

“SOLVER” DE RIEMANN APROXIMADO PARA LAS ECUACIONES DE EULER

Oscar A. Falcinelli^{*§}, Sergio A. Elaskar^{*§} y José P. Tamagno^{*}

^{*} Departamento de Aeronáutica, FCEfyN, Universidad Nacional de Córdoba. [§] CONICET
Av. Velez Sarfield 1601. Córdoba 5000, Argentina.
selaskar@efn.uncor.edu

Key words: CFD, “solver” de Riemann, Ecuaciones de Euler.

Abstract. *En este trabajo se presenta un “solver” de Riemann no iterativo de alto grado de exactitud y bajo costo computacional para las ecuaciones de Euler basado en la reducción del número de variables independientes del problema, mediante la utilización del análisis dimensional. El mismo es comparado tanto en exactitud como en costo computacional con un “solver” iterativo exacto y tres “solvers” aproximados, el TRRS (Two Rarefaction Riemann “solver”), el TSRS (Two Shock Riemann “solver”) y una versión adaptativa de los dos anteriores. Para la verificación de su desempeño, se desarrollaron códigos computacionales de volúmenes finitos para la resolución de las ecuaciones de Euler unidimensionales y bidimensionales, basados en el método RCM (Random Choice Method), el método de Godunov bidimensional y en extensiones TVD (Total Variation Diminishing) del método MUSCL (Monotonic Upstream Schemes for Conservation Laws) propuesto por Hancock, y del método HLLC (Harten, Lax and van Leer Contact scheme). Para facilitar la comparación de todos los resultados se elige un problema de Riemann y se lo modela aplicando los cuatro métodos mencionados, trabajando tanto con un “solver” exacto como con el “solver” aproximado propuesto.*

1 INTRODUCCION

En la resolución numérica de las ecuaciones de Euler utilizando la técnica de volúmenes finitos, la operación más importante es la evaluación de los flujos numéricos en las interfases de las celdas. Su importancia radica en que de dicha evaluación dependen el grado de exactitud del esquema completo, su capacidad de definición de discontinuidades y también la correcta predicción de las velocidades de propagación de las ondas.

En muchos esquemas los flujos interfaciales se calculan teniendo en cuenta criterios de índole numérico, a partir de distintos grados de truncamiento de expansiones en series. Estos esquemas, suponen cierto grado de continuidad en las funciones y sus derivadas que no se satisfacen en presencia de soluciones discontinuas como ondas de choque o discontinuidades de contacto. Los inconvenientes que esto genera se fueron solucionando con mayor o menor éxito hasta que en 1959, Godunov² publica su trabajo “A Finite Difference Method for the computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics” donde plantea un esquema para la solución del sistema de ecuaciones de Euler que no parte de un análisis numérico sino de consideraciones puramente físicas. La pieza fundamental del esquema de Godunov es un “solver” de Riemann.

Los excelentes resultados obtenidos por Godunov motivaron varias líneas de investigación para extenderlo a varias dimensiones, alcanzar exactitud de segundo orden y propiedades TVD (Total Variation Diminishing). Sin embargo, toda esta familia de esquemas tienen la desventaja de requerir un “solver” de Riemann, cosa que los hace, en general, muy precisos pero computacionalmente más costosos. Este elevado costo computacional surge de la resolución iterativa del sistema de cinco ecuaciones algebraicas no lineales necesaria para obtener la solución exacta del problema de Riemann. Una alternativa es obtener solamente una solución aproximada del problema, lo cual da lugar a esquemas computacionalmente menos costosos aunque, menos precisos y robustos.

En este trabajo se presenta una forma no iterativa de resolver un problema de Riemann general. La solución es interpolada a partir de un conjunto de soluciones exactas resueltas con anterioridad. La posibilidad de generar una base de datos de soluciones tabuladas, surge de la reducción de cinco a solamente tres variables independientes en el problema de Riemann.

2 DESCRIPCION DEL “SOLVER” DE RIEMANN PROPUESTO

La solución del problema de Riemann no es función de la coordenada espacial⁴ “x” y de la temporal “t” sino de su relación “ x/t ”. Consta de tres ondas, dos no lineales (choques o abanicos de expansión) y una lineal (discontinuidad de contacto). Estas ondas separan cuatro estados constantes donde el vector de variables conservativas “U” toma los valores U_L , U_{*L} , U_{*R} y U_R . Los subíndices “L” indican lado izquierdo y “R” lado derecho. Los subíndices “*” corresponden a puntos ubicados entre las ondas no lineales.

Para la resolución del problema de Riemann se plantea la constancia de los invariantes de Riemann o la relación de Rankine-Hugoniot a través de las ondas, dependiendo si se trata de una onda continua o discontinua. Esto lleva en general a un sistema de nueve ecuaciones con

nueve incógnitas. Las incógnitas son las velocidades de las tres ondas más las seis variables que caracterizan a los estados U_{*L} , U_{*R} .

Operando algebraicamente² se concluye que la solución del problema de Riemann se puede resumir a encontrar la solución de la siguiente identidad:

$$f_L(p_*, U_L) + f_R(p_*, U_R) + \Delta u = 0 \quad (1)$$

La notación utilizada designa con p a las presiones, ρ a las densidades y u a las velocidades. En la Ec.1, $\Delta u = u_R - u_L$, mientras que $f_L(p_*, U_L)$ y $f_R(p_*, U_R)$ son los saltos de velocidad en las ondas no lineales cambiadas de signo:

$$f_K(p_*, U_K) = \begin{cases} (p_* - p_K) \cdot \sqrt{\frac{A_K}{p_* + B_K}} \dots\dots\dots \text{si } p_* \geq p_K & (2a) \\ \frac{2 \cdot a_K}{\gamma - 1} \cdot \left[\left(\frac{p_*}{p_K} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right] \dots\dots\dots \text{si } p_* < p_K & (2b) \end{cases}$$

$$A_K = \frac{2}{(\gamma + 1) \cdot \rho_K} \quad B_K = \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} \cdot p_K \quad (3)$$

donde γ es la relación de calores específicos, K puede ser L o R dependiendo si lo que se evalúa es el salto de velocidad en la onda no lineal izquierda o derecha, a_K la velocidad del sonido en las condiciones de la izquierda o derecha respectivamente. La Ec.1 es una ecuación no lineal algebraica implícita de la única variable p_* y debe ser resuelta en forma iterativa.

Las incógnitas restantes son las densidades a ambos lados de la discontinuidad de contacto (ρ_{*L} y ρ_{*R}) y la velocidad en la zona “star” (u_*). Todas ellas se calculan con fórmulas explícitas⁵.

Se hace notar que en la Ec.1 no aparecen explícitamente u_L y u_R sino solamente su diferencia. Por lo tanto la presión en la zona “star” no es función de las seis variables que definen los dos estados derecho e izquierdo sino sólo de cinco:

$$p_* = f_1(\Delta u, \rho_L, p_L, \rho_R, p_R) \quad (4)$$

En este trabajo se propone utilizar el análisis dimensional para reducir el número de variables independientes del problema de Riemann. Desde este punto de vista, se pueden considerar como variables de referencia la densidad y presión a un lado cualquiera del tubo de choque, por ejemplo el derecho:

$$\rho_{ref} = \rho_R \quad p_{ref} = p_R \quad (5)$$

La Ec.4, representa una relación entre presiones, velocidades y densidades. El análisis dimensional indica que las densidades pueden adimensionalizarse respecto de ρ_R , las presiones respecto de p_R y las velocidades respecto de $p_R^{1/2} \cdot \rho_R^{-1/2}$. Por lo tanto, si uno conoce la solución de un problema de Riemann particular (se conoce el valor de p_*) se pueden calcular tres parámetros adimensionales:

$$\pi_1 = \frac{\Delta u}{\sqrt{\frac{p_R}{\rho_R}}} \quad \pi_2 = \frac{p_L}{p_R} \quad \pi_3 = \frac{\rho_L}{\rho_R} \quad (6)$$

Los problemas de Riemann con idénticos valores de π_1 , π_2 , π_3 deberán poseer un comportamiento similar al conocido, implicando que $\frac{p_*}{p_R}$ deberá ser el mismo en todos ellos.

Para estudiar el funcionamiento de esta propuesta se realizan algunos ejemplos numéricos. En los problemas de Riemann siguientes:

ρ_L	u_L	p_L	ρ_R	u_R	p_R
1.2250E+00	1.0000E+02	1.0000E+05	1.2250E-01	0.0000E+00	2.0000E+03
4.9071E+01	8.4770E+02	8.7460E+06	4.9071E+00	6.9994E+02	1.7492E+05
6.7304E+00	6.5231E+02	1.0554E+07	6.7304E-01	2.1402E+02	2.1108E+05
4.1503E+00	7.8027E+02	1.1631E+07	4.1503E-01	1.9437E+02	2.3261E+05
9.4504E+00	6.4262E+02	1.5976E+07	9.4504E-01	1.8756E+02	3.1952E+05
3.0289E+01	2.9038E+02	2.9757E+06	3.0289E+00	1.8067E+02	5.9514E+04
3.6284E+01	3.0129E+02	6.5687E+05	3.6284E+00	2.5420E+02	1.3137E+04

se satisface que $\pi_1 = -0.78262$, $\pi_2 = 50$, $\pi_3 = 10$. Resolviendo para cada caso la Ec.1, se encuentra que en todos ellos $\frac{p_*}{p_R} = 13.312$. Mostrando que el análisis realizado es correcto. Es

posible escribir la Ec.1 como una relación entre π_1 , π_2 , π_3 y $\frac{p_*}{p_R}$.

Por ser sólo tres variables independientes, se puede generar un arreglo que contenga los valores de $\frac{p_*}{p_R}$ para N valores de π_1 , M valores de π_2 y Q valores de π_3 (N x M x Q datos).

Cuando se requiera la solución de un problema de Riemann particular, se calcularán los correspondientes valores de π_1 , π_2 , π_3 y se interpolará del arreglo el valor de $\frac{p_*}{p_R}$ entre las soluciones más próximas. Finalmente, la presión en la zona “star” se calcula como:

$$p_* = \left(\frac{p_*}{p_R} \right) \cdot p_R \quad (7)$$

siendo $\left(\frac{p_*}{p_R} \right)$ el valor interpolado a partir del arreglo. Una vez calculada la presión en la zona “star”, el resto de las variables de interés se obtienen con las mismas fórmulas explícitas⁵ utilizadas en el “solver” exacto.

Para el cálculo de todos los resultados presentados en este trabajo, los arreglos utilizados se generaron con diferencias constantes de π_1 , π_2 , π_3 e interpolaciones lineales. Sin embargo, podrían obtenerse mejores resultados utilizando interpolaciones de órdenes superiores o espaciados diferentes.

Si bien el procedimiento descrito en este trabajo consiste en interpolar la presión y con esta presión interpolada calcular la densidad y los saltos de velocidad en cada onda, no es el único procedimiento posible. Se podrían también generar arreglos con la densidad adimensional o los saltos de velocidad adimensional en cada onda.

Para aumentar la exactitud de la solución aproximada, sería deseable que el rango de variación de π_1 , π_2 y π_3 sea lo más chico posible. Una forma de disminuir sensiblemente el rango de variación de π_2 o π_3 es evitar el almacenamiento de problemas de Riemann simétricos.

Se dice que dos problemas de Riemann A y B son simétricos si cumplen las siguientes condiciones:

$$(p_R)_A = (p_L)_B \quad (\rho_R)_A = (\rho_L)_B \quad \Delta u_A = \Delta u_B \quad (8)$$

El almacenamiento de casos simétricos puede ser evitado si se adopta como criterio de selección de variables de referencia (p_{ref}, ρ_{ref}) en la Ec.5, no las L ó R sino las del lado de mayor presión. De este modo, el valor de π_2 siempre será menor o igual a uno.

Si bien en el análisis dimensional indica que las velocidades deben adimensionalizarse respecto $p_{ref}^{1/2} \cdot \rho_{ref}^{-1/2}$, puede elegirse también cualquier múltiplo escalar de esa magnitud. El parámetro popularmente utilizado para este fin es la velocidad del sonido ($a_{ref} = \gamma^{1/2} \cdot p_{ref}^{1/2} \cdot \rho_{ref}^{-1/2}$). En este trabajo, se utiliza este criterio, por lo que, el parámetro π_1 se define como:

$$\pi_1 = \frac{\Delta u}{\sqrt{\gamma \cdot \frac{p_{ref}}{\rho_{ref}}}} = \frac{\Delta u}{a_{ref}} \quad (9)$$

Finalmente cabe aclarar que la interpolación no se hace necesaria en caso que la solución del problema de Riemann corresponda a un sistema de dos ondas de expansión, ya que de ser así, la Ec.1 tiene solución analítica.

3 COMPARACION CON OTROS “SOLVERS” DE RIEMANN

El “solver” de Riemann propuesto se comparó tanto en exactitud como en costo computacional con un “solver” de Riemann iterativo (busca en forma iterativa la solución exacta de la Ec.1) y con tres “solvers” no iterativos de conocido desempeño⁵. Para la comparación, se generaron problemas de Riemann en forma aleatoria con valores de los parámetros π_1 , π_2 y π_3 tales que:

$$-10.05 \leq \pi_1 \leq 4.95 \quad 0.05 \leq \pi_2 \leq 1 \quad 0.05 \leq \pi_3 \leq 5.05 \quad (10)$$

A continuación se explica en detalle cada uno de los “solvers” utilizados.

3.1 “Solver” de Riemann iterativo

Este “solver” busca iterativamente la solución de la Ec.1 que, evaluada en una presión que no es su solución, puede escribirse como:

$$f_L(p, U_L) + f_R(p, U_R) + \Delta u = R(p) \quad (11)$$

siendo $R(p)$ el residuo que se pretende anular. $f_L(p, U_L)$ y $f_R(p, U_R)$ se calculan según las Ecs.2 y 3.

Para la resolución iterativa de la Ec.11 se utiliza el método de Newton-Rapson. Esto requiere no sólo la evaluación de la función sino también de su derivada. Si bien esto conlleva un cierto número de operaciones, su costo computacional no es significativo ya que la evaluación de la derivada requiere cálculos simples una vez que se ha evaluado la función.

La derivada de la función residuo respecto de p es la suma de las derivadas de las funciones f_L y f_R ya que para un problema de Riemann dado, Δu , U_L y U_R son constantes.

El algoritmo de Newton-Rapson indica que la búsqueda de la solución de la Ec.11 debe seguirse según:

$$p_{i+1} = p_i - \frac{R_{(p_i)}}{R'_{(p_i)}} \quad (12)$$

siendo p_{i+1} el valor de la presión en la iteración $i+1$, p_i el valor de la presión en la iteración i , $R_{(p_i)}$ el valor de su residuo calculado según la Ec.11 y $R'_{(p_i)}$ el valor de la derivada de su residuo.

Del análisis de las derivadas de la función residuo (Ec.11), se concluye que la misma es creciente y cóncava hacia abajo para toda presión. Esto puede llegar a generar inconvenientes si se parte de una presión demasiado alta ya que la Ec.12 puede sugerir presiones negativas.

Para evitar este inconveniente, lo que se hizo en este trabajo fue evaluar la función residuo (Ec.11) para $p = p_{\min}$ y $p = p_{\max}$, siendo $p_{\min} = \min[p_L, p_R]$ y $p_{\max} = \max[p_L, p_R]$. Si ambos residuos son positivos implica que la presión que anula el residuo es menor que ambas y se tiene un problema de Riemann con dos ondas de expansión. En ese caso la solución es explícita. En caso que el residuo de la presión máxima sea mayor que cero y el de la presión mínima sea menor que cero, el problema de Riemann tiene una onda de choque y un abanico de expansión, y se toma como primera iteración el valor de la presión mínima p_{\min} (que será, sin dudas, menor que la presión que anule el residuo). En caso que ambos residuos sean negativos, el problema de Riemann tiene dos ondas de choque y la presión solución será mayor que ambas, por lo que se toma como primera iteración el valor de la presión máxima p_{\max} .

Utilizando este procedimiento, se sabe de antemano que tipo de problema de Riemann será la solución. Esto evita el tener que tomar la decisión en cada iteración de que función utilizar en la Ec.2 ya que esto se sabe de antemano. Se acorta así ligeramente el tiempo necesario para alcanzar la solución.

3.2 “Solver” de Riemann no iterativo TRRS (Two-Rarefaction Riemann “solver”)

Un caso particular de problema de Riemann es aquel en el que las dos ondas no lineales son expansiones. En esa situación, de la Ec.1 se puede llegar a explicitar el valor de p_* . Resulta:

$$p_* = \left[\frac{a_L + a_R - \Delta u \cdot \frac{(\gamma-1)}{2}}{\frac{a_L}{p_L^{\frac{(\gamma-1)}{2\gamma}}} + \frac{a_R}{p_R^{\frac{(\gamma-1)}{2\gamma}}}} \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \quad (13)$$

En la función residuo (Ec.13), cuando la presión p supera el valor p_{\min} , se pasa a calcular uno de los f_k con la Ec.2a en lugar de con la Ec.2b. Este cambio de función, no produce ninguna discontinuidad ni en la función residuo ni en su primer derivada. Esta semejanza en función y derivada primera implica que el error en el que se incurre si en lugar de cambiar de función, se sigue calculando el residuo utilizando los f_k según Ec.2b es a lo sumo de segundo orden.

Como al cambiar de función se pierde la posibilidad de explicitar el valor de p_* , el método TRRS sugiere calcular la presión en la zona “star” utilizando siempre la Ec.13, sin importar de qué tipo de problema de Riemann se trate.

El error de este método será cero para problemas de Riemann con dos ondas de expansión e irá siendo cada vez mayor cuanto más diste la solución exacta p_* de la presión mínima p_{\min} .

3.3 “Solver” de Riemann aproximado no iterativo, TSRS (Two-Shock Riemann “solver”)

El “solver” TSRS es el extremo opuesto al TRRS. En él, la solución se calcula presuponiendo que las dos ondas no lineales del problema de Riemann son choques. En dicho caso, los valores de f_k en la Ec.1 deben calcularse según Ec.2a:

$$(p_* - p_L) \cdot g(p_*, U_L) + (p_* - p_R) \cdot g(p_*, U_R) + \Delta u = 0 \quad (14)$$

siendo:

$$g(p, U_k) = \sqrt{\frac{2}{p + \frac{(\gamma-1)}{(\gamma+1)} \cdot p_k}} \cdot \frac{(\gamma+1) \cdot \rho_k}{2} \quad (15)$$

En este caso, no es posible explicitar p_* . Lo que se hace entonces es proponer alguna aproximación de p_* , que llamamos p_0 , para calcular los valores de $g(p_0, U_L)$ y $g(p_0, U_R)$. Luego, si se suponen estas funciones g como constantes, la Ec.14 es una ecuación lineal de la que si puede despejarse p_* :

$$p_* = \frac{p_L \cdot g(p_0, U_L) + p_R \cdot g(p_0, U_R) - \Delta u}{g(p_0, U_L) + g(p_0, U_R)} \quad (16)$$

La estimación de p_* utilizada en este trabajo es la sugerida por Toro⁵:

$$p_0 = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{u_L + u_R}{2} \cdot \frac{\rho_L + \rho_R}{2} \cdot \frac{a_L + a_R}{2} \quad (17)$$

Este esquema no da en general la solución exacta dado que ni siquiera en el caso de aproximar un problema de Riemann formado por dos choques predice la solución exacta, sin embargo, este método resulta ser muy robusto y uno de los “solvers” de Riemann aproximados más usados.

3.4 “Solver” de Riemann aproximado adaptativo basado en TSRS y TRRS

Como cuarto caso se comparó el “solver” propuesto con un “solver” aproximado desarrollado por Toro⁵ que procura combinar las potencialidades de los dos anteriores. El principio de funcionamiento consiste en calcular la aproximación p_0 de la Ec.17. Luego, se compara esta p_0 con p_{\min} y p_{\max} . La presión predicha por el esquema adaptativo es:

$$p_* = \begin{cases} p_{*TRRS} & \text{si } p_0 \leq p_{\min} \\ p_0 & \text{si } p_{\min} < p_0 < p_{\max} \\ p_{*TSRS} & \text{si } p_0 \geq p_{\max} \end{cases} \quad (18)$$

siendo p_{*TRRS} y p_{*TSRS} las presiones predichas por los “solvers” TRRS y TSRS respectivamente.

Los resultados de las comparaciones se muestran en la Sección 5 de este trabajo.

4 DESCRIPCION DE LOS ESQUEMAS UTILIZADOS

Con el objeto de poner a prueba la utilidad del “solver” de Riemann propuesto, se desarrollaron cuatro códigos computacionales basados en formulaciones conocidas. Tres de estos programas son TVD unidimensionales y uno de ellos es bidimensional de primer orden. Las formulaciones utilizadas no fueron seleccionadas por su eficiencia, sino por su cualidad de requerir en mayor o menor medida el uso de un “solver” de Riemann.

Los métodos TVD “upwind” al igual que el de Godunov pueden ser aplicados con cualquier “solver” de Riemann, exacto o aproximado. Teniendo en cuenta esto, y con el propósito de evaluar el impacto tanto en costo computacional como en exactitud que el “solver” de Riemann tiene en los distintos métodos, de cada uno de los códigos se programaron dos versiones, una que utiliza el “solver” exacto iterativo y otra, el “solver” aproximado aquí propuesto.

Los métodos programados son: a) Godunov bidimensional, b) HLLC⁶ TVD unidimensional, c) MUSCL TVD propuesto por Van Leer y atribuido a Hancock³ unidimensional, d) RCM¹. En las secciones siguientes se explica en detalle cada uno de ellos.

4.1 Método HLLC TVD unidimensional

En la formulación HLLC⁶, la estructura de solución del problema de Riemann consiste en cuatro estados separados por tres ondas discontinuas. El método no calcula las velocidades de estas tres ondas sino que las obtiene desde otro esquema. En este trabajo, se utiliza un “solver” de Riemann para el cálculo de dichas velocidades. Conocidas las velocidades de las ondas, se plantea la relación de Rankine-Hugoniot a través de cada una de ellas obteniéndose:

$$\text{R.H.} \Rightarrow \begin{cases} F_{*L} - F_L = s_L \cdot (U_{*L} - U_L) \\ F_{*R} - F_{*L} = s_* \cdot (U_{*R} - U_{*L}) \\ F_R - F_{*R} = s_R \cdot (U_R - U_{*R}) \end{cases} \quad (19)$$

donde s_L , s_* y s_R son las velocidades de las tres ondas, F_L , F_{*L} , F_{*R} y F_R los vectores flujo en los cuatro estados del problema de Riemann.

En el sistema de Ecs.19 se piensa a F_{*L} y F_{*R} no como la función flujo valuada en U_{*L} y U_{*R} sino como variables independientes. Bajo esa hipótesis, el sistema está formado por nueve ecuaciones (recordar que cada vector tiene tres componentes) y doce incógnitas, ya que se desconocen las tres componentes de U_{*L} , U_{*R} , F_{*L} y F_{*R} .

Despejando de la Ec.19a F_{*L} :

$$F_{*L} = F_L + s_L \cdot (U_{*L} - U_L) \quad (20)$$

de la Ec.19c F_{*R} :

$$F_{*R} = F_R - s_R \cdot (U_R - U_{*R}) \quad (21)$$

y reemplazando en Ec.19b se obtiene:

$$U_{*R} \cdot (s_R - s_*) + U_{*L} \cdot (s_* - s_L) = F_L - F_R + s_R \cdot U_R - s_L \cdot U_L \quad (22)$$

La Ec. 22 representa tres ecuaciones escalares con seis incógnitas (las tres componentes de U_{*L} y U_{*R}) por lo que deben agregarse tres ecuaciones para definir matemáticamente el problema. Parte de esta información surge de la constancia de presión y velocidad a través de la discontinuidad de contacto ($p_{*R} = p_{*L} = p_*$, $u_{*R} = u_{*L} = u_*$), con lo que el grado de indeterminación se reduce sólo a uno. En el trabajo original, Toro⁶ sugiere salvar la indeterminación calculando:

$$\rho_{*K} = \rho_K \cdot \left(\frac{s_K - u_K}{s_K - s_*} \right) \quad (23)$$

En el presente trabajo, se propone la siguiente condición:

$$u_{*R} = u_{*L} = u_* = s_* \quad (24)$$

La velocidad en la zona “star” debe coincidir con la velocidad de la discontinuidad de contacto. Bajo esta hipótesis, el lado izquierdo de la segunda de las Ecs.22 resulta ser s_* por el lado izquierdo de la primera. Esto limita la libre elección de s_* . Si llamamos RHS1 a la primera componente del miembro derecho de la Ec.22, RHS2 a la segunda y RHS3 a la tercera, se concluye que la Ec.24 y la Ec.22 se cumplen simultáneamente si s_* satisface la relación:

$$s_* = \frac{\text{RHS2}}{\text{RHS1}} \quad (25)$$

Del planteo de la tercera componente de la Ec.22 con la restricción 25, surge que la solución es posible, si la presión en la zona “star” es:

$$p_* = \frac{\text{RHS3} - \frac{s_*}{2} \cdot \text{RHS2}}{(s_R - s_L)} \cdot (\gamma - 1) \quad (26)$$

El esquema completo consiste entonces en generar una estimación de s_L y s_R , calcular s_* con Ec.25, luego p_* con Ec.26 y evaluar la Ec.23 para obtener ρ_{*R} y ρ_{*L} . Con eso quedan definidos completamente U_{*L} y U_{*R} . Finalmente se calculan los flujos en cada zona del problema de Riemann utilizando las Ecs.20 y 21.

Para la estimación de las velocidades s_L y s_R , Toro⁵ sugiere: en caso de tener un abanico de expansión, utilizar la velocidad extrema que limita con el estado sin perturbar y en caso de un choque, usar la velocidad del choque.

Se consigue entonces una descripción completa del valor del flujo en el problema de Riemann (F_L , F_{*L} , F_{*R} y F_R).

La diferencia entre un método de primer orden, uno de segundo orden o uno TVD radica en cómo se calcula el flujo numérico en la interfase a partir de este esquema de flujos. Si llamamos 1 a la onda que separa los estados L y *L, 2 a la que separa los estados *L y *R y 3 la que separa los estados *R y R, el algoritmo utilizado en este trabajo, para el cálculo de los flujos numéricos es el siguiente:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \cdot (F_i + F_{i+1}) - \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^3 \text{sign}(s_j) \cdot \phi_{i+\frac{1}{2}}^j \cdot \Delta F_{i+\frac{1}{2}}^j \quad (27)$$

donde i e $i+1$ denotan las celdas a la izquierda y derecha de la interfaz, $\phi_{i+\frac{1}{2}}^j$ la función

limitadora de la onda j y $\Delta F_{i+\frac{1}{2}}^j$ el salto de flujo a través de la onda j . Por brevedad, en este

trabajo, se presentan solamente los resultados obtenidos con función limitadora de Van-Leer; sin embargo, el método ha mostrado trabajar en forma eficiente también con otras funciones limitadoras.

La evaluación de la función limitadora se hace onda a onda y componente a componente, con lo que, en el cálculo de una interfase, se calculan nueve valores de dicha función.

Finalmente, se calcula el avance en el tiempo del vector U en cada celda con la fórmula de todo esquema conservativo explícito:

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left(F_{i-\frac{1}{2}} - F_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (28)$$

siendo U_i^{n+1} y U_i^n las soluciones en la celda i en los paso de tiempo $n+1$ y n respectivamente.

4.2 Método MUSCL TVD unidimensional

El método MUSCL propuesto por Hancock³ consta de los siguientes pasos:

1° cálculo de las pendientes Δ_i en las celdas y extrapolación de variables a los contornos

2° avance en cada celda de $\frac{1}{2}$ paso de tiempo

3° resolución de los problemas de Riemann y cálculo de los flujos numéricos con algún esquema de primer orden

4° avance de la solución un paso de tiempo completo

En el **paso uno**, se parte del valor de la solución en cada celda y se elige, siguiendo algún criterio, qué pendiente de variación $\frac{\Delta_i}{\Delta x}$ (constante) se adopta en el interior de cada una.

Luego, se toma cada una de las celdas por separado y utilizando la pendiente recién calculada se extrapola desde el medio de la celda hasta los contornos para obtener:

$$U_i^L = U_i - \frac{\Delta_i}{\Delta x} \cdot \frac{\Delta x}{2} \quad U_i^R = U_i + \frac{\Delta_i}{\Delta x} \cdot \frac{\Delta x}{2} \quad (29)$$

En el **paso dos** se calcula la evolución en medio paso de tiempo de los valores extrapolados U_{i+1}^L y U_i^R de acuerdo con:

$$\overline{U_{i+1}^L} = U_{i+1}^L + \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot [F(U_{i+1}^L) - F(U_{i+1}^R)] \quad (30)$$

$$\overline{U_i^R} = U_i^R + \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot [F(U_i^L) - F(U_i^R)] \quad (31)$$

generándose así estados constantes para un problema de Riemann convencional en la interfaz $i+\frac{1}{2}$.

El **paso tres** consiste en resolver un problema de Riemann con datos $U_L = \overline{U_i^R}$; $U_R = \overline{U_{i+1}^L}$ y obtener el flujo numérico que se utilizará para avanzar el paso de tiempo completo como el flujo teórico del estado de cero velocidad de propagación, es decir $F_{i+1/2} = F\left(U_{i+1/2}\left(\frac{x}{t}=0\right)\right)$. Esto

equivale a usar el método de Godunov para resolver el flujo pero con el estado extrapolado avanzado medio paso de tiempo.

El **cuarto paso** es finalmente el avance en el tiempo que se hace según la Ec.28.

El esquema adquiere su condición TVD en el paso uno cuando se decide cómo tomar las pendientes en el interior de las celdas. En este caso, se utilizó el siguiente criterio propuesto por Toro⁵:

$$\Delta_i = \begin{cases} \max \left[0, \min \left(\beta \cdot \Delta_{i-\frac{1}{2}}, \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right), \min \left(\Delta_{i-\frac{1}{2}}, \beta \cdot \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right) \right] & \text{si } \Delta_{i+\frac{1}{2}} > 0 \\ \min \left[0, \max \left(\beta \cdot \Delta_{i-\frac{1}{2}}, \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right), \max \left(\Delta_{i-\frac{1}{2}}, \beta \cdot \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right) \right] & \text{si } \Delta_{i+\frac{1}{2}} \leq 0 \end{cases} \quad (32)$$

siendo:

$$\Delta_{i-\frac{1}{2}} = U_i - U_{i-1} \quad \Delta_{i+\frac{1}{2}} = U_{i+1} - U_i \quad (33)$$

y β una variable que determinará con qué tipo de limitadora se está trabajando. Los resultados presentados en la sección 5 de este trabajo corresponden a $\beta=2$ (limitadora tipo SUPERBEE).

4.3 Método RCM TVD unidimensional

El método “random choice” (RCM), fue introducido por Glimm en 1965. En 1976, Chorin¹ modifica el método original y lo transforma en una herramienta computacional para resolver las ecuaciones de Euler. En fecha más reciente (1999), Toro dedica un capítulo de su libro⁵ al método, donde además del esquema tradicional presenta lo que aparentan ser nuevas formas del RCM. El código computacional del RCM desarrollado y utilizado en este trabajo está basado en la descripción que Toro hace del esquema convencional para resolver las ecuaciones de Euler unidimensionales, no estacionarias. En dicha descripción establece que para la implementación del RCM se requiere (i) la solución exacta de problemas de Riemann locales y (ii) la selección aleatoria de un estado contenido en dichas soluciones locales para ser asignado al próximo nivel de tiempo.

La ventaja principal del RCM es la capacidad que posee para resolver muy exactamente discontinuidades tales como ondas de choque y de contacto entre gases diferentes. Casi la totalidad de los otros métodos difunden las discontinuidades abarcando varias celdas computacionales, originando así un problema que puede llegar a ser serio, particularmente con superficies de contacto. Aunque la resolución de las discontinuidades computadas por el RCM es infinita, la posición de las mismas no es exacta y conlleva un error aleatorio. La aleatoriedad del RCM también se manifiesta cuando se resuelven tramos suaves de flujo, por ejemplo ondas de expansión. Sin embargo, se ha encontrado que con un incremento adecuado del número de celdas la aleatoriedad es aceptable, aún tratándose de sistemas no homogéneos.

4.4 Método Godunov bidimensional

El método originalmente propuesto por Godunov² fue reformado por la incorporación de ideas basadas en la formulación integral de las ecuaciones de Euler que permitieron extender el paso de tiempo al doble bajo la hipótesis que no hay aceleración de características cuando estas se intersectan.

La idea que motivó estos avances es que por ser la solución de los problemas de Riemann función de x/t y no de x y t , en la interfase propiamente dicha, el estado es constante mientras ese punto no sea alcanzado por ondas que viajan desde problemas de Riemann vecinos. Debido a esto, un análisis integral muestra que la variación de U promedio en el interior de una celda puede calcularse en forma analítica a partir de la diferencia de flujos debidos a los estados constantes en sus dos extremos. Lo único que hace falta es resolver los problemas de Riemann en las interfases y buscar cuál es el estado de cero velocidad de propagación.

Finalmente, la evolución temporal de la solución se calcula según la ecuación 32, siendo $F_{i-\frac{1}{2}}$ el flujo teórico del estado de cero velocidad de propagación del problema de Riemann izquierdo y $F_{i+\frac{1}{2}}$ el flujo teórico del estado de cero velocidad de propagación del problema de Riemann derecho.

En dos dimensiones, el método trabaja en forma similar, las diferencias son:

1. la ecuación de balance de flujos debe extenderse a todas las caras que tenga la celda bidimensional
2. para la solución de los problemas de Riemann, se proyectan las velocidades en las direcciones normal y tangencial a cada cara

El incremento de U de la Ec.28 se calcula en este caso según:

$$\Delta U_i = -\frac{\Delta t}{A} \cdot \sum_{j=1}^k \overline{F_{\left(U_{\left(\frac{x}{t}=0 \right)} \right)_j}} \cdot \overline{n}_j \cdot \Delta s_j \quad (34)$$

donde k es el número de caras de la celda, $U_{\left(\frac{x}{t}=0 \right)}$ es el estado de cero velocidad de propagación en la solución del problema de Riemann normal a la cara j , $\overline{F_{\left(U_{\left(\frac{x}{t}=0 \right)} \right)_j}}$ es el vector flujo (dos columnas 4 filas), \overline{n}_j es el versor normal saliente, \bullet indica producto interior y Δs_j es la longitud de la cara.

5 RESULTADOS OBTENIDOS

En la sección 5.1 se presentan los resultados de la comparación de los distintos “solvers” aproximados, mientras que los resultados obtenidos por los programas realizados utilizando los distintos métodos explicados en la sección 4 se presentan en 5.2.

5.1 Resultados de la comparación de los “solver” de Riemann

Dado el rango de variación de los parámetros presentado en la Ec.10, el porcentaje de problemas de Riemann de cada tipo para una muestra realizada sobre 10^6 problemas de Riemann fue: 65.1% de los problemas tuvieron dos ondas de choque, 5.5% de los problemas

contaron con un choque y un abanico de expansión y para un 29.4% de los problemas, las ondas no lineales fueron dos abanicos de expansión.

En todos los casos se fijaron las condiciones a la derecha de la discontinuidad adoptándose los valores:

$$\rho_R = 1 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \quad u_R = 0 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad p_R = 1 \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \quad (35)$$

Los valores de las condiciones a la izquierda de la discontinuidad se calculan a partir de los valores de π_1, π_2, π_3 :

$$u_L = -\pi_1 \cdot \sqrt{\gamma \cdot \frac{p_R}{\rho_R}} \quad p_L = \pi_2 \cdot p_R \quad \rho_L = \pi_3 \cdot \rho_R \quad (36)$$

El análisis de resultados muestra que los casos que más inconvenientes traen a todos los “solvers” aproximados analizados son los formados por dos ondas de choque relativamente fuertes. A continuación se muestra, para el estudio realizado, cuáles fueron los casos peor aproximados por cada uno de los “solvers”:

“solver”	Izquierda			Derecha			Predicción “solver” aproximado	Solución exacta
	ρ	u	P	ρ	u	p		
TRRS	4.9733	11.8082	0.0507	1	0	1	998.7362	81.2775
TSRS	4.9182	11.8582	0.0564	1	0	1	31.8961	81.6784
adaptativo	4.9182	11.8582	0.0564	1	0	1	31.8961	81.6784
propuesto	0.0739	11.8752	0.9274	1	0	1	9.5344	9.6541

Tabla 1. Problemas de Riemann que mayores errores produjeron con cada “solver”.

Se hace notar que el problema de Riemann peor predicho por los “solvers” TSRS y adaptativo es el mismo. Esto se debe a que el esquema de cálculo utilizado por el esquema adaptativo para los casos en que la presión “star” es mayor que las presiones a ambos lados es justamente el TSRS.

Puede verse que el error porcentual en la presión “star” fue de:

TRRS	TSRS	adaptativo	propuesto
1128.80%	60.95%	60.95%	1.24%

En cuanto a los tiempos de cálculo, el empleado por cada uno de los “solver” en porcentaje del empleado por el “solver” exacto fue de:

TRRS	TSRS	adaptativo	propuesto
38.62%	25.93%	31.60%	34.57%

Se calculó el error promedio en presión de cada uno de los “solvers”. El resultado en $\frac{N}{m^2}$ es:

TRRS	TSRS	adaptativo	propuesto
37.3710	7.1504	7.0931	0.0019

Si se agrega la restricción de que la presión p_* exacta de cada caso no supere en más de diez veces el valor de p_L ni de p_R ni la décima parte de la mínima de ellas se evita la formación de choques de gran intensidad (problemas altamente desfavorables para el solver TRRS) y las condiciones cercanas al vacío. Repitiendo el análisis en esas circunstancias, se encuentra que los casos peor aproximados por cada uno de los “solvers” son:

“solver”	Izquierda			Derecha			Predicción “solver” aproximado	Solución exacta
	ρ	u	P	ρ	u	p		
TRRS	2.4112	4.2348	0.9999	1	0	1	12.5554	9.9950
TSRS	0.8759	5.3169	1.0013	1	0	1	6.7847	9.9618
adaptativo	0.8759	5.3169	1.0013	1	0	1	6.7847	9.9618
propuesto	0.0712	11.7759	0.9424	1	0	1	9.2066	9.3234

Tabla 2. Problemas de Riemann que mayores errores produjeron con cada “solver”.

Los errores porcentuales en la presión “star” resultan:

TRRS	TSRS	adaptativo	propuesto
25.62%	31.89%	31.89%	1.25%

Los errores promedio en presión de cada uno de los “solvers” en $\frac{N}{m^2}$ son para este caso:

TRRS	TSRS	adaptativo	propuesto
0.1264	0.2431	0.1957	0.0014

En la sección 6 de este trabajo se extraen algunas conclusiones del análisis realizado.

5.2 Resultados obtenidos con los distintos esquemas numéricos

Para probar los programas y poder compararlos unos con otros, se corrió el mismo caso de prueba con todos ellos. Aún el programa bidimensional fue comparado con el mismo problema modelando en 2D un problema unidimensional.

El caso de prueba es un tubo de choque de dos metros de largo (en el caso del 2D, 6.7cm de alto) lleno con aire a ambos lados de su diafragma. Este último está ubicado en su punto medio. La condición inicial corresponde a ambas cámaras en reposo e igual temperatura, la cámara derecha se encuentra a presión y densidad ambiente ($p = 10^5 \frac{N}{m^2}$, $\rho = 1.225 \frac{Kg}{m^3}$) y la

izquierda a un décimo de dicha presión ($p = 10^4 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$, $\rho = 0.1225 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$). La solución de este problema es conocida. Tiene un choque que viaja a la derecha, una discontinuidad de contacto que viaja también a la derecha y un abanico de expansión que viaja a la izquierda. La presión en la zona star es de 28482Pa, la velocidad $277.6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ y las densidades son $\rho_{*L} = 0.4995 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$ y $\rho_{*R} = 0.2504 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$.

Las mallas utilizadas en todos los casos constan de 200 celdas equiespaciadas en todo el dominio computacional. En el caso de la malla 2D, se utilizó una malla regular de triángulos, disponiéndose 6 celdas en el alto del tubo.

En las Figuras 1 a 4 se encuentran los resultados obtenidos con los programas bidimensional, HLLC, MUSCL y RCM. Se indica la densidad solamente ya que en su gráfica se revela tanto la definición del choque como de la discontinuidad de contacto. En cada una de las figuras se muestran tres resultados uno en trazo azul sin marcadores correspondiente a la solución exacta, otro en trazo rojo con marcadores cuadrados correspondiente al programa utilizando “solver” de Riemann exacto y finalmente otro en trazo negro con marcadores triangulares que muestra los resultados obtenidos por el programa que utiliza el “solver” de Riemann propuesto en este trabajo. En el caso del programa bidimensional, lo que se grafica son los valores de la línea de celdas ubicadas inmediatamente encima de la línea media del tubo.

Como puede verse en las figuras, los resultados obtenidos con el “solver” exacto y con el propuesto son prácticamente idénticos excepto en el caso del RCM. De los valores numéricos utilizados para generar las Figuras 1 a 4 se concluye que la diferencia máxima no alcanza el uno por ciento. En el caso del RCM, las diferencias no se asocian al “solver” de Riemann sino a la aleatoriedad propia del método. Ni siquiera dos corridas del mismo programa dan los mismos resultados.

En cuanto a los tiempos de cálculo, en todos los casos, el programa con “solver” aproximado fue más rápido que su contraparte con “solver” exacto. Para poder comparar en qué formulación influyó más o menos la incorporación del “solver” aproximado, el tiempo empleado por cada programa con “solver” exacto fue adimensionalizado con respecto al empleado por el programa de misma formulación y “solver” aproximado. Los resultados son:

GODUNOV 2D	HLLC	MUSCL	RCM
41.8%	20.0%	50.2%	22.1%

por lo tanto, con el “solver” propuesto, el costo computacional se reduce entre un 20 y un 50 por ciento.

6 CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

En el análisis comparativo entre este y otros “solvers” de Riemann presentado en la Sección 5.1 se puede ver que el error medio del “solver” propuesto resulta ser 3680 veces menor que el del mejor “solver” comparado, mientras que el error porcentual en el caso de mayor error absoluto del “solver” propuesto es casi 50 veces menor. Por otro lado, el costo computacional fue mayor que el de los “solvers” TSRS y adaptativo en un 33.3% y 9.4% respectivamente. Sin embargo, el “solver” presentado posee una elevada relación beneficio costo.

En cuanto al “solver” TRRS, cabe señalar que el elevado grado de incerteza que mostró, se debe en gran medida al rango de problemas de Riemann muestreados (mayormente problemas con dos choques), dado que los problemas para los que este “solver” es eficiente son aquellos en que la presión en la zona “star” es baja. Cabe señalar también que en el caso de dos abanicos de expansión, el “solver” TRRS no presenta ninguna ventaja sobre un “solver” exacto ya que en este tipo de problemas, ambos realizan las mismas operaciones.

El “solver” propuesto, ha mostrado ser eficiente pero requiere generar un arreglo tridimensional donde se almacenan los valores de $\frac{p_*}{p_{ref}}$ para distintos π_1, π_2, π_3 . Por ejemplo, un arreglo de 100x100x100 como el utilizado en la Sección 3 requiere resolver 10^6 problemas de Riemann con “solver” exacto. Este arreglo tridimensional se calcula una sola vez al comenzar la integración y pese a no parecer una operación muy económica, necesita alrededor de 5 segundos con un procesador PENTIUM IV de 2.60Ghz.

En cuanto a los resultados numéricos presentados, no se encuentran razones para no utilizar este método en reemplazo de un “solver” exacto ya que no se han encontrado casos en los que se llegue a ver una diferencia en el desempeño y sin embargo presenta notables ventajas desde el punto de vista del costo computacional

Respecto a la implementación del método propuesto, dado que en un problema de dinámica de gases general, sólo un pequeño porcentaje de los problemas de Riemann que se resuelven presentan discontinuidades importantes (sólo aquellas interfaces que definen choques o discontinuidades de contacto), resulta interesante la idea de tener un arreglo tridimensional muy denso en las cercanías de la discontinuidad nula ($\pi_1 = 0, \pi_2 = 1, \pi_3 = 1$) y tal vez menos denso lejos de esta condición. Incluso, puede usarse un rango de variación de los parámetros adimensionales relativamente pequeño y los pocos casos que caen fuera de estos rangos, resolverlos con un “solver” exacto.

En la utilización de este “solver”, la operación computacionalmente más costosa es la evaluación de la raíz cuadrada para la determinación de π_1 . Actualmente se está trabajando sobre la idea de definir de otro modo el parámetro π_1 con el objeto de disminuir los tiempos de cálculo.

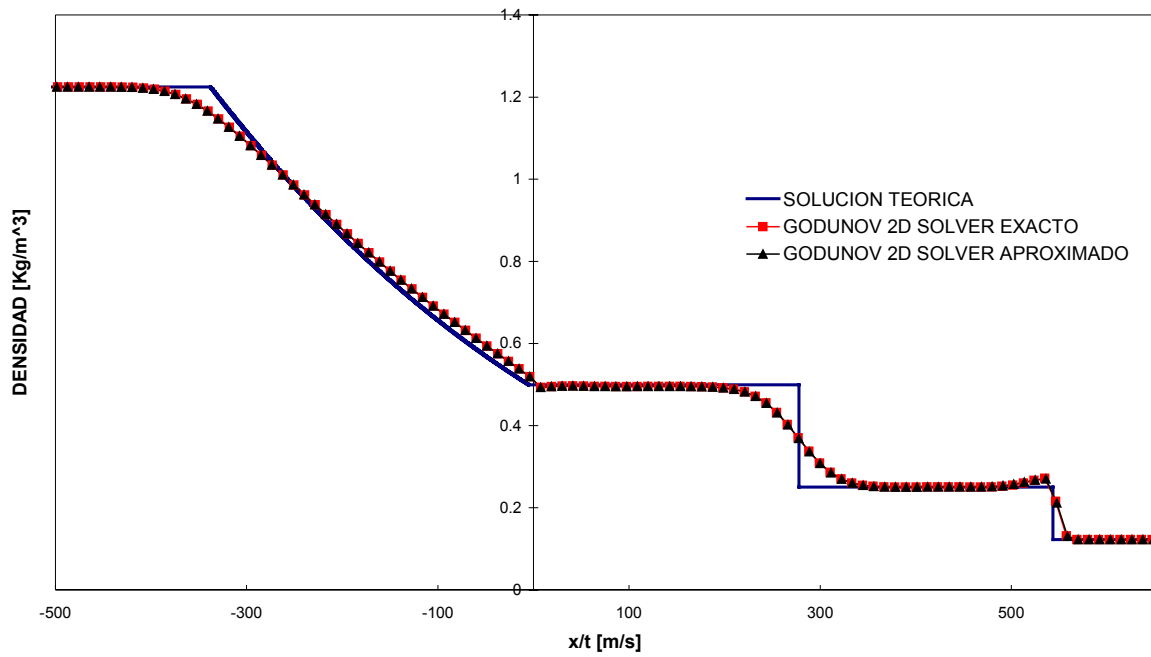


Figura 1. Resultados obtenidos con esquema de Godunov bidimensional.

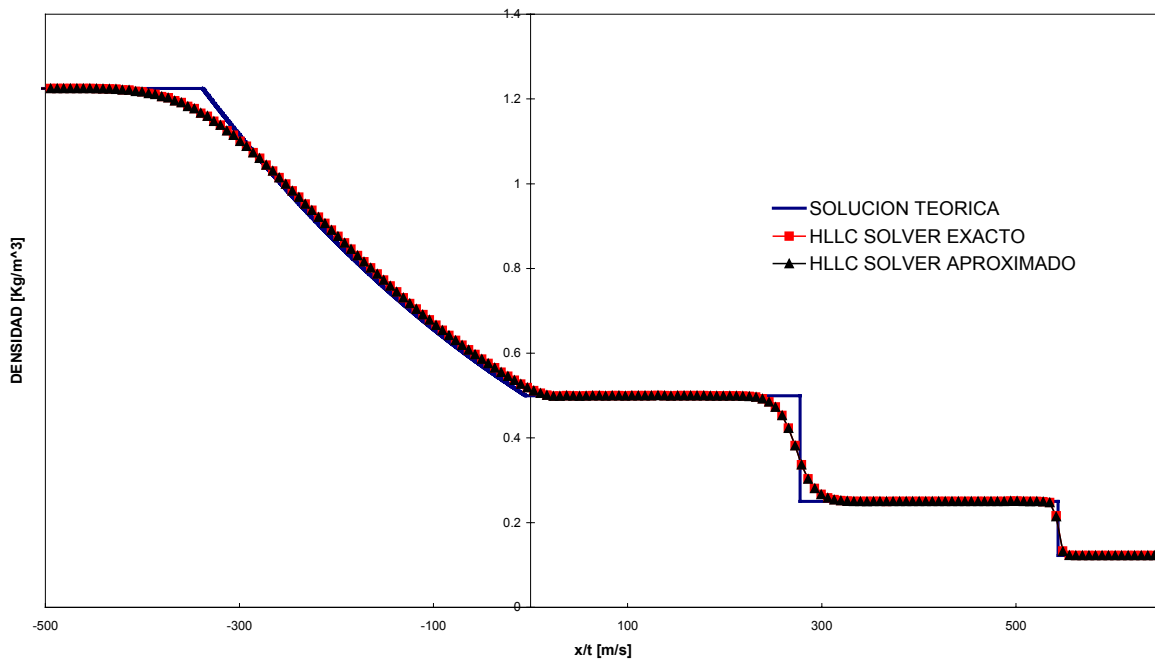


Figura 2. Resultados obtenidos con esquema HLLC unidimensional.

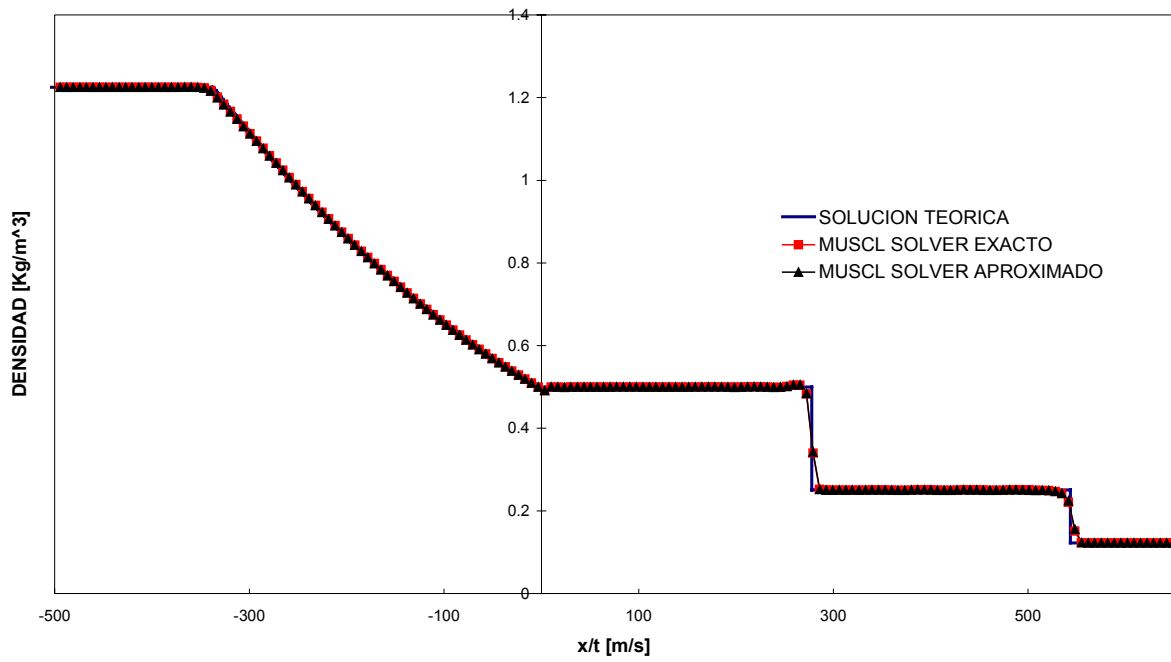


Figura 3. Resultados obtenidos con esquema MUSCL unidimensional.

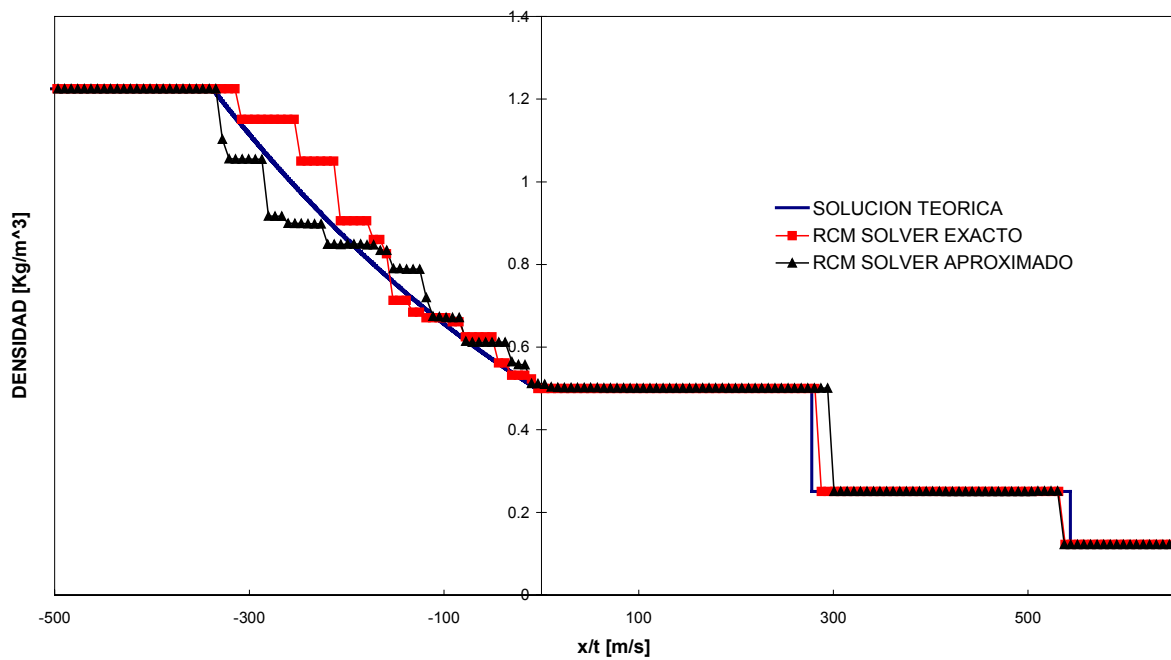


Figura 4. Resultados obtenidos con esquema RCM unidimensional.

7 REFERENCIAS

- [1] A.J. Chorin, “Random Choice Solutions of Hyperbolic Systems”, *J. Comput. Phys.*, **22**, 517-272 (1977).
- [2] S.K. Godunov, “A Finite Difference Method for the computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics”, *Mat. Sb.*, **47**, 357-393 (1959).
- [3] B. van Leer, “On the Relation Between the Upwind-Differencing Schemes of Godunov, Engquist-Osher and Roe”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 5(1):1-20, 1985.
- [4] R. J. Leveque, *Numerical Methods for Conservation Law*, Birkhäuser Verlag (1992).
- [5] E. F. Toro, *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Springer-Verlag (1999).
- [6] E.F. Toro, M. Spruse, and W. Speares, “Restoration of the Contact Surface in the HLL-Riemann solver”, *Shock Waves*, **4**, 25-34 (1994).