

Corrección termodinámica de la difusión numérica del método WCSPH

Thermodynamic correction of numerical diffusion in WCSPH method

López Gómez, D.^{a1}, Cuellar Moro, V.^b y Rubén Díaz Martínez^{a2}

^aCEDEX, Pº Bajo de Virgen del Puerto nº3, 28005-Madrid (España). E-mail: ^{a1} david.lopez@cedex.es, ^{a2} ruben.diaz@cedex.es

^bWaveCrafters, C/ Altamirano, 42. 28008-Madrid (España). E-mail: ^b Vicente.cuellar.moro@gmail.es

Recibido: 25/06/2014

Aceptado: 23/11/2014

Publicado: 28/1/2015

RESUMEN

El método SPH se ha empleado con éxito para la simulación numérica de flujos hidrodinámicos. CEDEX ha desarrollado un modelo SPH propio, SPHERIMENTAL, para flujo cuasi-compresible y con el que se han realizado diversos estudios de calibración. En transitorios en régimen variable se ha observado que se produce una difusión numérica que aumenta la entropía del sistema y que amortigua el movimiento del fluido. Se ha empleado como caso de calibración un experimento de rotura de presa muy bien documentado con el que se ha podido comprobar este efecto. Para obtener una correcta simulación numérica es necesario cuidar las condiciones de contorno, la correcta discretización espacial del fluido y emplear un modelo de turbulencia adecuado. Sin embargo, aun cuidando estos aspectos se produce una excesiva disipación de energía en la propagación de ondas. En este artículo se analizan las causas de esta difusión y se propone un método para corregirla.

Palabras clave | SPH; Dam Break; Difusión Numérica; Turbulencia.

ABSTRACT

The SPH method has been used successfully for the numerical simulation of hydrodynamic flows. CEDEX has developed its own SPH model, SPHERIMENTAL for quasi-compressible flow, with which several studies of calibration have been performed. Problems of numerical diffusion have been observed in simulations of variable transient regime, which increase the entropy of the system and damp the movement of the fluid. It has been used a dambreak test case (Lobovsky, 2013) in which this effect has been noted. It is necessary to take care of the boundary conditions, the correct spatial discretization of the fluid and to use a suitable turbulence model to obtain an accurate numerical simulation, but even so, excessive energy dissipation occurs. The causes of this problem have been analyzed in this paper, and a correction is proposed.

Key words | Sph; Dam Break; Numerical Diffusion; Turbulence.

INTRODUCCIÓN

El método SPH (Smoothed Particles Hydrodynamic) se ha empleado con éxito en la simulación numérica de flujos hidrodinámicos de estructuras hidráulicas. CEDEX ha desarrollado un software propio, SPHERIMENTAL, que resuelve las ecuaciones de Navier Stokes para flujo cuasi compresible, lo que obliga a emplear una ecuación de estado suficientemente rígida, que con velocidades del sonido suficientemente altas reproducen correctamente un flujo incompresible. Ese modelo tridimensional es la versión FORTRAN CUDA del modelo MDST (Grassa, 2004), también de desarrollo propio. Con este modelo se han realizado diversos trabajos de calibración, proporcionando muy buenos resultados (Grassa, 2007; López, 2010). Este software se emplea como herramienta complementaria a los trabajos de experimentación en modelación física, en los trabajos de asistencia técnica experimental (López, 2009; López 2013).

El método SPH es adecuado para el estudio de detalle de interacción de flujo con estructuras, impacto de chorros, trampolines de lanzamiento (Grassa, 2006; Gatti, 2007; Lee, 2010). Caracteriza correctamente el flujo y permite analizar la fuerza del impacto, campos de velocidad y de presión. Sin embargo, en simulaciones de régimen variable, se aprecia un amortiguamiento del movimiento. Las simulaciones resultan demasiado difusivas, reduciendo la energía cinética del flujo a cambio de aumentar la entropía del sistema.

Lobovsky (2013) presenta un caso de prueba basado en una rotura de presa, que es muy adecuado para analizar este fenómeno, pues tras la apertura de compuerta se produce un oscilación longitudinal de la masa fluida dentro del recinto. El caso consiste en un depósito rectangular de 1.60 m de largo por 0.60 m de alto y 0.15 m de ancho, dentro del cual se aloja una compuerta que divide el depósito en dos cámaras reservando 0.60 m para situar inicialmente el agua. Se han realizado dos experimentos con diferente altura de carga de agua de 0.30 m y 0.60 m de altura de carga. Lobovsky (2013) describe los experimentos con gran detalle. En adelante la referencia a estos experimentos se realizará mediante las siglas H30 y H60.

EL MÉTODO WCSPH

SPH es un método numérico Lagrangiano que permite resolver las ecuaciones de Navier Stokes, para el estudio de flujos hidrodinámicos en lámina libre. Para ello es necesario discretizar el dominio de estudio en partículas de fluido. Este método permite obtener el valor de una variable de campo en una partícula "a" por interpolación, mediante una función de denominada kernel, que cumple una serie de requisitos matemáticos (Monaghan, 2005) y que pondera el valor de la variable de estudio en las partículas de fluido del entorno "b", entendiéndose como tales a aquellas que quedan dentro del radio de suavizado de la función de interpolación con centro en la partícula "a".

Las ecuaciones (1) y (2) muestran la expresión de tales ecuaciones en forma discreta para fluidos cuasi-compresibles (WCSPH):

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b \mathbf{v}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = - \sum_b m_b \left(\frac{p_a}{\rho_a^2} + \frac{p_b}{\rho_b^2} + \Pi_{ab} \right) \nabla_a W_{ab} \quad (2)$$

En estas expresiones, se denomina con el subíndice *a* a la partícula objetivo, sobre la que se calcula el valor de una propiedad de campo y con el subíndice *b* a las partículas que quedan dentro del entorno de interpolación de la partícula *a*. *v* denota velocidad, *p*, presión y ρ , densidad. W_{ab} es el valor de la función de interpolación y $\nabla_a W_{ab}$ el de su derivada. El término Π_{ab} de la ecuación de la aceleración (2) representa a la disipación viscosa. Se suele representar en la forma siguiente (Monaghan, 1994):

$$\Pi_{ab} = \begin{cases} \frac{-\alpha \bar{c}_{ab} \mu_{ab} + \beta \mu_{ab}^2}{\bar{\rho}_{ab}}; & \mathbf{v}_{ab} \cdot \mathbf{r}_{ab} < 0 \\ 0; & \mathbf{v}_{ab} \cdot \mathbf{r}_{ab} > 0 \end{cases} \quad (3)$$

Siendo c la velocidad del sonido y el parámetro μ_{ab} tiene el valor:

$$\mu_{ab} = \frac{h\nu_{ab} \cdot r_{ab}}{r_{ab}^2 + \eta^2} \quad (4)$$

El valor de η no se define en la referencia citada. Su objeto es evitar singularidades cuando $r_{ab} \approx 0$. Se suele adoptar un valor de $\eta^2 \approx 0.01h^2$ (Monaghan, 1992).

El término \prod_{ab} se anula cuando las partículas del par a,b se alejan, y ejerce una aceleración opuesta al gradiente de presiones entre partículas que se aproximan, es decir, disipa energía cinética.

Los parámetros α y β son adimensionales y en astrofísica suelen adoptar valores de $\alpha = 1$ y $\beta = 2$. En flujos de superficie libre, se emplea un valor $\alpha = 0.01$ y $\beta = 0$ (Monaghan, 2005). El término cuadrático en la expresión (3) se ha empleado en astrofísica para tratar choques entre flujos de gases.

López (2010) propone un método para mejorar la representatividad de la disipación viscosa en flujos altamente turbulentos, como el resalto hidráulico. En este modelo se propone hacer variable el coeficiente α de la ecuación (3) en función de la vorticidad de las partículas, estableciendo un coeficiente α_{vor} .

La ecuación de estado empleada es la propuesta por Monaghan (1994)

$$p_a = \frac{\rho_0 c_s^2}{\gamma} \left(\left(\frac{\rho_a}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right) \quad (5)$$

Donde c_s es la velocidad del sonido en el medio y ρ_0 una densidad de referencia; se toma habitualmente $\gamma = 7$ lo que da lugar a una dependencia muy rígida de la presión con la densidad.

La ventaja de emplear un método cuasi compresible es que permite plantear un esquema numérico explícito, mucho más eficiente desde un punto de vista computacional sin que esto afecte a la calidad de los resultados (Hughes, 2010)

Para reproducir los contornos se han empleado partículas fijas con fuerzas repulsivas de Lennard-Jones.

$$f_a(\mathbf{r}_{ab}) = do \left(\left(\frac{r_0}{r_{ab}} \right)^{p_1} - \left(\frac{r_0}{r_{ab}} \right)^{p_2} \right) \frac{\mathbf{r}_{ab}}{r_{ab}^2} \quad (6)$$

Donde f es la fuerza repulsiva que ejercen las partículas de contorno sobre las partículas de fluido que se aproximan, do es una cte. elástica, r_{ab} la distancia relativa entre partículas de fluido y contorno, y p_1, p_2 , son los exponentes, que habitualmente pueden tomar valores de 4 y 2, aunque existen en la literatura técnica otras combinaciones de valores.

EL MODELO SPHERIMENTAL

SPHERIMENTAL es un software de desarrollo propio (López, 2013). Se trata de un código FORTRAN-CUDA, desarrollado para computación paralela en tarjetas gráficas. La arquitectura de las tarjetas gráficas permite realizar operaciones con múltiples hilos de ejecución, lo que resulta de gran utilidad en el campo de la supercomputación. El método SPH tiene un gran coste computacional por lo que esta vía permite abordar problemas de gran tamaño ($O. 10^6$ partículas) con tiempos de cálculo menores que los que se pueden alcanzar en un cluster de CPU. Además los costes de inversión y consumo de energía son mucho menores.

El método de búsqueda de pares de interacción emplea una malla cartesiana tridimensional auxiliar que cubre todo el dominio. El método asigna un código “hash” a todas las partículas de una misma celda. La comprobación de distancia de interacción se realiza únicamente entre las partículas ubicadas en celdas colindantes. Para optimizar el rendimiento y conseguir coalescencia en el acceso a memoria se reordenan todas las partículas de acuerdo con un criterio espacial, por la celda en la que se ubican y su orden dentro de la celda. SPHERIMENTAL incorpora un sistema basado en operaciones con atomics, que resulta más eficiente que un método basado en ordenación con RADIX-SORT (Crespo, 2011). La Tabla 1 muestra una comparativa realizada con ambos métodos de ordenación espacial y con diferente número de partículas. La comparación se ha obtenido con dos arquitecturas de diferentes de tarjeta gráfica Nvidia. Con arquitectura Kepler (640M) se consigue una aceleración de 3.4 y de 5.0 veces con la arquitectura Maxwell (860 M).

Tabla 1 | Comparación de la aceleración en tiempo de computación para la ordenación espacial de partículas. Atomics vs. RADIX SORT.

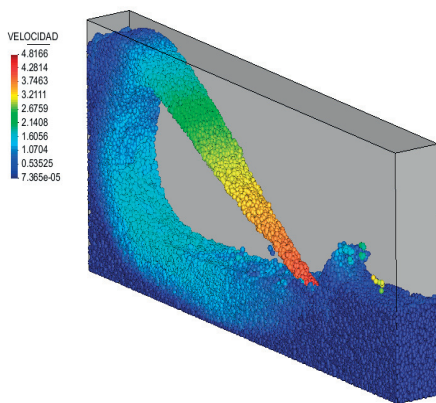
Número de partículas	4096	32768	262144	884736	2097152
Aceleración arquitectura Maxwell	5.2	4.9	4.96	5.05	5.1
Aceleración arquitectura Kepler	3.2	3.4	3.5	3.3	3.6

Para optimizar el uso de memoria no se emplean estructuras para almacenar los pares de interacción. El cálculo de las derivadas se realiza de forma simultánea al de la búsqueda de pares de interacción lo que permite no almacenar esta información. Esto permite computar $3.8 \cdot 10^6$ partículas por cada Gb de memoria RAM de la tarjeta gráfica.

Las fuerzas de contorno introducen ciertas inestabilidades en el campo de densidades, por lo que se ha implementado un filtro estadístico de densidad, que acota las densidades extremas en cada paso de tiempo a dos veces la desviación típica respecto a la media de todas las partículas del sistema.

El método de integración empleado es Runge-Kutta de 3^{er} orden tipo TDV. Se ha implementado la corrección XSPH (Monaghan, 1994).

Se emplea un paso de tiempo variable que se limita mediante un doble criterio, uno basado en la velocidad del sonido (7) y el otro en la aceleración (8). La velocidad del sonido se modifica en cada paso de tiempo adoptándose como tal 10 veces el máximo valor de la velocidad de todas las partículas del sistema. En función del caso se limita el valor mínimo de la velocidad del sonido, que solo condiciona el paso de tiempo cuando el movimiento es muy poco energético. El paso de tiempo de integración se obtiene de acuerdo con la expresión (9)



$$dt_{cv} = \frac{h}{c_s + 0.6\alpha c_s} \quad (7)$$

$$dt_f = \min \sqrt{\frac{h}{|dv_i|}} \quad (8)$$

$$dt = \min(1.5 dt_{cv}, 0.3 dt_f) \quad (9)$$

Figura 1 | Vista 3D de un test de rotura de presa.

SIMULACIONES NUMÉRICAS CON EL MÉTODO TRADICIONAL WCSPH

Se han realizado simulaciones numéricas tridimensionales de los dos experimentos de rotura de presa, H30 y H60, pues aunque los experimentos tienen una clara componente bidimensional xz , se ha querido contemplar en el estudio los efectos tridimensionales de la turbulencia para darle una mayor generalidad. Se han empleado cuatro tamaños de partículas de 0.020 m, 0.015 m, 0.010 m, y 0.005 m, para analizar el efecto de escala. El tiempo de simulación empleado es de 10 s, suficiente para analizar los problemas de difusión. Durante la fase previa de los ensayos se han analizado los coeficientes de la condición de contorno para minimizar sus efectos sobre el flujo. Se ha empleado un coeficiente elástico muy bajo, $d_0=5$, y el radio de acción de cada ensayo se fijado en una décima de milímetro por debajo del tamaño de la partícula. La Tabla 2 proporciona información de las simulaciones realizadas. Las velocidades del sonido mínimas empleadas fueron de 7m/s en H30 y 10 m/s H60. Las figuras 2 y 3 muestran la evolución temporal de ambos ensayos y los compara con la simulación realizada con partículas de 5 mm y 20 mm.

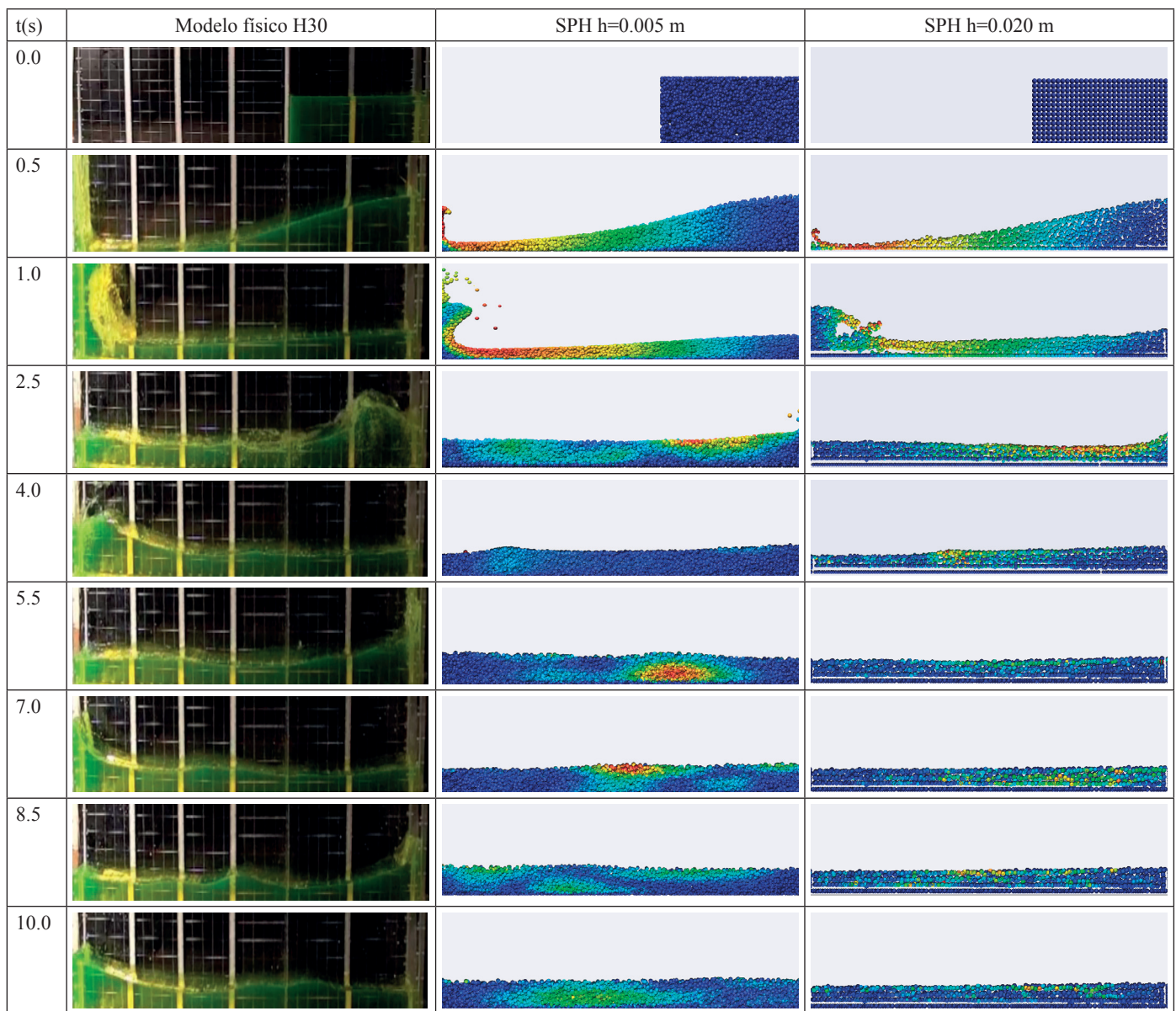


Figura 2 | Comparación modelo físico H30 y simulación numérica SPH básica con partículas de 0.005 m y 0.010 m.

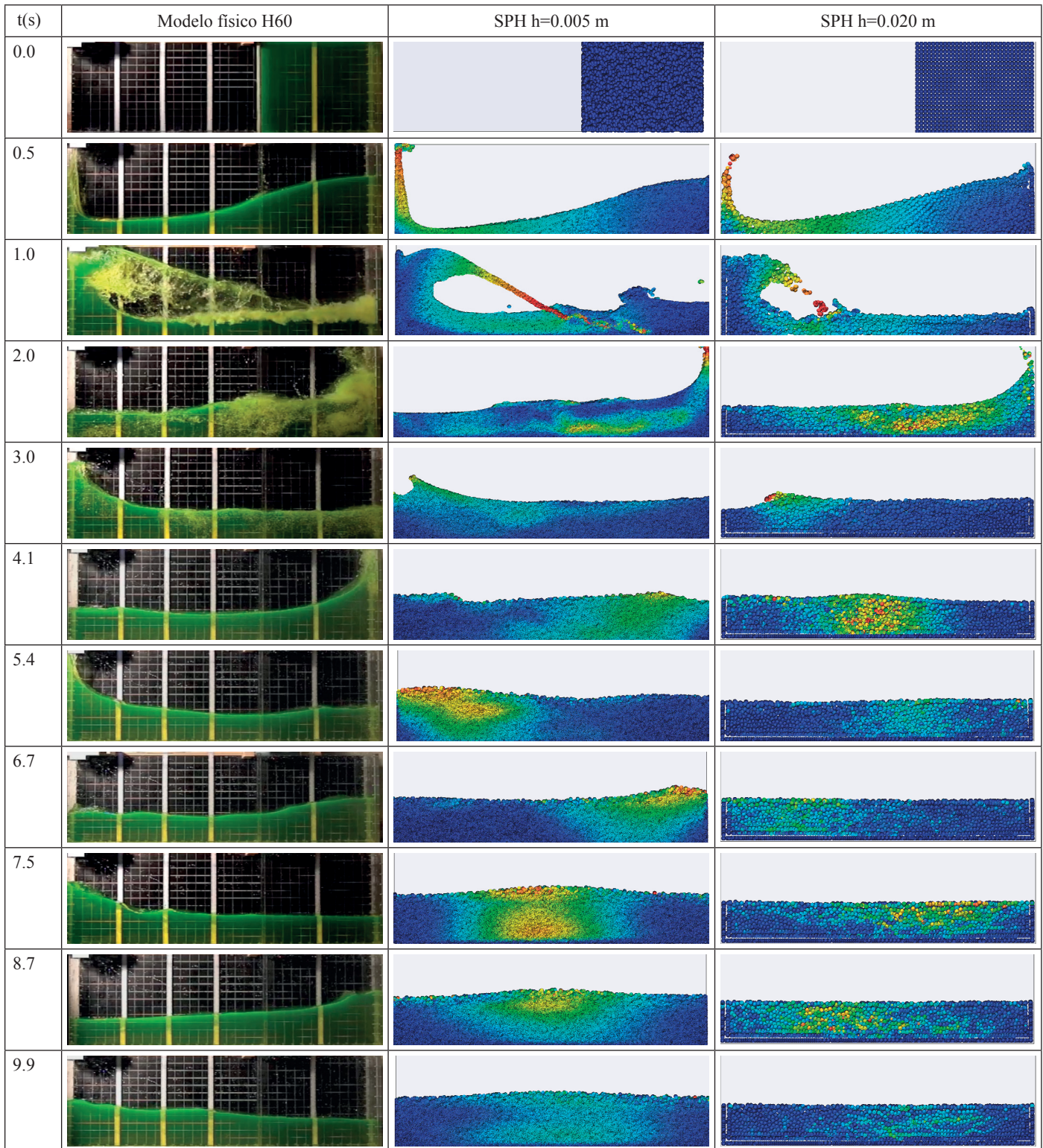


Figura 3 | Comparación modelo físico H60 y simulación numérica SPH básica con partículas de fluido de 0.005 m y 0.020 m.

Tabla 2 | Características de las simulaciones numéricas SPH.

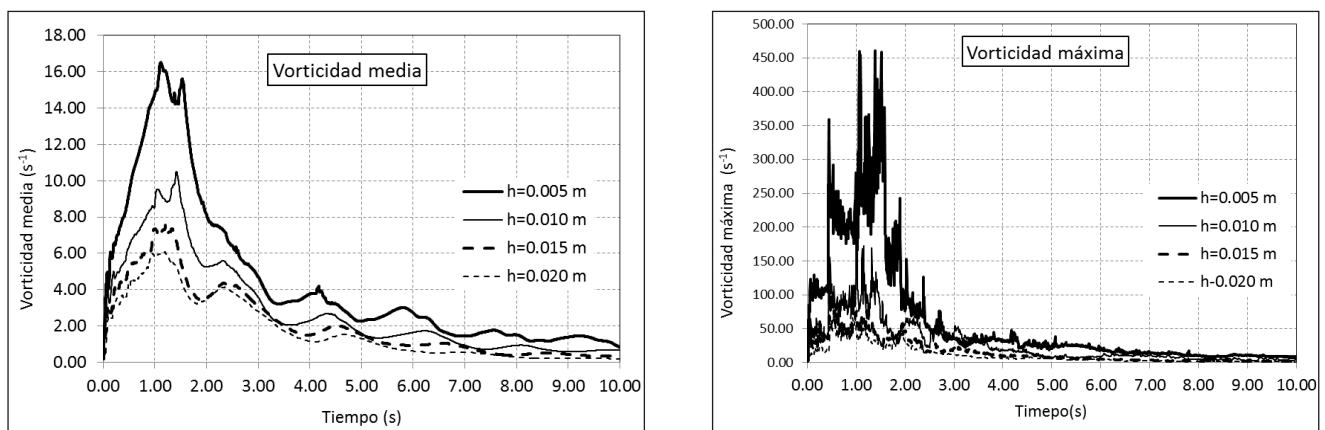
	H30				H60			
	0.02	0.015	0.01	0.005	0.02	0.015	0.01	0.005
Tamaño de part. h(m)	0.02	0.015	0.01	0.005	0.02	0.015	0.01	0.005
N. partículas de fluido	3150	7200	25200	208800	6090	14040	50400	417600
Volumen de fluido (m ³)	0.0252	0.0243	0.0252	0.0261	0.04872	0.047385	0.0504	0.0522
N. partículas contorno	39802	43047	159202	524802	25802	45802	104602	415602
Tiempo de cálculo (s)	70.9	108.2	298.6	4456.8	118.9	195.4	756.0	13637.9
Núm. interacciones	3.48 10 ⁷	7.56 10 ⁷	1.79 10 ⁸	2.36 10 ⁸	6.62 10 ⁷	1.35 10 ⁸	1.82 10 ⁸	9.52 10 ⁷

Durante los primeros instantes de las simulaciones numéricas el frente de onda está acompasado con el ensayo en modelo físico, sin embargo según avanza el tiempo el movimiento se va amortiguando en las simulaciones numéricas, haciéndose más evidentes las diferencias a partir del instante 2.5 s en el test H30 y a partir del segundo 3 en el ensayo H60. Estas diferencias se pueden atribuir a difusión numérica. Los problemas de difusión se reducen mejorando la discretización espacial y temporal y de resolución del problema, sin embargo, se ha comprobado que la reducción del tamaño de las partículas aunque permite reproducir mejor el impacto del agua con los contornos, no mejora la amortiguación prematura del movimiento. Es evidente que la condición de contorno juega un papel importante en la disipación de energía. En estas simulaciones se ha empleado coeficientes en las fuerzas repulsivas de Lennard Jones, para minimizar los efectos disipativos en el contorno. Sin embargo no se ha podido cuantificar su influencia.

MODELO DE TURBULENCIA α_{vor}

La modelización incorrecta de la turbulencia puede explicar parte de los problemas de difusión (Violeau, 2007). El modelo de viscosidad artificial de Monaghan con coeficiente de viscosidad constante $\alpha=0.01$, resulta demasiado disipativo. López (2010) propone un modelo de turbulencia basado en la vorticidad, denominado α_{vor} , que disipa más energía en las zonas más turbulentas caracterizadas por la vorticidad y menos en las zonas de baja vorticidad.

Se ha obtenido en cada uno de los ensayos la evolución temporal del valor medio y máximo de la vorticidad de todas las partículas. La Figura 4 muestra la comparación con los diferentes tamaños de partículas para los experimentos H30. El campo de vorticidad obtenido depende del tamaño de las partículas. El resultado es análogo en los ensayos del H60.

**Figura 4** | Influencia de la discretización espacial en el campo de vorticidades. Experimento H30.

Si se multiplican los valores de vorticidad anteriores por el tamaño de partícula se obtiene la Figura 5, donde se comprueba que los cuatro ensayos proporcionan valores similares, en especial en la comparación de los valores máximos.

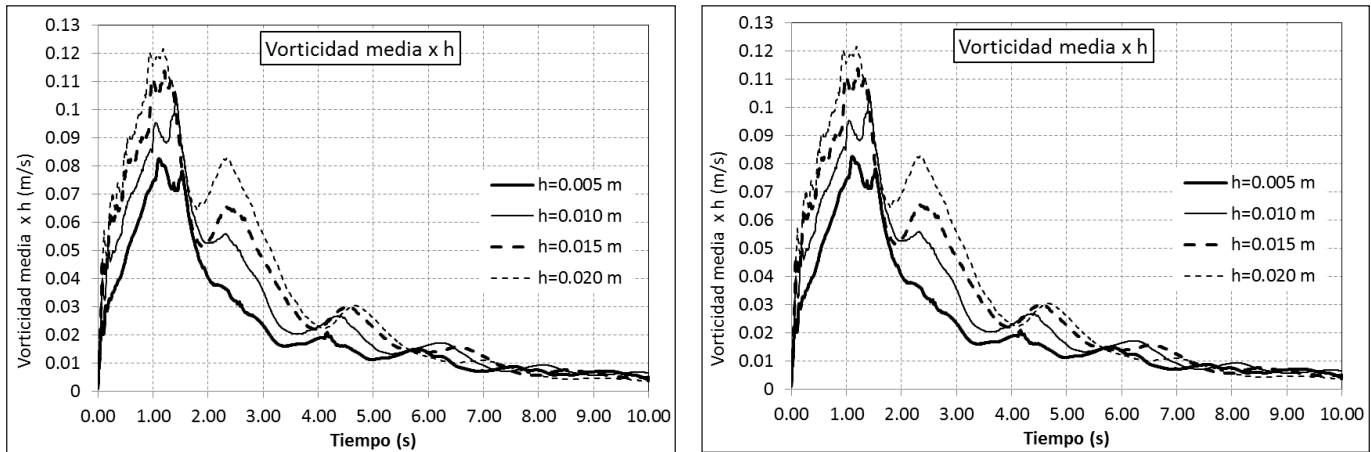


Figura 5 | Evolución del campo de vorticidad $\times h$. Experimento H30.

Teniendo en cuenta esta relación se ha reformulado el modelo de turbulencia α_{vor} haciéndolo depender del producto de la vorticidad por el tamaño de partícula. El modelo hace depender el coeficiente α de cada partícula linealmente con la vorticidad entre dos umbrales, que se establecen en función del tamaño de partícula mediante las expresiones (10) y (11):

$$Vort_{\min} = 0.02 h^{-1.7} \quad (10)$$

$$Vort_{\max} = 0.03 h^{-1.7} \quad (11)$$

Por debajo del valor inferior $Vort_{\min}$ α toma el valor 0.001.

$$\text{Si } (Vorticidad(i) < Vort_{\min}) \Rightarrow \alpha_i = 0.001 \quad (12)$$

Superado este umbral el coeficiente α de la partículas se obtendrá mediante la expresión (13).

$$\text{Si } (Vort_{\max} > Vorticidad(i) > Vort_{\min}) \Rightarrow \alpha_i = 3h(Vorticidad(i) - Vort_{\min}) \quad (13)$$

Cuando la vorticidad de la partícula supera un umbral superior, toma un valor igual a:

$$\text{Si } (Vorticidad(i) > Vort_{\max}) \Rightarrow \alpha_i = hVort_{\max} \quad (14)$$

En el experimento de rotura de presa es en el primer impacto donde se producen los procesos de disipación viscosa de mayor relevancia, como se desprende de los valores de vorticidad de la Figura 4. Por este motivo, tanto los valores de los umbrales como el de los valores de α se han calibrado analizando la rotura de la ola tras el primer el impacto con la pared opuesta. La Figura 6 compara el instante 1.2 s del experimento físico H30 (6.a), con la simulación SPH empleando $\alpha=0.01$ (6.b), y empleando α_{vor} (6.c).

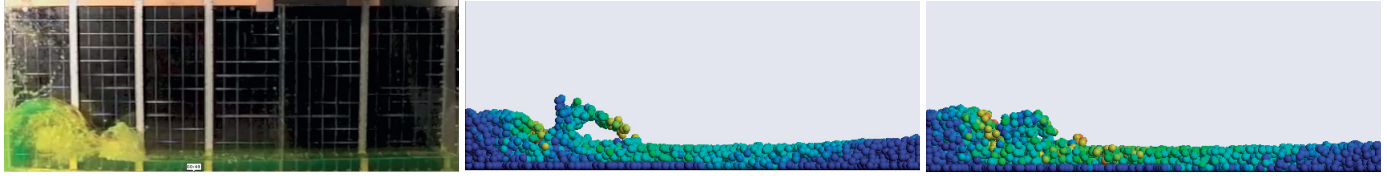


Figura 6.a Experimento físico

Figura 6.b SPH $\alpha=0.01$ Figura 6.c SPH α_{vor} **Figura 6** | Comparación del Experimento H30, en el instante $t=1.2$ s.

El empleo del modelo turbulencia α_{vor} mejora la representatividad a en este impacto, pero esto tiene poca influencia en la amortiguación prematura del movimiento.

CORRECCIÓN TERMODINÁMICA DEL MÉTODO WCSPH

De acuerdo con la primera ley de la termodinámica, para un fluido compresible se cumple la siguiente relación de conservación de la energía:

$$TdS = du + PdV \quad (15)$$

Donde T es la temperatura, S la entropía, du la variación de la energía interna, P es presión y dV es el cambio de volumen, expresado en cantidades por unidad de masa.

En un sistema sin aportación de calor externo, se debe cumplir que el trabajo realizado al comprimirse el fluido se transforma en energía interna.

$$du = -PdV = -\frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{P}{\rho^2} \text{div}\vec{v} \quad (16)$$

El método SPH para fluidos cuasi-compresibles asume que el trabajo realizado por el fluido al comprimirse es despreciable, lo cual puede ser asumible en algunos casos. De hecho, los primeros instantes de las simulaciones del experimento son representativos, pero a medida que pasa el tiempo se aprecia una excesiva amortiguación del movimiento.

Es posible calcular la evolución de la energía total del sistema, entendiendo como tal la suma de la energía cinética y potencial de todas las partículas de fluido, y obtener la evolución temporal que se presenta en la Figura 9.

Teniendo en cuenta las ecuaciones (1) y (16) es fácil obtener la expresión (17) de la derivada de la energía interna del sistema debido al trabajo realizado por el fluido al comprimirse, Monaghan (2005).

$$\frac{du_a}{dt} = \frac{P_a}{\rho_a^2} \sum_b m_b \mathbf{v}_{ab} \cdot \nabla_a W_{ab} \quad (17)$$

La corrección propuesta consiste en realimentar el flujo devolviendo en forma de energía cinética la energía interna por el trabajo realizado al comprimirse el fluido, de acuerdo con la expresión de la ecuación (18).

$$\Delta v = C_{ucorr} \sqrt{\frac{du}{dt} \frac{dt}{\rho}} \quad (18)$$

En esta expresión se incluye un coeficiente corrector que permite ajustar la cantidad de energía cinética que realimenta el flujo para eliminar los efectos difusivos, que es mayor cuanto mayor sea el tamaño de partícula.

SIMULACIONES NUMÉRICAS CON LA CORRECCIÓN

Se han realizado múltiples simulaciones reproduciendo ambos experimentos físicos H30 y H60, hasta obtener el coeficiente que permite corregir la difusión. Las figuras 7 y 8 comparan los resultados obtenidos en la simulación SPH con la Corrección U_{corr} con partículas de 0.005 m y 0.020 m.

La Tabla 3 contiene información característica de los ensayos. Indica el tiempo de simulación, el número de interacciones por segundo y el coeficiente de corrección necesario para el ajuste.

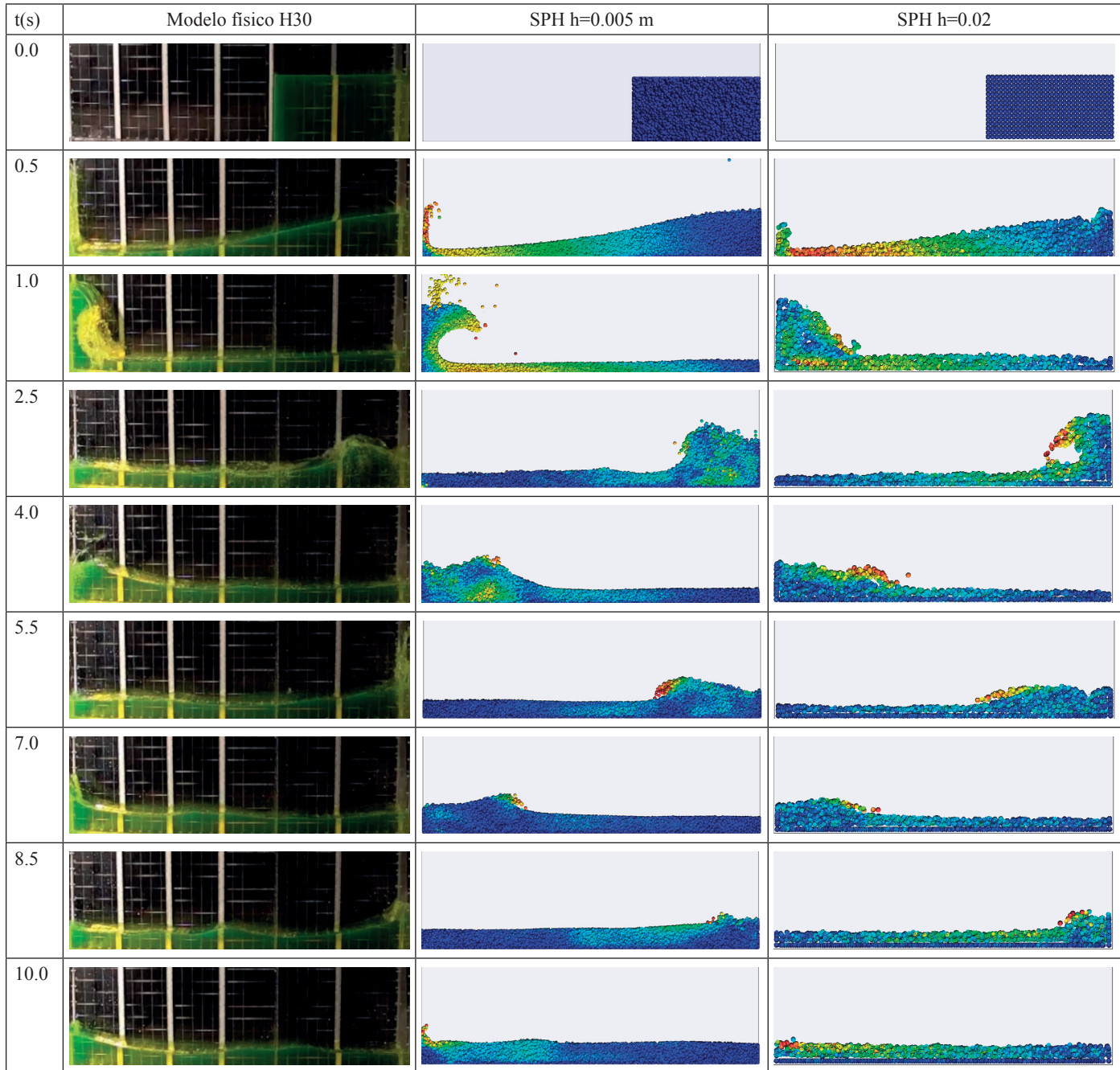


Figura 7 | Comparación modelo físico H30 y simulación numérica SPH con la Corrección U_{corr} y partículas de 0.005 y 0.020 m.

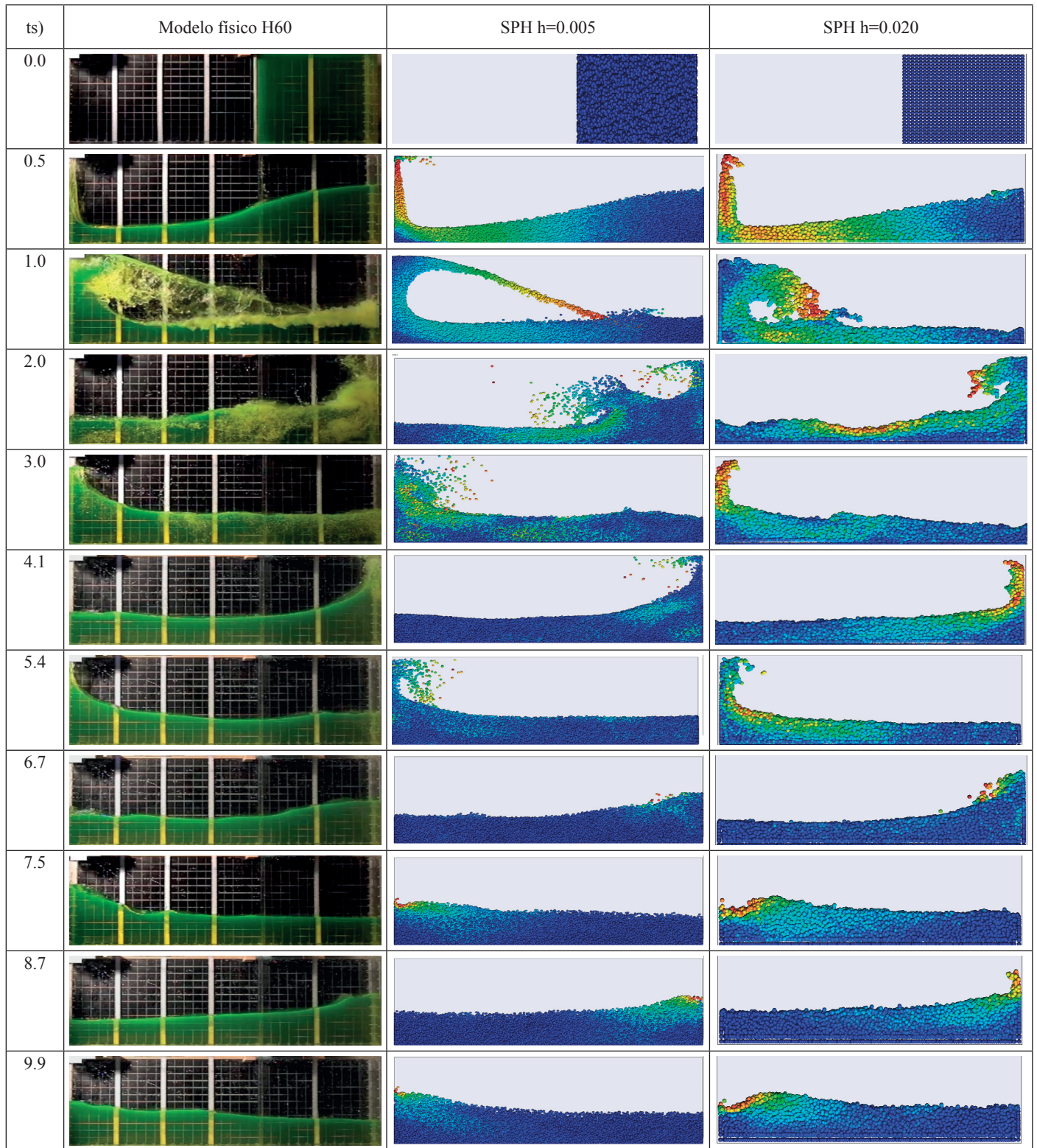


Figura 8 | Comparación modelo físico H60 y simulación numérica SPH con la Corrección U_{corr} y partículas de 0.005 m y 0.020 m.

Tabla 3 | Características de las simulaciones numéricas SPH con la corrección.

	H30				H60			
	0.02	0.015	0.01	0.005	0.02	0.015	0.01	0.005
Tamaño de part. h(m)	0.02	0.015	0.01	0.005	0.02	0.015	0.01	0.005
N. Partículas de fluido	3150	7200	25200	208800	6090	14040	50400	417600
Volumen de fluido (m ³)	0.0252	0.0243	0.0252	0.0261	0.04872	0.047385	0.0504	0.0522
N. Partículas contorno	39802	43047	159202	524802	25802	45802	104602	415602
Tiempo de cálculo (s)	159.9	260.1	738.9	23756.8	244.9	384.4	1569.2	38911.5
Num. interacciones/s	3.83 10 ⁷	8.17 10 ⁷	9.90 10 ⁷	8.83 10 ⁷	1.44 10 ⁷	2.75 10 ⁷	3.61 10 ⁷	3.27 10 ⁷
Coef. U_{corr}	32	11.8	4.5	0.72	12.25	4.8	1.7	0.3

RESULTADOS

La corrección propuesta permite realimentar la energía cinética de las partículas de fluido para compensar por un lado el trabajo realizado por las partículas al comprimirse y por otro corregir los efectos disipativos de la difusión numérica.

La Figura 9 muestra gráficamente la evolución temporal de la suma de la energía cinética y potencial del sistema obtenido como suma de las energías de todas las partículas de fluido, antes y después de la corrección, con los diferentes tamaños de partícula. La corrección resulta más intensa durante los primeros instantes de la simulación haciendo más paulatina la disipación

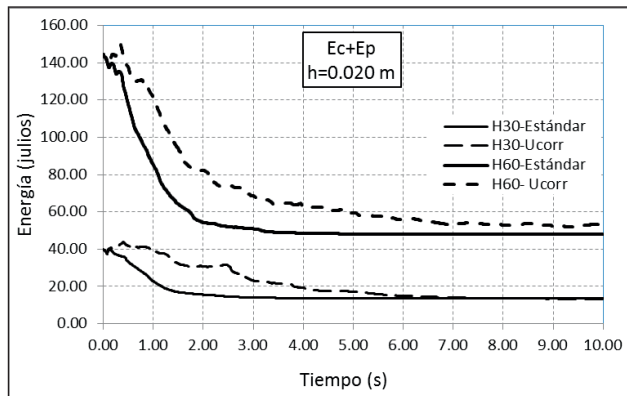


Figura 9a

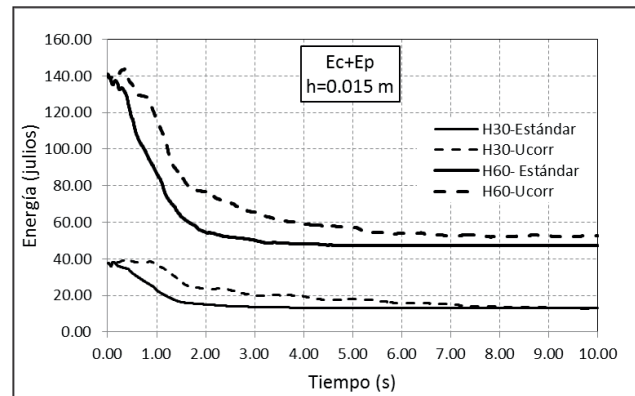


Figura 9b

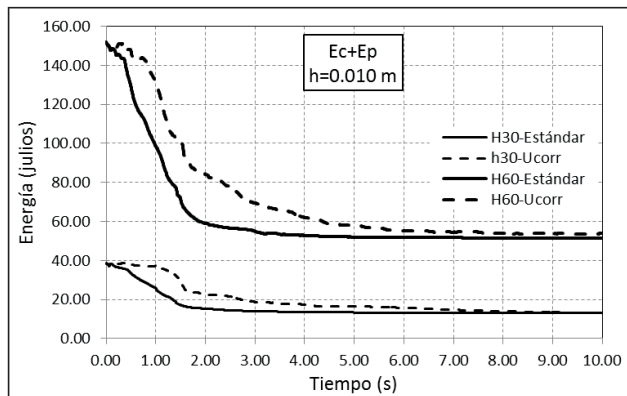


Figura 9c

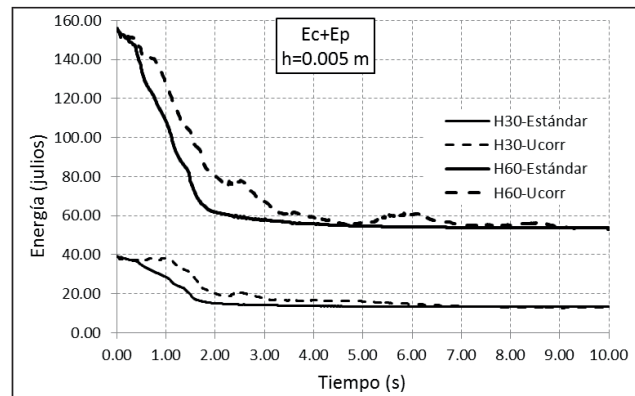


Figura 9d

Figura 9 | Evolución de la energía cinética y potencial del sistema en los ensayos H30 y H60 con los diferentes tamaños de partícula.

de energía. Esto se evidencia en la Figura 10 donde se muestra gráficamente la evolución temporal de la energía introducida con la corrección en los ensayos H30 y H60 para los diferentes tamaños de partícula empleados.

La Tabla 3 muestra el análisis energético de los diferentes ensayos. En ésta se indica la energía potencial inicial de cada ensayo. Se aprecian ligeras diferencias entre los ensayos H30 y H60 por las diferencias de discretización. También se indica la integral de la energía potencial y cinética a lo largo del tiempo y la del incremento de energía introducido por la corrección. Las dos últimas filas de la Tabla indican la relación entre los coeficientes correctores en los ensayos H30 y H60 para cada tamaño de partícula así como la relación entre las energías introducidas con la corrección.

Si se comparan las dos últimas filas de la Tabla 4 se aprecia que existe una relación inversa, para cada tamaño de partícula, entre los coeficientes de corrección $Coef.U_{corr}$ y las áreas de la energía introducida por la corrección entre las simulaciones de H30 y H60.

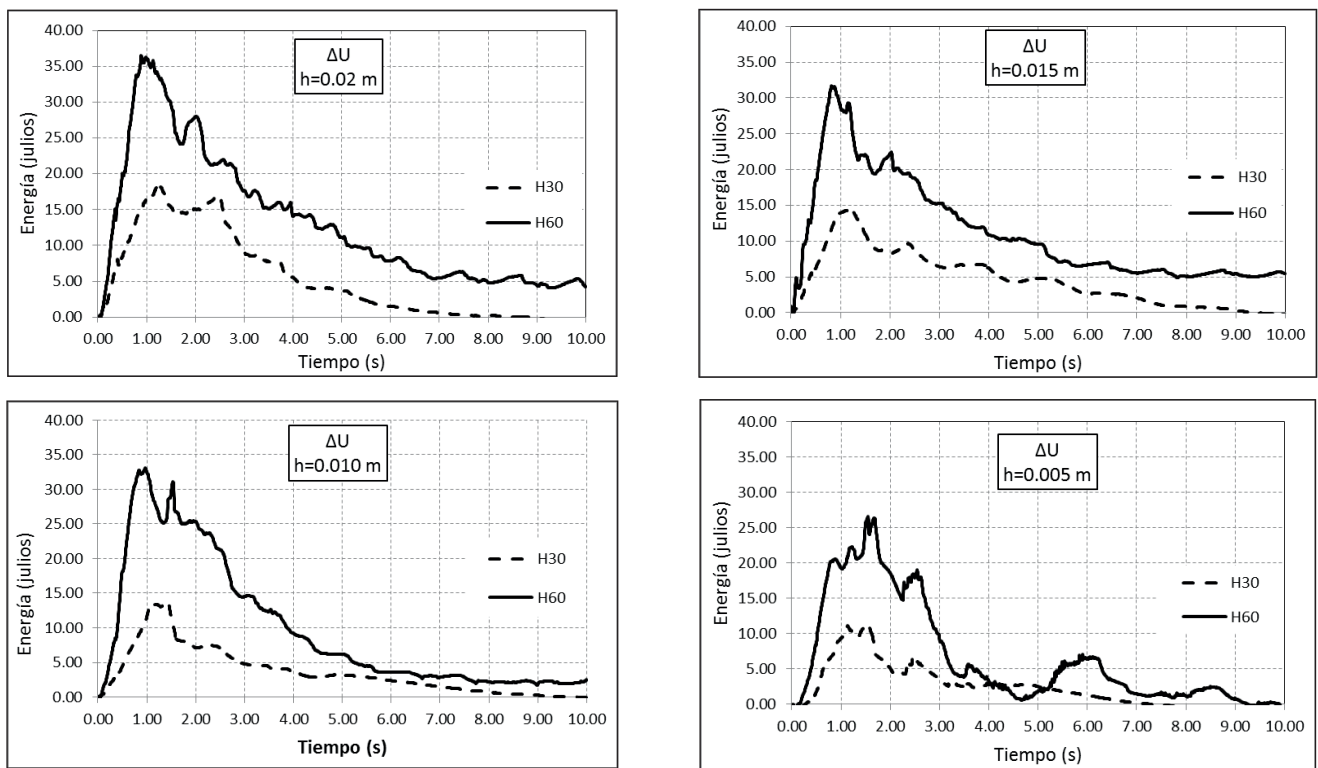


Figura 10 | Evolución de la energía cinética y potencial del sistema introducida con la corrección entre los ensayos H30 y H60 para los diferentes tamaños de partícula.

Tabla 4 | Análisis energético de las simulaciones.

	H30				H60			
	0.02	0.015	0.01	0.005	0.02	0.015	0.01	0.005
Tamaño de part. h(m)	0.02	0.015	0.01	0.005	0.02	0.015	0.01	0.005
$Coef.U_{corr}$	32	11.8	4.5	0.72	12.25	4.8	1.7	0.3
Energía pot. inicial (julios)	37.044	35.721	37.044	38.367	143.2368	139.3119	148.176	153.468
Energía total $\times t$ (julios $\times s$)	213.37	200.14	194.97	187.37	703.98	677.6	720.72	719.91
Δ Energía $\times t$ (julios $\times s$)	53.5	45.67	35.97	23.75	131.61	112.07	98.676	65.659
$Coef.U_{corr}(H30)/Coef.U_{corr}(H60)$	2.61	2.46	2.65	2.4				
$\Delta E(H60)/\Delta E(H30)$	2.46	2.45	2.74	2.76				

La Figura 11 presenta gráficamente los resultados de la Tabla 3, con un análisis estadístico de los resultados energéticos de los ensayos. La Figura 11.a relaciona el incremento de energía (ΔE) introducido por la corrección con la energía potencial inicial (E_{pi}) del sistema en función del tamaño de partícula empleado. La Figura 11.b presenta gráficamente el coeficiente corrector que es necesario introducir en la ecuación (18) para conseguir una adecuada corrección energética, en función de la relación anterior ($\Delta E/E_{pi}$). Se aprecia que cuanto más energético es el sistema menor es la corrección necesaria. Así mismo, cuanto mayor es el tamaño de partícula mayor es la corrección necesaria.

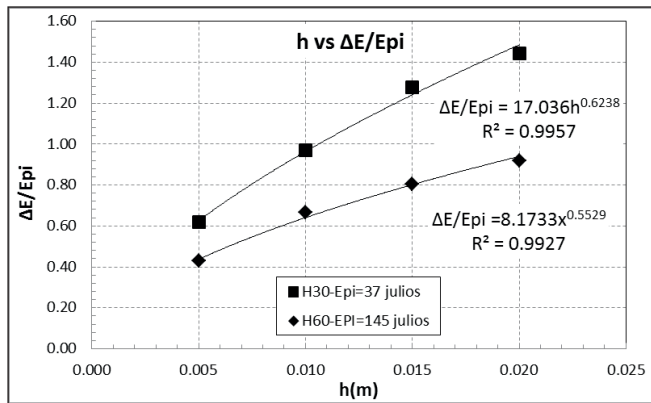


Figura 11.a

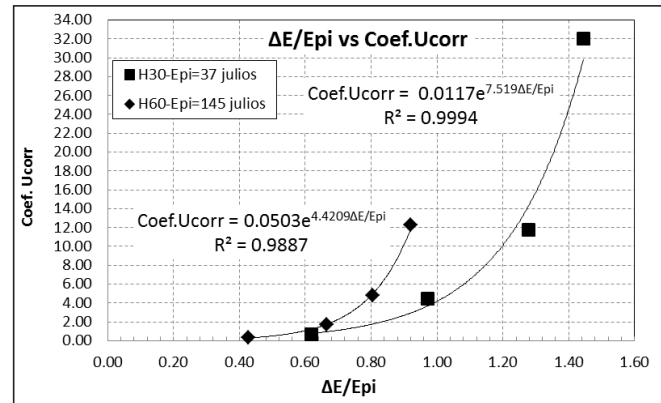


Figura 11.b

Figura 11 | Análisis Energético. (11.a) Incremento de energía introducido por la corrección en función de la energía potencial inicial y el tamaño de partícula. (11.b) Coeficiente corrector en función de la relación ($\Delta E/E_{pi}$).

DISCUSIÓN

El método de corrección energética se basa en calcular el incremento de energía interna de cada partícula y corregir la velocidad de cada una de ellas en función de ésta. Se incluye en esta formulación un coeficiente $Coef.U_{corr}$ que se ha calibrado con los ensayos realizados y que engloba los efectos difusivos derivados del trabajo de compresión y los debidos a la difusión numérica. La calibración se ha realizado para conseguir que al cabo de 10 segundos de simulación el frente de onda del experimento H30 haya impactado 7 veces con las paredes del depósito y 9 veces en el H60, de acuerdo con los ensayos en modelo físico. Se aprecian ciertos desfases en la posición del frente de onda en la fase intermedia en el ensayo H30, sin embargo el ajuste conseguido para el H60 está en fase, independientemente del tamaño de partícula.

Si comparamos los ensayos H60 para 0.005 m y 0.02 m se aprecia que al aumentar el tamaño de partícula se pierde precisión en el detalle de los impactos, pero los campos de velocidades son semejantes. Si se tiene en cuenta la diferencia de tiempos de computación, 38911.5 s (0.005 m) frente a 244.9 s (0.02 m), se entiende la enorme utilidad del empleo de esta corrección, al menos en las primeras fases de un estudio de asistencia técnica, pues permite realizar multitud tanteos con discretizaciones groseras antes de pasar al estudio de detalle con partículas más pequeñas.

El experimento de rotura de presa se ha empleado en diferentes trabajos de calibración analizando el primer impacto (Gómez-Gesteira, 2004; Crespo, 2008; Gómez-Gesteira, 2010) sin embargo no se ha analizado la propagación del frente y los sucesivos choques. En otros casos como el de sloshing en tanques (Souto-Iglesias, 2006), si se analizan varios impactos, pero el movimiento del contorno realimenta energéticamente el sistema lo que no permite analizar la difusión.

Ozbulut, 2013 presenta un análisis de diferentes algoritmos de corrección del método SPH para mejorar la representatividad de método en el análisis de flujos violentos. El análisis realizado del caso de rotura de presa se limita al primer impacto y no compara los resultados numéricos con experimentación física.

CONCLUSIONES

La discretización espacial adecuada garantiza la representatividad de la simulación numérica en fenómenos de impacto, sin embargo es necesaria una corrección energética del método cuando se analizan fenómenos de propagación de ondas, debido a que la compresibilidad del fluido tiene efectos difusivos.

El empleo de un adecuado modelo de turbulencia resulta necesario para mejorar la semejanza en los fenómenos de impacto. Se ha implementado una mejora del modelo de turbulencia α_{vor} que hace depender la disipación viscosa del campo de vorticidad. El campo de vorticidad obtenido en las diferentes simulaciones se ve afectado por la discretización empleada. Sin embargo, se ha comprobado que esta dependencia es mucho menor cuando se comparan el producto de la vorticidad por el tamaño de partícula, en especial los valores máximos. Se ha modificado el modelo de turbulencia α_{vor} para hacerlo depender del producto vorticidad por tamaño de partícula.

Se ha implementado un método para transferir parte de la energía interna debida al trabajo realizado por el fluido al comprimirse. Además se ha calibrado un coeficiente corrector que permite corregir de forma conjunta la difusión termodinámica y la debida a la difusión numérica por discretización espacial.

Esta corrección muestra un camino para mejorar la representatividad del método WCSPH en estudios de propagación de ondas, además permite reproducir con bastante aproximación el campo de velocidades con una discretización espacial gruesa, con tiempos de computación varios órdenes de magnitud menores. Sería necesario ampliar este estudio con otros experimentos en modelo físico para dar generalidad a esta corrección.

La calibración obtenida es válida para condiciones de contorno de Lennard Jones, pues aunque su efecto disipativo es mucho menos importante que los fenómenos difusivos abordados, no ha sido posible desacoplarlos.

AGRADECIMIENTOS

A Jose María Grassa, constante acicate y fuente de inspiración.

REFERENCIAS

- Blas, M., López, D. Marivela, R., Rebollo, J.J., Díaz, R. (2010). Estudio en modelo matemático del aliviadero de la presa de Calanda (Teruel, España). *Proceedings del XXIV Congreso Latinoamericano de Hidráulica*, Punta del Este, Uruguay, Noviembre 2010.
- Crespo, A. (2008). *Development of the Smoothed Particle Hydrodynamics model SPPhysics*. PhD Thesis. Departamento de Física Aplicada. Universidad de Vigo.
- Crespo, A. Domínguez, J.M., Barreiro, A., Gómez-Gesteira, M. Rogers B.D., (2011). GPUs, a New Tool of Acceleration in CFD: Efficiency and Reliability on Smoothed Particle Hydrodynamics Methods. *Plos One*, 6(6). doi:10.1371/journal.pone.0020685
- Gatti, D., Maffio, A., Zuccalà, D., Di Monaco, A. (2007). SPH Simulation of Hydrodynamics Problems Related To Dam Safety. *Proceedings of 32nd Congress of IAHR*. CD-Rom. Paper 2, SS09. Venice. Italy.
- Gómez-Gesteira, M., Dalrymple, R. (2004). Using a 3D SPH method for wave impact on a tall structure. *Journal of Waterway, Port, Coastal Ocean Engineering*, 130(2): 63–69. doi:10.1061/(ASCE)0733-950X(2004)130:2(63)
- Gómez-Gesteira, M. Rogers, B. Dalrymple, R., Crespo, A. (2010). State-of-art of classical SPH for free-surface flows. *Journal of Hydraulic Research*, 48. Extra Issue: 6-27. doi:10.1080/00221686.2010.9641242
- Grassa, J.M. (2004). El método SPH. Aplicaciones en ingeniería marítima. *Revista de ingeniería civil*, 133.

- Grassa, J.M. (2006). Estado del Arte sobre Aplicación de Técnicas de CFD en Estudios de Ingeniería Marítima. El Método SPH: Algunas Aplicaciones En Ingeniería Marítima. Informe CEDEX, 24-405-9-163. Madrid, Spain.
- Grassa, J.M. (2007). Wave forces on a wavemaker. SPH simulation and comparison with analytic results. *Proceedings 32nd Congress of IAHR, the International Association of Hydraulic Engineering & Reseach*. Venice 1-6 de Julio, v. I, 2007. P. 100. ISBN 88-89405-06-6.
- Hugges, J.P., Graham, D.I. (2010). Comparison of incompressible and weakly-compressible SPH models for free-surface water flows. *Journal of Hydraulic Research*,. 48, Extra Issue: 105-117. doi:10.1080/00221686.2010.9641251
- Lee, E.-S., Violeau, D., Issa, R., Ploix, S. (2010). Application of weakly compressible and truly incompressible SPH 3D water collapse in waterworks. *Journal of Hydraulic Research*. 48, Extra Issue, pp. 50-60..
- Lobovsky,L., Botia-Vera, L. E., Castellana, F., Mas-Soler, J.,Souto-Iglesias, A. (2013). Experimental investigation of dynamic pressure loads during dam break. *Journal of Fluids and Structures, arXiv:1308.0115v1*.
- López, D. (2012). SPH method applied to hydraulic structures. Friction boundary condition. *Proceedings of 4th IAHR International Symposium on Hydraulic Structures*, 9-11 February 2012, Porto, Portugal, ISBN: 978-989-8509-01-7.
- López, D., Cuellar, V. (2013). Paralelización CUDA del método SPH. Aplicaciones en el diseño de estructuras hidráulicas. *Proceedings de las III Jornadas de Ingeniería del Agua. Barcelona, Spain*. ISBN 978-84-267-2071-9.
- López, D., Marivela, R. (2009). Applications of the SPH Model to the Design of Fishways. *Proceedings of 33rd Congress of IAHR. Water Engineering for a Sustainable Environment The International*, Vancouvert 9-14 de agosto de 2009. ISBN: 978-90-78046-08-0.
- López, D., Marivela, R., Aranda F. (2009). Calibration of SPH model using prototype pressure data from the stilling basin of the Villar del Rey dam, Spain. *Proceedings of 33rd Congress of IAHR. Water Engineering for a Sustainable Environment The International*, Vancouvert 9-14 de agosto de 2009, ISBN: 978-90-78046-08-0.
- López, D., Marivela, R., Garrote L. (2010). Smooth Particle Hydrodynamics Model Applied To Hydraulic Structures: A Hydraulic Jump Test Case. *Journal of Hydraulic Research*, 48, Extra Issue:pp. 142-158. doi:10.1080/00221686.2010.9641255
- Monaghan, J.J. (1992). Smoothed particle hydrodynamics. *Annual review of astronomy and astrophysics*, 30: 543–574. doi:10.1146/annurev.aa.30.090192.002551
- Monaghan, J.J. (1994). Simulating free surface flows with SPH. *Journal of Computational Physics*, 110: 1-15. doi:10.1006/jcph.1994.1034. doi:10.1088/0034-4885/68/8/R01
- Monaghan, J.J. (2005). “Smoothed Particle Hydrodynamics” *.Reports on Progress in Physics*, 68, 1703-1759.
- Ozbulut, M., Yildiz, M., Goren, O. (2013). A numerical investigation into algorithms for SPH method in modelling violent free surface flows. *International Journal of Mechanical Sciences*, 79: 56–65. doi:10.1016/j.ijmecsci.2013.11.021
- Souto-Iglesias, A., Delorme,L., Pérez-Rojas, L. Abril-Pérez, S. (2006). Liquid momento amplitude assesment in sloshing type problems with smooth particle hydrodynamics. *Ocean Engineering*, 33(11-12), 1462-1484. doi:10.1016/j.oceaneng.2005.10.011
- Violeau, D., Issa, R. (2007). Numerical modelling of complex turbulent free-surface flows with the SPH method: an overview. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 53(2): 277-304. doi:10.1002/flid.1292