alta capacidad de almacenamiento para todos los coeficientes.

Solver

El software usado (ANSYS CFX) usa, como ya hemos dicho, un solver acoplado, donde las ecuaciones hidrodinámicas (para u,v,w y p) son tomadas como un sistema simple. Esta aproximación a la solución usa una discretización implícita de las ecuaciones para cada paso de tiempo. Para problemas estacionarios, el paso cumple el papel de un 'parámetro de aceleración', para guiar a la solución aproximada de una forma física a la solución estacionaria. Esto reduce el número de iteraciones requeridas para la convergencia en esta clase de problemas.

El esquema siguiente muestra un esquema de resolución de un problema CFD típico:

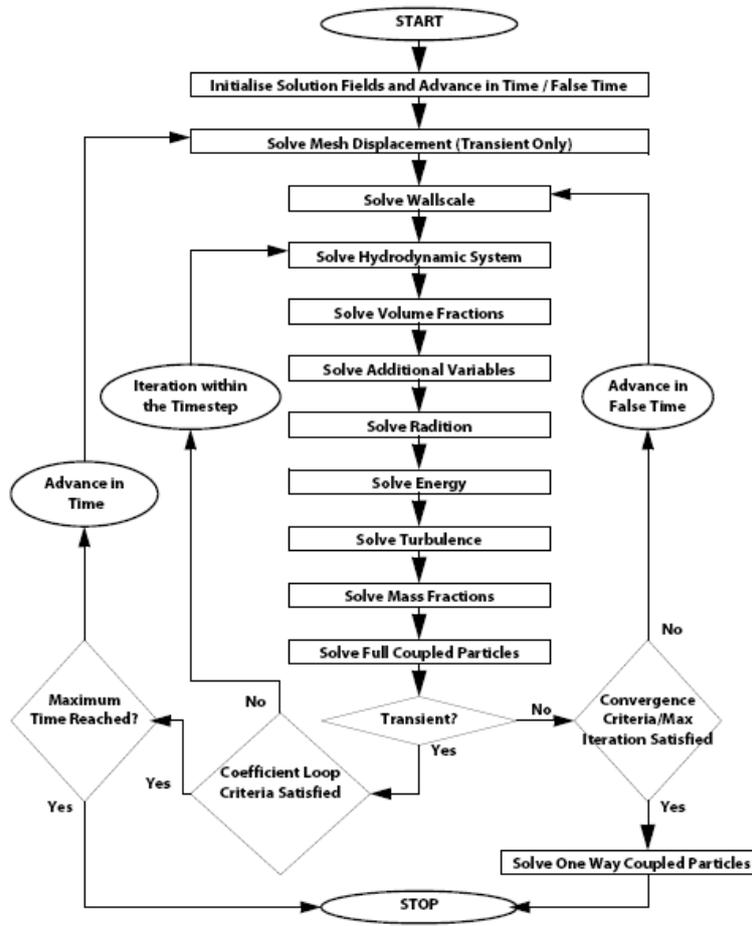


Ilustración 31

La solución de cada set de ecuaciones se obtiene mediante dos operaciones numéricamente intensivas:

1. Las ecuaciones no lineales son linealizadas y agrupadas en la matriz solución 'a'
2. Las ecuaciones lineales se resuelven usando un método "multigrid"

ANSYS CFX usa una técnica de factorización LU incompleta multigrid (ILU MG) para resolver el sistema discreto de ecuaciones lineales. Es un solver iterativo en el que la solución exacta se aproxima en el curso de varias iteraciones.

El sistema linealizado de ecuaciones discretas es, como ya habíamos visto:

$$[A] \cdot [\phi] = [b] \quad (5.4.27)$$

La ecuación anterior puede ser resuelta de forma iterativa comenzando por una solución aproximada f^n , a mejorar por una corrección (ϕ') para obtener una mejor solución, f^{n+1} . En efecto:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \phi' \quad (5.4.28)$$

Donde ϕ' es la solución de:

$$A \cdot \phi' = r^n \quad (5.4.29)$$

Siendo r^n el residual obtenido de

$$r^n = b - A \cdot \phi^n \quad (5.4.30)$$

Una aplicación repetida de este algoritmo permite alcanzar una solución con la precisión deseada. Por sí mismos, los solvers iterativos como este ILU tienden a disminuir rápidamente sus prestaciones conforme el número de elementos de malla aumenta. También las prestaciones disminuyen si hay presentes elementos con grandes ratios de aspecto. Para mejorarlo, se mejora el método usando una técnica llamada “multigrid”.

Esta técnica consiste en llevar a cabo una serie de iteraciones partiendo de una malla fina y progresivamente pasando en cada fase a mallas más bastas. Los resultados serán entonces transferidos de nuevo de la malla basta a la más fina.

Desde el punto de vista numérico, la aproximación ‘multigrid’ tiene una ventaja fundamental. Para un tamaño de malla dado, los solvers iterativos son sólo eficientes reduciendo errores que tienen la longitud de onda del orden del espaciado de la malla. Por tanto, mientras que los errores de pequeña longitud de onda desaparecen rápidamente, otros del orden del tamaño del dominio pueden llevar tiempos extremadamente largos en desaparecer. Este método evita el problema usando una serie de mallas bastas de forma que estos errores converjan más rápidamente.

El software usado (ANSYS CFX) construye las mallas bastas sumando varios elementos de la malla original:

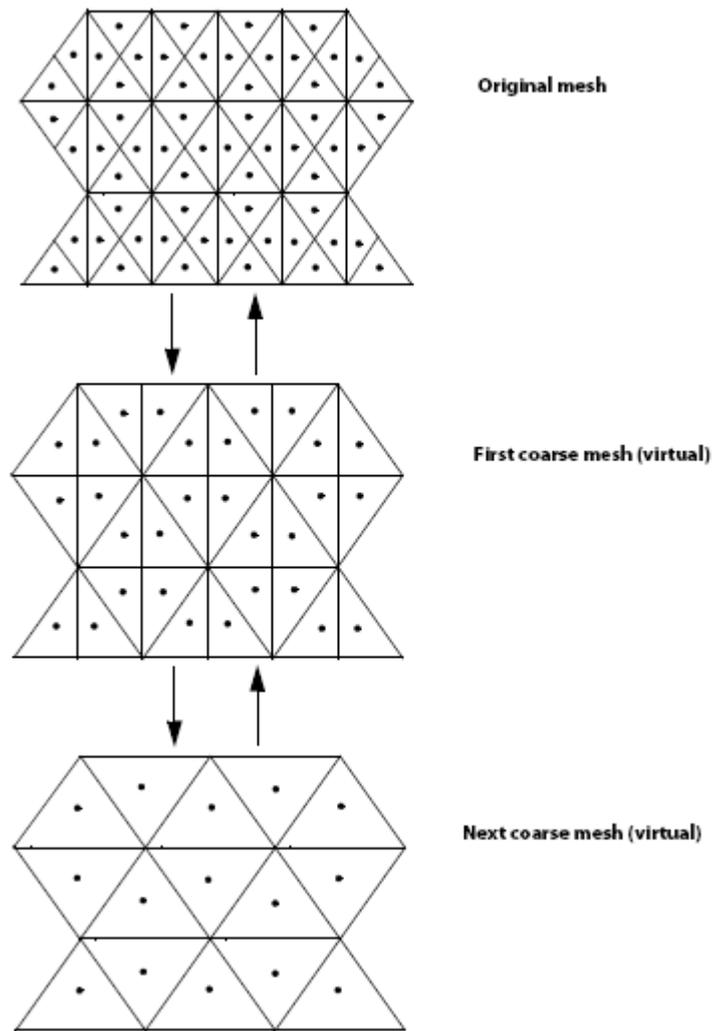


Ilustración 32

Errores de discretización

Todas las aproximaciones numéricas son propensas a algún grado de error. Algunos errores son resultado de la truncación de términos adicionales en las series expandidas. Otros son resultado del orden de la diferenciación usada en la aproximación.

Mucho de estos efectos pueden ser reducidos o eliminados comprendiendo por qué ocurren y cuando son más propensos a afectar la precisión de la solución

- Difusión numérica: Considérese un sistema 3D cartesiano. En una malla de elementos cuadriláteros, la dirección del flujo puede ser normal a las caras de cada elemento. En este caso, el flujo pasa desde uno de los elementos al siguiente.

En el caso en el que el flujo no sea normal a las caras de los elementos, por ejemplo en una zona con recirculación, el flujo tiene que moverse de un elemento hacia más de uno aguas abajo. De esta forma, parte del flujo tiene que moverse hacia otros elementos como se muestra:

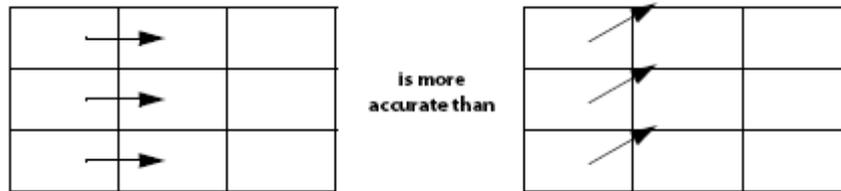


Ilustración 33

El efecto de esto sobre el flujo completo del dominio es que las características del flujo son suavizadas.

El diagrama siguiente ilustra el efecto. Si una función escalón es usado para definir el perfil de entrada pero no está alineado con la malla, el escalón se va suavizando de forma progresiva conforme el flujo se mueve a través del dominio. Este fenómeno a veces es llamado 'gradient smearing' o gradiente suavizado.

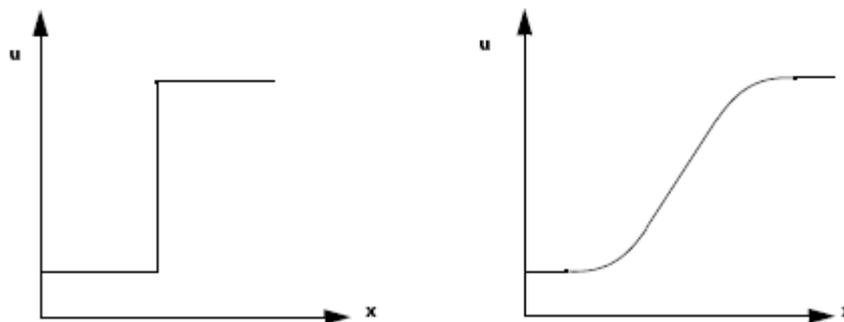


Ilustración 34

El efecto varía de acuerdo con la alineación de la malla con respecto a la dirección de la corriente. Es por tanto relativamente sencillo encontrar soluciones precisas para problemas sencillos, tales como el flujo en una entrada de aire con la malla alineada con el flujo predominante. Sin embargo, para situaciones donde el flujo no está alineado de forma predominante con la malla, la difusión numérica limita mucho la precisión de la solución.

Considérese un flujo similar, modelado en una malla no estructurada, tetraédrica, como se muestra en la figura siguiente:

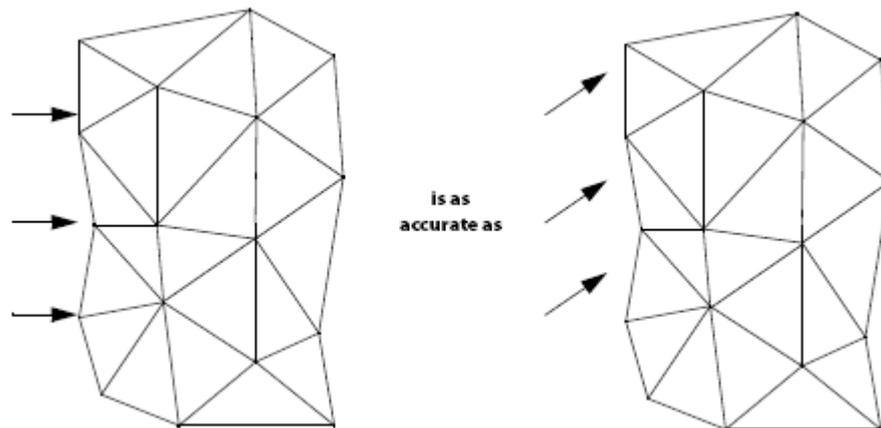


Ilustración 35

Con esta clase de mallas, no hay dirección de flujo que sea más o menos propensa a la difusión numérica que otras. De esta forma, la pérdida de precisión respecto a una malla estructurada de elementos hexaédricos para flujos simples es mayor. Sin embargo, los errores en la difusión numérica de una malla de elementos tetraédricos es más o menos constante y del mismo orden en todo el dominio. Esto significa que para flujos reales, volúmenes de control tetraédricos no tendrán pérdidas de precisión adicionales en zonas con recirculación, porque no existe ninguna dirección del flujo alineado con la malla.

- **Dispersión numérica:** Para algunas correcciones de las ecuaciones, puede observarse un cierto comportamiento como sistema de segundo orden. Esto puede llevar a veces a experimentar la denominada dispersión numérica.

Esta dispersión produce oscilaciones en los resultados, sobre todo en las zonas con gradientes extremos (por ejemplo a través de una onda de choque):

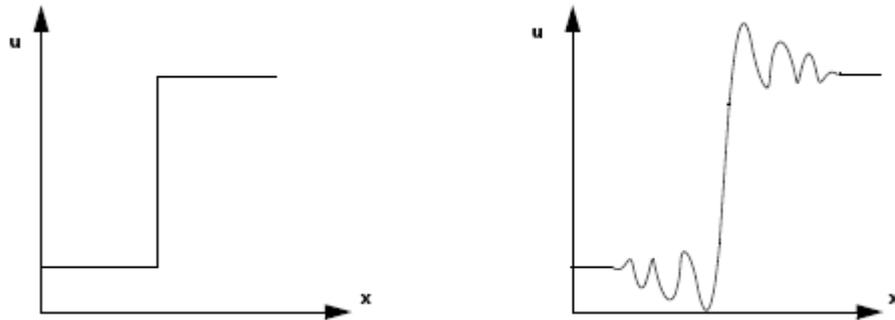


Ilustración 36

Modelos de turbulencia

Denominamos turbulencia a fluctuaciones en el campo fluido en el tiempo y en el espacio. Es un proceso complejo, debido a su carácter tridimensional, no estacionario y consistente de varias escalas. Puede tener un efecto considerable en las características del flujo. La turbulencia ocurre cuando las fuerzas de inercia en el fluido superan en importancia a las fuerzas viscosas y, por tanto, son característicos de flujos a altos números de Reynolds.

En principio, las ecuaciones de NS describen flujos tanto laminares como turbulentos sin tener que aportar información adicional. Sin embargo, los flujos turbulentos a números de Reynolds altos afectan a un gran rango de escalas de tamaños y tiempos, comenzando desde elementos muchos más pequeños que los que actualmente puede usarse de forma práctica en el análisis numérico. La simulación directa (DNS, Direct Numerical Simulation) de estos flujos requiere una potencia de cálculo que es en muchos órdenes de magnitud superior al máximo posible obtenido en las computadoras actuales o en un futuro próximo.

Se ha invertido muchos recursos en los últimos tiempos para poder predecir los efectos turbulentos en los actuales programas CFD, usando los denominados “modelos turbulentos”. Estos modelos han sido desarrollados específicamente para tener en cuenta estos efectos sin tener que recurrir a mallas prohibitivamente finas usadas en simulaciones DNS. La mayoría de los modelos turbulentos tienen carácter estadístico, aunque existen algunos modelos basados en parámetros físicos (LES, Large Eddy Simulation y DES, Detached Eddy Simulation Theory). En este proyecto sin embargo sólo nos centraremos en los casos más importantes del primer tipo.

Modelos estadísticos. Ecuaciones de Navier Stokes promediadas (RANS)

Observando escalas temporales mucho mayores que las fluctuaciones turbulentas, puede decirse que el flujo turbulento exhibe características medias, con una cierta componente fluctuante y variante con el tiempo. En concreto,

una componente de velocidad puede descomponerse en una componente media y una variable con el tiempo.

En general, los modelos turbulentos persiguen modificar las ecuaciones originales de Navier Stokes introduciendo cantidades medias y fluctuantes hasta llegar a las ecuaciones promediadas NS de Reynolds (RANS, Reynolds Averaged Navier Stokes equations). Estas ecuaciones representan sólo cantidades medias del flujo, mientras que los efectos turbulentos son modelados sin la necesidad de la resolución de las fluctuaciones turbulentas. Aún así, todas las escalas del campo turbilobarario son modeladas. Los modelos turbulentos basados en las ecuaciones RANS son conocidos como modelos de turbulencia estadística (STM, Statical Turbulence Models) debido al procedimiento de media estadística empleado para obtener las ecuaciones.

La simulación de las ecuaciones RANS reduce considerablemente el esfuerzo computacional comparado con las ecuaciones directas DNS y son típicamente usados para cálculos ingenieriles. Sin embargo, el procedimiento promediado introduce incógnitas adicionales conteniendo productos de las cantidades fluctuantes, las cuales actúan como tensiones adicionales en el fluido. Estos términos, llamadas tensiones turbulentas o de Reynolds, son dificultosos de determinar directamente.

Estas tensiones de Reynolds se modelan por ecuaciones adicionales de cantidades conocidas para conseguir cerrar el problema ('Closure' en inglés). Esto implica que existirán suficiente número de ecuaciones para todas las incógnitas, incluido el tensor de tensiones de Reynolds resultante del promediado. Las ecuaciones usadas para cerrar el problema definen el modelo de turbulencia.

De esta forma, una velocidad U puede dividirse en una componente media y una componente variante del tiempo:

$$U = \bar{U} + u \quad (5.5.1)$$

La componente media viene dada por:

$$\bar{U} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} U \cdot dt \quad (5.5.2)$$

Donde Δt es una escala de tiempo relativamente grande para las fluctuaciones turbulentas, pero pequeña respecto a la escala de tiempos para la que la ecuación será resuelta.

Substituyendo estas cantidades promediadas en las ecuaciones originales de transporte se obtienen las ecuaciones promediadas de Reynolds:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (5.5.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U) + \nabla \cdot (\rho U \times U) = \nabla \cdot (\tau - \rho \overline{u \times u}) + S_M \quad (5.5.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \nabla \cdot (\rho U \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi - \rho \overline{u \phi}) + S_E \quad (5.5.5)$$

Siendo τ el tensor de tensión molecular. La ecuación de continuidad no ha sido alterada pero la de cantidad de movimiento y la de transporte escalar contienen términos de flujo turbulento adicional a los flujos difusivos moleculares ya presentes. Estos son la tensión de Reynolds ($\rho \overline{u \times u}$) y el flujo de Reynolds ($\rho \overline{u \phi}$). Estos términos proceden del término convectivo no lineal de las ecuaciones no promediadas originales. Reflejan el hecho de que el transporte convectivo debido a las fluctuaciones de velocidad actuarán mejorando la mezcla entre las capas que si sólo se contasen las fluctuaciones térmicas a nivel molecular. A altos números de Reynolds, las fluctuaciones turbulentas de la velocidad ocurren en una escala de longitud mucho mayores que el camino libre medio de las fluctuaciones térmicas, con lo que los flujos turbulentos son muchos mayores que los moleculares.

La ecuación de la energía RANS es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_{tot}) + \nabla \cdot (\rho U \cdot h_{tot} + \rho \overline{u h} - \lambda \nabla T) = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (5.5.6)$$

Donde la entalpía total viene dada por:

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2} U^2 + k \quad (5.5.7)$$

Adicionalmente a la energía cinética media del flujo, la entalpía también contiene ahora una contribución de la energía cinética turbulenta (k), dada por:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u^2} \quad (5.5.7)$$

El problema se cierra cuando se proveen modelos para la computación de las tensiones de Reynolds y los flujos de Reynolds. Principalmente existen dos clases, modelos de viscosidad turbillanaria (EVM, Eddy Viscosity Models) y modelos de tensión de Reynolds (RSM, Reynolds Stress Models).

Eddy Viscosity Turbulence models

Una propuesta sugiere que la turbulencia consiste en pequeños torbellinos que se forman y disipan de forma continua, y en los cuales la tensión de Reynolds se asume proporcional a los gradientes de velocidad medios. Esto define un modelo de viscosidad turbillanaria (EVM)

La hipótesis fundamental de este modelo es que la tensión de Reynolds puede relacionarse con los gradientes medios de velocidad y la viscosidad turbillanaria por la hipótesis de gradiente de difusión, de una manera análoga entre tensión y cortante en un flujo laminar newtoniano:

$$-\rho \overline{u \times u} = \frac{2}{3} \rho k \delta - \frac{2}{3} \mu_t \nabla \cdot U \delta + \mu_t (\nabla U + (\nabla U)^T) \quad (5.5.8)$$

Aquí, μ_t es la viscosidad turbillanaria. Tiene que ser definida de antemano.

Además de la hipótesis de viscosidad turbillanaria también existe la hipótesis de difusividad turbillanaria basada en que los flujos de Reynolds de un escalar están relacionados de forma lineal con el gradiente escalar medio:

$$\overline{\rho u \phi} = \Gamma_t \nabla \phi \quad (5.5.9)$$

En este caso Γ_t es la difusividad turbillanaria, que tiene que venir ya definida. La difusividad turbillanaria puede escribirse como:

$$\Gamma_t = \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (5.5.10)$$

Siendo Pr_t el número de Prandtl turbulento. La difusividad turbillanaria viene definida, por tanto, a partir del número de Prandtl turbulento.

Las ecuaciones anteriores expresan sólo los términos fluctuantes de las ecuaciones promediadas si se conoce la viscosidad turbillanaria (μ_t). Existen dos métodos diferentes, k - ϵ y k - ω , cuya diferencia fundamental es la forma en la que se calcula esta variable.

Modelo cero ecuaciones

Los modelos más simples de modelado de viscosidad turbillónaria (μ_t) obtienen el valor del parámetro a partir de la velocidad media y una escala de longitud usando una fórmula empírica. A causa de que no hay que resolver ecuaciones adicionales de transporte, a estos modelos se le denominan “cero ecuaciones” (Zero Equation Model).

Normalmente se usan ecuaciones algebraicas para calcular la contribución viscosa de los torbellinos turbulentos. Se calcula para el dominio completo una viscosidad turbillónaria constante.

La viscosidad turbillónaria se modela como producto de una escala de velocidad turbulenta, U_t , y una escala de longitud turbulenta, l_t , tal y como propusieron Prandtl y Kolmogorov:

$$\mu_t = \rho \cdot f_\mu \cdot U_t \cdot l_t \quad (5.5.11)$$

Siendo f_μ una constante de proporcionalidad. La escala de velocidad se toma a partir de la máxima velocidad del dominio fluido. La escala de longitud se obtiene a partir de la fórmula:

$$l_t = \frac{V_D^{1/3}}{7} \quad (5.5.12)$$

Siendo V_D el volumen del dominio fluido. Este modelo tiene poco fundamento físico y no se recomienda para el uso ingenieril.

Modelo dos ecuaciones. Modelos k- ϵ y k- ω

Los modelos más usados, por ofrecer un buen compromiso entre esfuerzo computacional y precisión, son los modelos de dos ecuaciones. Estos modelos son mucho más sofisticados que los modelos de cero ecuaciones. En estos la escala de velocidad y longitud se resuelven usando ecuaciones de transporte separadas.

Los modelos k- ϵ y k- ω usan la hipótesis de gradiente difusivo para relacionar la tensión de Reynolds con los gradientes de velocidad media y la viscosidad turbillónaria. Esta viscosidad se modela como el producto entre la velocidad turbulenta y la escala de tamaño turbulento.

En estos modelos de dos ecuaciones, la escala de velocidad turbulenta se calcula a partir de la energía cinética turbulenta, obtenida de la solución de la ecuación de transporte. La escala de tamaño turbulento se estima a partir de dos propiedades del campo turbulento, normalmente la energía cinética

turbulenta y su tasa de disipación. La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta se obtiene también a partir de la solución de la ecuación de transporte.

Modelo k-ε

K es la energía cinética turbulenta y se define como la variación de las fluctuaciones en velocidad. Tiene dimensiones de L^2/T^2 . ε es la disipación turbillanaria (la tasa a la cual las fluctuaciones en velocidad son disipadas); sus dimensiones son de L^2/T^3 .

El modelo k-ε introduce dos nuevas variables en el sistema de ecuaciones. De esta forma, las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento quedan:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (5.5.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U) + \nabla \cdot (\rho U \times U) - \nabla \cdot (\mu_{\text{eff}} \nabla \cdot U) = \nabla p' + \nabla \cdot (\mu_{\text{eff}} \nabla \cdot U)^T + B \quad (5.5.14)$$

Siendo B la suma de las fuerzas superficiales, μ_{eff} es la viscosidad efectiva teniendo en cuenta la turbulencia, y p' es la presión modificada dada por:

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k \quad (5.5.15)$$

El modelo k-ε, como el modelo de cero ecuaciones, está basado en el concepto de viscosidad turbillanaria, por lo que:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (5.5.16)$$

Este modelo asume que la viscosidad turbillanaria está relacionada con la energía cinética turbulenta y la disipación turbulenta por la relación:

$$\mu_t = C_\mu \cdot \rho \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.5.17)$$

Siendo C_μ constante. Los valores de k y ε vienen directamente de las ecuaciones de transporte en diferencias para la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación turbulenta:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (5.5.18)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_s} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{s1} \cdot P_k - C_{s2} \cdot \rho \varepsilon) \quad (5.5.19)$$

Siendo C_{s1} , C_{s2} , σ_k y σ_s constantes. P_k es la producción de turbulencia debida a las fuerzas viscosas y de flotabilidad, que se puede modelar a partir de:

$$P_k = \mu_t \nabla U \cdot (\nabla U + \nabla U^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U (3\mu_t \nabla \cdot U + \rho k) + P_{kb} \quad (5.5.20)$$

Para flujo incompresible como este caso, $\nabla \cdot U$ es pequeño y por tanto el segundo término de la ecuación no contribuye de forma significativa a la producción de turbulencia. Para flujo compresible, $\nabla \cdot U$ es sólo relativamente grande en regiones con una alta divergencia como las ondas de choque.

El término $3\mu_t$ está basado en la asunción de “tensiones congeladas”. Esto reviene que los valores de k y ε adquieran valores demasiado grandes a través de ondas de choque, una situación que empeora conforme la malla sea más refinada en éstas.

Modelo $k-\omega$

El modelo $k-\omega$ se basa en la re-normalización de las ecuaciones de Navier Stokes. Las ecuaciones de transporte para la generación y disipación de turbulencia son las mismas que en el modelo estándar $k-\varepsilon$, pero las constantes difieren, y la constante $C_{\varepsilon 1}$ es reemplazada por la función $C_{\varepsilon 1RNG}$

La ecuación de transporte para la disipación turbulenta pasa a ser, por tanto:

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon RNG}} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1RNG} \cdot P_k - C_{\varepsilon 2RNG} \cdot \rho \varepsilon) \quad (5.5.21)$$

Siendo:

$$C_{\varepsilon 1RNG} = 1.42 - f_{\eta} \quad (5.5.22)$$

$$f_{\eta} = \frac{\eta \left(1 - \frac{\eta}{4.38} \right)}{(1 + \beta_{RNG} \cdot \eta^3)} \quad (5.5.23)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{P_k}{\rho C_{\mu} \text{RNG}^3}} \quad (5.5.24)$$

Una de las ventajas de la formulación k- ω es el tratamiento cerca de las paredes para bajos números de Reynolds. El modelo prescinde de las complejas funciones de amortiguamiento no lineal requeridas para el modelo k- ϵ y es por tanto más preciso y más robusto. Un modelo k- ϵ de bajo número de Reynolds típicamente requeriría una resolución de malla cerca de paredes menores a 0.2 unidades y^+ , mientras que para modelos k- ω requerirían mallas menores a 2 unidades y^+ . En flujos industriales, incluso mallas menores de 2 unidades pueden ser prohibitivas y por esa razón se desarrollaron nuevos tratamientos de las ecuaciones k- ω .

En los modelos k- ω se asume que la viscosidad turbulencia está relacionada con la energía cinética turbulenta y la frecuencia turbulenta por la relación:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (5.5.25)$$

El punto de partida de la formulación actual es el modelo k- ω desarrollado por Wilcox. Resuelve dos ecuaciones de transporte, una para la energía cinética turbulenta (k) y otra para la frecuencia turbulenta (ω). El tensor de esfuerzos es calculado a partir del concepto de viscosidad turbulencia. La ecuación k y ω son, respectivamente:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \cdot \rho k \omega \quad (5.5.26)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \omega) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \cdot \rho \omega^2 \quad (5.5.27)$$

Además de las variables independientes, la densidad y el vector velocidad son tratados como cantidades conocidas a partir de las ecuaciones de N-S. P_k es la tasa de producción de turbulencia, la cual es calculada igual que en el modelo k- ϵ .

Los valores de cada constante pueden verse en la bibliografía^[1.5], al igual que el cálculo del tensor de Reynold τ . Para evitar el crecimiento descontrolado de la energía cinética turbulenta en regiones de remanso, un limitador al término de producción de turbulencia se introduce en las ecuaciones:

$$\tilde{P}_k = \min(P_k, c_{lim} \cdot \varepsilon) \quad (5.5.28)$$

Siendo $c_{lim} = 10$ para modelos basados en ω . Este limitador no afecta a las prestaciones de la capa límite pero evita que los puntos de remanso tengan un crecimiento desacotado de la turbulencia en las simulaciones aerodinámicas. Este limitador también está disponible en algunos paquetes para los modelos k- ε .

Modelo k- ω BSL (Baseline)

El principal problema con el modelo de Wilcox es la conocida fuerte sensibilidad a las condiciones de corriente libre. En función del valor especificado para ω en la entrada pueden existir variaciones significativas en los resultados del modelo. Esto no es deseable, y para solucionar el problema este modelo propone usar el modelo k- ω cerca de la superficie y el modelo k- ε para las regiones exteriores.

El modelo k- ε es transformado en un modelo k- ω añadiendo las ecuaciones correspondientes. El modelo de Wilcox es, por tanto, multiplicado por una función de mezcla F_1 y el modelo modificado k- ε por una función $(1 - F_1)$. F_1 vale 1 cerca de la superficie y cambia a 0 dentro de la capa límite. En el borde de la capa límite y en zonas más externas, el modelo k- ε es usado.

De esta forma, las dos ecuaciones a usar quedan, fusionando ambos modelos:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k3}} \right) \nabla k \right] + P_k - \beta' \cdot \rho k \omega \quad (5.5.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \omega) \\ = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F_1) \cdot 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \cdot \omega} \nabla k \nabla \omega + \alpha_3 \frac{\omega}{k} P_k \\ - \beta_3 \cdot \rho \omega^2 \end{aligned} \quad (5.5.30)$$

Los coeficientes del nuevo modelo son una combinación lineal de los correspondientes coeficientes de los modelos de los que parten:

$$\varphi_3 = F_1 \cdot \varphi_1 + (1 - F_1) \cdot \varphi_2 \quad (5.5.31)$$

Los coeficientes de partida pueden encontrarse, de nuevo, en ^[1.5].

Modelo k- ω SST (Shear Stress Transport)

Este modelo $k-\omega$ tiene en cuenta el transporte de la tensión de cortante turbulenta y da una predicción de gran precisión del punto de separación bajo gradientes de presión adversos.

Como ya vimos, el modelo BSL combina las ventajas del modelo de Wilcox con las del modelo $k-\epsilon$, pero falla a la hora de predecir el punto de separación de superficies suaves. La razón de esta deficiencia es que ambos modelos no tienen en cuenta el transporte de la tensión de cortante turbulenta. Esto resulta en una sobre-predicción de la viscosidad turbulenta. El comportamiento correcto puede ser obtenido por una limitación a la formulación de la viscosidad turbulenta:

$$V_t = \frac{a_1 \cdot k}{\max(a_1 \cdot \omega, SF_2)} \quad (5.5.32)$$

Con:

$$V_t = \frac{\mu_t}{\rho} \quad (5.5.33)$$

Nuevamente F_2 es una función de mezcla similar a F_1 , que restringe la limitación a la capa límite, ya que la suposición no es correcta para corrientes libres. S es una medida invariante de la tasa de presión.

La expresión de F_2 es:

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (5.5.34)$$

Siendo

$$\arg_2 = \max\left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta'\omega y}, \frac{500v}{y^2\omega}\right) \quad (5.5.34)$$

Esta función de mezcla es crítica para el éxito del método. Su formulación se basa en la distancia a la superficie más cercana y en las variables del flujo.

El modelo $k-\omega$ SST es el usado para los cálculos aerodinámicos presentes en este proyecto. Aunque existen métodos más sofisticados y refinados (métodos directos y LES), la potencia de cálculo requerida es excesiva y la gran complejidad que entrañan sale fuera del contexto de este trabajo.