



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA


Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Estudio de estabilidad de un problema de Rayleigh-Bénard usando Nek5000

TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA AERONÁUTICA



AUTOR:

Raúl Arco Hierves

TUTOR:

Sergio Hoyas Calvo

Universitat Politècnica de València

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

Valencia, septiembre de 2018.

Resumen:

El fenómeno de convección natural es el fenómeno de convección más común en nuestro Universo. Su presencia se da desde procesos de cocción empleados en cocina, hasta la generación de manchas solares, pasando por la dinámica del manto terrestre, la generación de corrientes oceánicas o los movimientos de aire a gran escala producidos en la atmósfera. Su mecanismo principal es la variación de densidad de un fluido que además está sometido a un campo gravitatorio. Cuando esta variación de densidad se produce debido a un gradiente de temperatura, recibe el nombre de convección de Rayleigh-Bénard.

Con el objetivo de obtener un conocimiento más profundo y preciso sobre la convección de Rayleigh-Bénard, y en concreto sobre la estabilidad de las estructuras generadas durante un proceso de este tipo, en el presente trabajo se ha realizado un estudio paramétrico sobre distintos números adimensionales. El estudio se ha realizado usando el software de CFD Nek5000. Este software permite realizar DNS en dominios no triviales gracias a su discretización espacial: los elementos espectrales. Este método presenta la libertad de los métodos de volúmenes finitos con la precisión de los métodos espectrales por lo que es de gran interés en la industria aeronáutica. Concretamente, el problema resuelto tiene un dominio físico formado por dos cilindros concéntricos, cuya capa superior está expuesta al aire libre, mientras que la capa inferior es calentada aplicando un gradiente de temperatura radial. Hasta un determinado número de Rayleigh el sistema es estable, pero se desestabiliza a partir de un valor de Rayleigh crítico que depende del número de Biot y la relación de aspecto del cilindro.

Palabras clave: convección, Rayleigh-Bénard, natural, Nek5000, estabilidad, estudio paramétrico.

Abstract:

The phenomenon of natural convection is the most common convection phenomenon in our Universe. Its scope is huge, from cooking processes to the generation of sunspots, going through the dynamics of the terrestrial mantle, the generation of ocean currents or the large-scale movements of air produced in the atmosphere. Its main mechanism is the variation of a fluid's density which is also subjected to a gravitational field. When this variation in density occurs due to a temperature gradient, it is called Rayleigh-Bénard convection.

In order to obtain a deeper and more precise knowledge about Rayleigh-Bénard convection, and specifically about the stability of the structures generated during a process of this type, in the present work a parametric study has been carried out, studying how different dimensionless numbers affect it. The study has been done using the CFD software called Nek5000. This software allows to carry out DNS in non-trivial domains thanks to its spatial discretization: the spectral elements. This method has the freedom of the volume finite method together with the accuracy of the spectral methods, that is why it is so interesting in the aerospace industry. Specifically, the problem solved has a physical domain formed by two concentric cylinders, whose upper layer is exposed to open air, while the lower layer is heated by applying a radial temperature gradient. The system is stable until a particular Rayleigh number, but it starts to destabilize from a critical Rayleigh which depends on the Biot number and the aspect ratio of the cylinder.

Keywords: convection, Rayleigh-Bénard, natural, Nek5000, stability, parametric study.

Resum:

El fenomen de la convecció natural és el fenomen de convecció més comú en el nostre Univers, la seva presència es dona des dels processos de cocció emprats en la cuina, fins a la generació de taques solars, passant per la dinàmica del mantell terrestre, la generació de corrents oceànics o els moviments d'aire a gran escala produïts en l'atmosfera. El seu mecanisme principal es la variació de la densitat d'un fluid que a més es troba subjecte a un camp gravitatori. Quan aquesta variació de la densitat es produeix a causa d'un gradient de temperatura, rep el nom de convecció de Rayleigh-Bénard.

Amb l'objectiu d'obtenir un coneixement més profund i precís sobre la convecció de Rayleigh-Bénard, especialment sobre l'estabilitat de les estructures generades durant un procés d'aquest tipus, en el present treball s'ha realitzat un estudi paramètric sobre diferents nombres adimensionals. L'estudi s'ha realitzat utilitzant el software de CFD anomenat Nek5000. Aquest software permet realitzar DNS en dominis no trivials gràcies a la seua discretització espacial: els elements espectrals. Aquest mètode presenta la llibertat dels mètodes de volums finits junt amb la precisió dels mètodes espectrals, la qual cosa el fa especialment interessant en la indústria aeroespacial. El problema resolt té un domini físic format per dos cilindres concèntrics, la capa superior està exposada a l'aire lliure, mentre que la capa inferior és escalfada aplicant un gradient de temperatura radial. Fins a un determinat nombre de Rayleigh el sistema es estable, però es desestabilitza a partir d'un nombre crític de Rayleigh el qual depèn del nombre de Biot y de la relació d'aspecte del cilindre.

Paraules clau: convecció, Rayleigh-Bénard, natural, Nek5000, estabilitat, estudi paramètric.

Índice general:

DOCUMENTO I: MEMORIA

1.	INTRODUCCIÓN	17
1.1	<i>Introducción al fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard</i>	17
1.2	<i>Modelado de la convección Rayleigh-Bénard</i>	18
1.2.1	Contexto del problema	19
1.2.2	Dominio y situación física	20
1.2.3	Ecuaciones generales del problema	20
1.2.5	Parámetros de control	26
1.3	<i>Aplicaciones de la convección Rayleigh – Bénard</i>	27
1.4	<i>Objetivos</i>	29
2.	CARACTERÍSTICAS SOBRE EL SOFTWARE USADO, NEK5000	31
2.1	<i>Descripción básica</i>	31
2.2	<i>Discretización espacial basada en SEM</i>	32
2.2.1	Introducción	32
2.2.2	Interés en CFD	34
2.2.3	Características básicas de los métodos espectrales	39
2.3	<i>Características del solver</i>	45
2.4	<i>Programando una simulación</i>	47
3.	DESCRIPCIÓN DE LA SIMULACIÓN	51
3.1	<i>Características del problema simulado</i>	51
3.2	<i>Estudio paramétrico sobre la aparición de inestabilidades</i>	53
4.	RESULTADOS OBTENIDOS	55
5.	DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS	73
6.	CONCLUSIONES	77
6.1	<i>Sobre el trabajo realizado</i>	77
6.2	<i>Propuestas futuras</i>	78

DOCUMENTO II: PLIEGO DE CONDICIONES

1.	ORDENANZA GENERAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO	81
----	--	----

DOCUMENTO III: PRESUPUESTO

1. PRESUPUESTO.	93
1.1 <i>Introducción</i>	93
1.2 <i>Presupuestos parciales</i>	93
1.3 <i>Presupuesto final</i>	95
 BIBLIOGRAFÍA:	 97
 <i>Agradecimientos</i>	 99

Índice de figuras y tablas:

Figuras:

Figura 1. Fotografía original del patrón de estructuras obtenido por Bénard.....	17
Figura 2. Fenómeno de circulación termohalina.....	28
Figura 3. Evolución del coste computacional con el número de periodos de integración para tres esquemas numéricos de integración distintos.....	36
Figura 4. Flujo libre avanzando y pasando alrededor de un semicilindro.	37
Figura 5. Contornos instantáneos de vorticidad generados tras el paso de un flujo libre por un semicilindro.....	37
Figura 6. Tipos de procesos de convergencia.....	38
Figura 7. Estudio de la resolución de la ecuación diferencial elíptica de Helmholtz alrededor de una geometría compleja.....	39
Figura 8. Diagrama de flujo con información sobre los archivos y comandos necesarios para la generación y simulación de un caso.....	48
Figura 9. Esquema de la geometría del problema.	51
Figura 10. Malla generada para la simulación del problema.....	52
Figura 11. Diagrama de flujo sobre el estudio paramétrico realizado.....	54
Figura 12. Dependencia del número de Rayleigh crítico con el número de Biot y la relación de aspecto del cilindro.....	55
Figura 13. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 1$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	56
Figura 14. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 1$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	57
Figura 15. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 2$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	58
Figura 16. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 2$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	59
Figura 17. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 3$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	60
Figura 18. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 3$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	61
Figura 19. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 4$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	62
Figura 20. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 4$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	63
Figura 21. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 5$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	64

Figura 22. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 5$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	65
Figura 23. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 6$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	66
Figura 24. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 6$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	67
Figura 25.. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 7$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	68
Figura 26. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 7$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	69
Figura 27. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 8$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7	70
Figura 28. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 8$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2	71
Figura 29. Comparación de estructuras generadas con resultados de [9].....	74

Tablas:

Tabla 1. Condiciones de contorno generales de la convección Rayleigh-Bénard.	26
Tabla 2. Clasificación de los distintos métodos de residuos ponderados.	41
Tabla 3. Condiciones de contorno del problema resuelto.	52
Tabla 4. Resumen de las propiedades físicas del problema.	53
Tabla 5. Presupuesto de los costes de recursos humanos durante la primera etapa del trabajo.	93
Tabla 6. Presupuesto de los costes de recursos humanos durante la segunda etapa del trabajo.	94
Tabla 7. Coste total de los recursos humanos usados	94
Tabla 8. Costes en equipos y software.....	94
Tabla 9. Costes materiales adicionales.	94
Tabla 10. Presupuesto de los costes de amortización en equipos.....	94
Tabla 11. Cálculo de los costes totales.	95
Tabla 12. Coste total.	95

Página intencionadamente en blanco.

Documento I: Memoria

1. Introducción

1.1 Introducción al fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard

Los fenómenos de convección debidos a procesos de calentamiento no uniformes representan el tipo de dinámica de fluidos más común en el Universo. Además, este tipo de fenómenos tienen también un impacto considerable en varios campos de ingeniería. Otra fuente de interés en la investigación de los fenómenos de convección es su relación en el comportamiento caótico de ciertos flujos y la formación de estructuras de distinta complejidad y naturaleza, cuya investigación ayuda a comprender mejor las propiedades de sistemas fluidos generadores de patrones.

Cuando la convección se produce en una capa o lámina de fluido horizontalmente plana, bajo la influencia de un campo gravitatorio, y debiéndose la variación de densidad al calentamiento de la lámina desde la parte inferior, se denomina convección de Rayleigh-Bénard. Este tipo de convección es considerada el tipo de convección natural (convección debida a fuerzas internas al fluido) más común y simple.

Históricamente fue Bénard quien comenzó a realizar las primeras investigaciones sobre convección natural, a comienzos del siglo XX, mediante la realización de una serie de experimentos basados en calentar desde abajo capas delgadas de fluidos con alta conductividad térmica dejando su superficie al aire libre. Durante estos experimentos Bénard pudo observar la formación estable y regular de celdas hexagonales en la superficie de las capas, tras un periodo de tiempo. Observaciones más minuciosas hicieron deducir a Bénard que la formación de las celdas hexagonales era debida a la circulación del fluido, que ascendía desde el interior de la capa hacia la superficie a lo largo del perímetro hexagonal y descendía en el centro de la celda. Entre los estudios realizados por Bénard en estos experimentos se incluyen la asociación de la aparición de una depresión en el centro de las celdas al fenómeno de tensión superficial de la región del fluido en contacto con el aire, o el estudio de la influencia del grosor de la capa del fluido y el gradiente de temperatura al que se sometía la parte inferior de esta, a la distancia entre el centro de las celdas formadas.

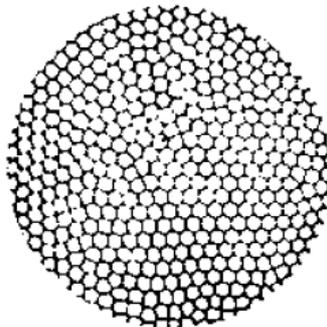


Figura 1. Fotografía original del patrón de estructuras obtenido por Bénard.

Entre los estudios teóricos del fenómeno de convección natural producido al calentar una lámina de fluido por su parte interior, Lord Rayleigh fue el primero, en 1916, en desarrollar una teoría que explicará científicamente los mecanismos físicos que afectan a este fenómeno. Cuando un fluido, bajo un campo gravitatorio, presenta gradientes de densidad, la fuerza de flotabilidad hace que una región del fluido con densidad media superior a la del resto de fluido colindante tienda a descender, mientras que, si su densidad media es inferior, esta región tienda a ascender. Lord Rayleigh además señaló los agentes que se imponían a esta fuerza de flotabilidad: la fricción que se opone al movimiento del fluido (debida a las fuerzas viscosas del mismo), y la conducción de calor, que contribuye a una homogeneización de la temperatura en el fluido y de tal manera de su densidad, reduciendo la fuerza de flotabilidad. En función de estos tres factores, fuerza de flotabilidad, fuerzas viscosas y conductividad térmica, se determina si al introducir una perturbación en el fluido, una región de este comenzará a moverse sin volver a su situación de reposo y produciendo el fenómeno conocido como convección natural.

Tras estos primeros estudios han sido muchas las investigaciones realizadas acerca de la convección de Rayleigh-Bénard tanto durante el siglo XX como en el siglo XXI. Uno entre los muchos trabajos destacables fue el llevado a cabo por Batchelor, en 1954, que estudió la relación entre los parámetros de relación de aspecto (relación entre grosor de la capa del fluido y longitud de la misma), número de Prandtl (que establece las características físicas del fluido y se define como $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$) y número de Rayleigh, en una cavidad de forma rectangular y longitud L . Otros autores se centraron en la obtención de los valores críticos de número de Rayleigh, ya fuera de forma experimental o teórica, en problemas concretos, como fue el caso de Jeffreys en 1926 para el caso de placas infinitas o Heitz y Westwater en 1971 para diversas geometrías y suponiendo las paredes laterales con valores concretos de conductividad térmica.

Investigaciones más recientes se han centrado en el estudio del problema con números de Rayleigh elevados, entre 10^5 y 10^6 , debido a la generación de flujos de régimen turbulento. Lohse fue pionero en estos estudios.

1.2 Modelado de la convección Rayleigh-Bénard

A continuación, vamos a formular con precisión, tanto las ecuaciones que modelan nuestro problema como, sobre todo, las condiciones especiales de contorno realistas que simulan un problema específico dentro de la mecánica de fluidos: el problema de Rayleigh-Bénard.

Concretamente, queremos estudiar la formación de estructuras en un fluido confinado en un recinto cilíndrico sometido a un gradiente térmico y con su superficie

superior abierta a la atmósfera. En este tipo de problemas, ya clásicos en la literatura de la mecánica de medios continuos, el principal mecanismo desestabilizante es el efecto del empuje de Arquímedes debido a la fuerza de la gravedad y a la existencia de un gradiente de temperaturas, impuesto mediante un calentamiento “por debajo que, en nuestro caso, será no uniforme.

1.2.1 Contexto del problema

El problema que nos atañe ha sido ampliamente estudiado de muy diversas maneras y en diversos recintos, de forma teórica, numérica y experimental, existiendo una amplia bibliografía sobre el tema. Además, por estar dentro del amplio mundo de la mecánica de fluidos, convergen en su tratamiento varias técnicas que ya habían sido utilizadas con éxito en otros problemas. No es nuestra intención hacer un estudio bibliográfico sobre la mecánica de fluidos y la teoría de bifurcación, pero sí queremos comentar en las próximas páginas los principales libros y artículos que hemos manejado, así como los estudios actuales en el ámbito del problema de Rayleigh-Bénard.

Estudios teóricos.

Dentro de este epígrafe queremos referirnos a los dos problemas que hemos estudiado en este trabajo y que están muy relacionados entre ellos: la estabilidad linealizada y los problemas de bifurcación. Nuestro trabajo va a estar orientado y referido principalmente a los trabajos de M. G. Crandall y P. H. Rabinowitz, en los que se dan las bases para el estudio de la estabilidad linealizada, problemas similares al nuestro y las bases de la teoría de la bifurcación desde un autovalor simple.

Estudios de análisis numérico.

Desde el punto de vista del análisis numérico, nuestro trabajo representa una primera aplicación de resultados conocidos en la mecánica de fluidos para la búsqueda de soluciones de las ecuaciones de evolución de Navier-Stokes dentro de la mecánica de fluidos. Nos gustaría destacar en esta sección el libro de Bernardi y Maday, esencial para entender los métodos espectrales y los de Temam, Girault y Raviart básicos para entender la discretización de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Estudios numéricos aplicados.

Probablemente, la mecánica de fluidos sea una de las partes de la ciencia más estudiadas numéricamente. En varios de los trabajos realizados, se han considerado cajas con uno de sus lados infinitos. Una idea para vencer esta simplificación y trabajar en recintos

finitos, es la de convertir esta caja infinita en un cilindro y estudiar el problema en este dominio. Existe una muy amplia bibliografía sobre la resolución por métodos espectrales de este tipo de problemas, sobre todo en los trabajos de F. Marqués y colaboradores. Además, el problema numérico que estudiaremos presenta en la capa inferior un calentamiento no homogéneo.

1.2.2 Dominio y situación física

El dominio físico en el que vamos a llevar a cabo nuestro estudio numérico está formado por dos cilindros concéntricos de radios a y $a + \delta$ que contiene una capa de fluido de espesor d . La expresión analítica del interior de la celda es:

$$D = \{(x, y, z) \in R^3: a < \sqrt{x^2 + y^2} < a + \delta, 0 < z < d\} \quad (1)$$

El fluido es calentado por debajo de forma radial, imponiendo un decrecimiento lineal desde una temperatura máxima T_{max} en $r = a$ hasta una mínima en $r = a + \delta$. En cualquier punto de la placa inferior se tiene una distribución de temperaturas de la forma:

$$T(r) = \frac{T_{min} - T_{max}}{\delta} (r - a) + T_{max} \quad (2)$$

La parte superior del fluido es libre y está abierta a la atmósfera. Esto va a tener consecuencias muy importantes en su comportamiento, como veremos cuando estudiemos las condiciones de contorno del problema. En cuanto a las paredes laterales, vamos a considerar dos tipos muy distintos de escenarios, dependiendo de su comportamiento con respecto al calor. En el primer caso, el conductivo, vamos a considerar que los cilindros presentan una temperatura homogénea y constante, siendo ésta T_{max} en el cilindro interior y T_{min} en el exterior. Sin embargo, si queremos controlar el flujo de calor a través de las paredes de la celda y, más concretamente, que el calor no pueda salir a través de ellas, lo que haremos será fijar la derivada normal de la temperatura en estas paredes a cero, es decir, considerar condiciones de contorno Neumann homogéneas. Al impedir el trasvase de calor diremos que el sistema es aislante. Definimos aquí dos nuevos parámetros que van a ser esenciales en nuestro trabajo. Éstos van a ser la diferencia entre la temperatura máxima y la ambiente, $\Delta T = T_{max} - T_0$ y la diferencia de temperaturas horizontales $\Delta T_h = T_{max} - T_{min}$.

1.2.3 Ecuaciones generales del problema

Para describir la dinámica de nuestro problema partimos de las ecuaciones que gobiernan el flujo hidrodinámico de un fluido viscoso con densidad y temperatura variables.

Éstas relacionan la velocidad del fluido $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)$ con la presión p , la temperatura T y la densidad ρ , siendo estos campos funciones del espacio $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ y del tiempo t . Una obtención detallada de estas ecuaciones se puede hallar, por ejemplo, en el libro de Chandrasekhar o en el de Batchelor. Siguiendo al primer autor tenemos para $1 \leq i, j, k \leq 3$ y adoptando el convenio de sumación de índices repetidos, las siguientes ecuaciones:

Ecuaciones de Navier-Stokes

$$\rho \delta_t u_i + \rho u_j \delta_{x_j} u_i = \rho F_i - \delta_{x_i} p + \delta_{x_j} \left[\mu (\delta_{x_j} u_i + \delta_{x_i} u_j) - \frac{2}{3} \mu \delta_{x_k} u_k \right] \quad (3)$$

donde $\vec{F} = (F_1, F_2, F_3)$ es la suma de las fuerzas aplicadas por unidad de volumen, ρ es la densidad del fluido y μ es la viscosidad. Esta ecuación expresa la conservación del momento del fluido.

Ecuación de continuidad

$$\delta_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4)$$

que expresa la conservación de la masa.

Ecuación del calor

$$\rho \delta_t (c_V T) + \rho \vec{u} \cdot \nabla (c_V T) = \delta_{x_j} \bar{\kappa} \delta_{x_j} T - p \delta_{x_j} u_j + \Phi \quad (5)$$

donde $\bar{\kappa}$ es el coeficiente de conducción térmica, c_V es el calor específico a volumen constante, Φ representa la disipación de energía de forma irreversible por viscosidad y el término no lineal $\rho \vec{u} \cdot \nabla (c_V T)$ representa el transporte de energía en el fluido.

Aproximación de Oberbeck-Bousinesq.

Las ecuaciones (3)-(5) son muy generales y describen el comportamiento de un fluido en muy variadas situaciones físicas. Sin embargo, son excesivamente complicadas y, tal como fue apuntado independientemente por Boussinesq [13] y Oberbeck [64], hay múltiples situaciones físicas en las que estas ecuaciones pueden ser simplificadas sin perder ninguna información importante. En este caso, la aproximación de Oberbeck-Bousinesq, usual en los problemas de convección, consiste en suponer una dependencia lineal de la densidad con la temperatura en el término de la fuerza externa y una densidad constante, ρ_0 , igual a la densidad media a temperatura T_0 en el resto de los términos y ecuaciones. Además, se suponen constantes el resto de coeficientes: μ , $\bar{\kappa}$ y c_V . Esto viene motivado porque se sabe que en un intervalo de temperaturas la densidad viene aproximada por:

$$\rho = \rho_0[1 - \alpha(T - T_0)] \quad (6)$$

donde α es el coeficiente de dilatación térmica. En nuestro caso hemos tomado un fluido similar a fluidos para los que α es del orden de 10^{-4} . Por tanto, mientras la aproximación dada por (6) sea válida, las variaciones de la densidad son como máximo del orden de un 1%, que en problemas de convección es despreciable en todos los términos de las ecuaciones salvo en el de la fuerza externa en las ecuaciones de Navier-Stokes.

La primera consecuencia de esta aproximación es que de la ecuación de la continuidad obtenemos:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (7)$$

es decir, la condición de la incompresibilidad. Además, considerando también μ como constante y la ecuación (8), de la ecuación del momento (5) obtenemos:

$$\rho_0 \delta_t u_i + \rho_0 u_j \delta_{x_j} u_i = \rho F_i - \delta_{x_i} p + \mu \delta_{x_j} \delta_{x_j} u_i$$

y de aquí, considerando sólo la fuerza de la gravedad, $\vec{F} = -g\vec{e}_3$, donde g es la constante gravitatoria y \vec{e}_3 el vector unitario en la dirección vertical, obtenemos la ecuación

$$\delta_t u_i + u_j \delta_{x_j} u_i = -\frac{\rho}{\rho_0} g e_{3i} - \frac{1}{\rho_0} \delta_{x_i} p + \frac{\mu}{\rho_0} \delta_{x_j} \delta_{x_j} u_i$$

que en notación vectorial se expresa

$$\delta_t \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{\rho}{\rho_0} g \vec{e}_3 - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta \vec{u} \quad (8)$$

donde $\nu = \mu/\rho_0$ es la viscosidad cinemática.

Por último, en la ecuación del calor, considerando c_V constante y definiendo $\kappa = \bar{\kappa}/(\rho_0 c_V)$ como el coeficiente de conductividad térmica, obtenemos:

$$\delta_t T + \vec{u} \cdot \nabla T = \kappa \Delta T \quad (9)$$

En esta ecuación hemos despreciado Φ , ya que para este recinto su valor aproximado es:

$$\Phi \cong \frac{\mu \alpha g T}{\bar{\kappa}}$$

donde τ es una medida del orden de la longitud lineal del sistema. Teniendo en cuenta que $\tau = 10^{-3}$, $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$, $\alpha = 10^{-3}$, $\mu = 3.2 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ y $\bar{\kappa} = 7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, obtenemos que Φ es del orden de 10^{-5} , al igual que en la mayoría de problemas de convección, por lo que es depreciable frente al resto de términos de la ecuación.

Transformación de las ecuaciones.

Es usual adimensionalizar las ecuaciones (7)-(9) mediante el cambio de variables

$$\vec{x}' = \frac{\vec{x}}{d}, t' = \frac{\kappa}{d^2} t, \vec{u}' = \frac{d}{\kappa} \vec{u}, \theta' = \frac{T - T_0}{\Delta T}, p' = \frac{d^2}{\rho_0 \kappa \nu} p$$

Este cambio de variables transforma el dominio D en:

$$D^* = \left\{ (x, y, z) \in R^3 : a^* < \sqrt{x^2 + y^2} < a^* + \delta^*, 0 < z < 1 \right\}$$

Siendo

$$a^* = \frac{a}{d}, \delta^* = \frac{\delta}{d}$$

Las ecuaciones en las nuevas coordenadas son:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \tag{10}$$

$$\delta_t \vec{u} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = Pr(-\nabla p + \Delta \vec{u} + (R\theta - b)\vec{e}_3) \tag{11}$$

$$\delta_t \theta + \vec{u} \cdot \nabla \theta = \Delta \theta \tag{12}$$

Donde hemos introducido los números adimensionales

$$b = \frac{d^3 g}{\kappa \nu}, R = \frac{\alpha d^3 g \Delta T}{\kappa \nu}, Pr = \frac{\nu}{\kappa}$$

Aquí, R es el número de Rayleigh, que representa el efecto del empuje y Pr es el número de Prandtl, que describe la viscosidad.

Debido a la forma de nuestro dominio, realizamos un nuevo cambio de coordenadas, de cartesianas a cilíndricas. Este es un cambio estándar. En las nuevas coordenadas, dadas por:

$$\begin{cases} x_1 = r \cos \phi \\ x_2 = r \sin \phi \\ x_3 = z \end{cases}$$

y con el cambio de base:

$$\begin{cases} \vec{e}_r = \cos\phi\vec{e}_1 + \sin\phi\vec{e}_2 \\ \vec{e}_\phi = -\sin\phi\vec{e}_1 + \cos\phi\vec{e}_2 \\ \vec{e}_z = \vec{e}_3 \end{cases}$$

Donde $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ es la base canónica de R^3 , las ecuaciones (10)-(12) se transforman en:

$$\frac{1}{r}\delta_r(ru_r) + \frac{1}{r}\delta_\theta u_\theta + \delta_z u_z = 0 \quad (13)$$

$$-\delta_r p + \Delta_c u_r - \frac{u_r}{r^2} - \frac{2}{r^2}\delta_\theta u_\theta = 0 \quad (14)$$

$$-\frac{1}{r}\delta_\theta p + \Delta_c u_\theta - \frac{u_\theta}{r^2} + \frac{2}{r^2}\delta_\theta u_r = 0 \quad (15)$$

$$-\delta_z p + \Delta_c u_z - b - R\theta = 0 \quad (16)$$

$$\delta_t \theta + u_r \delta_r \theta + \frac{u_\theta \delta_\theta \theta}{r} + u_z \delta_z \theta = \Delta_c \theta \quad (17)$$

siendo

$$\Delta_c = \frac{1}{r}\delta_r(r\delta_r) + \frac{1}{r^2}\delta_\phi^2 + \delta_{zz}$$

y donde ahora $\vec{u} = (u_r, u_\phi, u_z)$ en la base $\{\vec{e}_r, \vec{e}_\phi, \vec{e}_z\}$.

Nuestro dominio es ahora $\Omega^* = (a^*, a^* + \delta^*) \times (0, 2\pi) \times (0, 1)$, pero, debido al método numérico que utilizaremos, necesitamos hacer una última transformación, ya que la integración de las ecuaciones se tiene que realizar en $\Omega = (-1, 1) \times (0, 2\pi) \times (-1, 1)$. Este último cambio es:

$$r' = \frac{2(dr - a)}{\delta} - 1, \phi' = \phi, z' = 2z - 1 \quad (18)$$

con lo que, renombrando las variables, llegamos al sistema:

$$Gu_r + A\delta_r u_r + G\delta_\phi u_\phi + 2\delta_z u_z = 0 \quad (19)$$

$$-A\delta_r p + \Delta_H u_r - G^2 u_r - 2G^2 \delta_\phi u_\phi = 0 \quad (20)$$

$$-G\delta_\phi p + \Delta_H u_\phi + 2G^2 \delta_\phi u_r - G^2 u_\phi = 0 \quad (21)$$

$$-2\delta_z p + \Delta_H u_z - b + R\theta \quad (22)$$

$$\delta_t \theta + u_r A \delta_r \theta + G u_\theta \delta_\theta \theta + 2 u_z \delta_z \theta = \Delta_H \theta \quad (23)$$

En estas ecuaciones se ha definido una función técnica, G , y una constante, A , dados por:

$$G(r) = \frac{2d}{2a + \delta(1+r)}, A = \frac{2d}{\delta}$$

junto con el operador:

$$\Delta_H = A^2 \delta_{rr}^2 + GA \delta_r + G^2 \delta_{\phi\phi}^2 + 4\delta_{zz}^2$$

Condiciones de contorno.

Para completar el planteamiento de nuestro problema, concretaremos las condiciones que satisface el fluido en las paredes de la celda, así en la capa inferior y superior que, recordemos, está abierta a la atmósfera. Por comodidad vamos a describir estas condiciones en el dominio D^* ya adimensionalizadas. Sea $\Gamma = \delta D^*$ y definamos $\Gamma_1 = [a^*, a^* + \delta^*] \times \{1\}$, $\Gamma_2 = \{a^* + \delta^*\} \times [0,1]$, $\Gamma_3 = [a^*, a^* + \delta^*] \times \{0\}$ y $\Gamma_4 = \{a^*\} \times [0,1]$, denotando por \vec{n} a la normal exterior unitaria a Γ y por δ_n a la derivada en esta dirección.

Las paredes laterales de los cilindros y la tapa inferior son rígidas, por lo que allí el fluido está en reposo, es decir,

$$u_r = u_\phi = u_z = 0 \text{ en } \Gamma_i, i = 2, 3, 4$$

mientras que para la temperatura tenemos, después de la adimensionalización, que

$$\begin{aligned} \Theta &= 1 \text{ en } \Gamma_4 \\ \Theta &= \frac{T_{min} - T_0}{\Delta T} \text{ en } \Gamma_2 \end{aligned}$$

en el caso conductivo y

$$\begin{aligned} \delta_n \Theta &= 0 \text{ en } \Gamma_4 \\ \delta_n \Theta &= 0 \text{ en } \Gamma_2 \end{aligned}$$

en el aislante, siendo la temperatura en la capa inferior

$$\Theta = \frac{T_{min} - T_{max}}{\Delta T \delta^*} (r - a^*) + 1$$

Recordemos que esta condición es simplemente el decrecimiento lineal de temperaturas entre T_{max} y T_{min} , comportamiento observado experimentalmente.

Describiremos a continuación las condiciones de contorno en Γ_1 . Dado que la capa superior está abierta a la atmósfera, se debe considerar el intercambio de calor que se produce entre el aire y el líquido. Al incrementar la temperatura del fluido calentándolo desde abajo, el fluido se calienta y se produce un trasvase de calor hacia la atmósfera que es controlado por la ley de Newton del enfriamiento,

$$\delta_n \theta + B\theta = 0$$

en la que hemos introducido un parámetro esencial en nuestro problema: el número de Biot, B , que mide el intercambio de calor con la atmósfera. Esta constante se define como $B = Hd/\kappa$ donde H es el coeficiente de transferencia de calor en la superficie, un parámetro que es muy difícil de controlar experimentalmente.

Las condiciones del fluido en la capa superior se corresponden a las de un fluido con deslizamiento libre:

$$u_3 = 0 \tag{24}$$

$$\delta_{x_3} u_2 = 0 \tag{25}$$

$$\delta_{x_3} u_1 = 0 \tag{26}$$

En la siguiente tabla se resumen las condiciones de contorno, ya en $\Omega = (-1,1) \times (0,2\pi) \times (-1,1)$, que usaremos en la resolución numérica.

$z = -1$	$z = 1$	$r = a, a + \delta$
$u_r = 0$	$\delta_z u_r = 0$	$u_r = 0$
$u_\phi = 0$	$\delta_z u_\phi = 0$	$u_\phi = 0$
$u_z = 0$	$u_z = 0$	$u_z = 0$
$\theta(r) = 1 - \left(\frac{\Delta T_h}{2\Delta T}\right)(r + 1)$	$2\delta_z \theta + B \cdot \theta = 0$	$\delta_n \theta = 0$

Tabla 1. Condiciones de contorno generales de la convección Rayleigh-Bénard.

1.2.5 Parámetros de control

El objetivo de esta tesis es estudiar la formación de estructuras y la estabilidad del flujo de un fluido confinado en el dominio, que obedece a las ecuaciones expuestas y las condiciones de contorno de la tabla previa. En este proceso intervienen múltiples parámetros que controlan la pérdida de calor por la parte superior de la celda, la temperatura del calentador, el efecto de empuje hidrodinámico, etc. Estos parámetros pueden variar y en este trabajo analizaremos qué sucede cuando lo hacen y qué efectos producen.

Para comparar distintas simulaciones y poder sacar conclusiones referentes a efectos térmicos, consideraremos un único fluido con las siguientes características:

$$\gamma = 8 \cdot 10^{-7} Nm^{-1} \circ C^{-1}$$

$$\kappa = 7 \cdot 10^{-8} m^2 s^{-1}$$

$$Pr = 1$$

Así mismo fijaremos $g = 9.81 ms^{-2}$ y la temperatura ambiente T_0 en $20^\circ C$. Por otra parte, hay parámetros que es natural considerarlos variables. El primero, que será el parámetro de control para las bifurcaciones, es la diferencia entre la temperatura máxima del sistema y el exterior, ΔT , ya que la temperatura que tenga el sistema es crucial para que los mecanismos de empuje hidrodinámico actúen. Estudiaremos también qué ocurre cuando se varía la relación de aspecto Γ_r y el número de Biot, que controla el intercambio de calor con la atmósfera.

1.3 Aplicaciones de la convección Rayleigh – Bénard

Como ya se ha comentado previamente, el fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard es el tipo de convección natural más simple y común. Se pueden encontrar ejemplo de este tipo de convección tanto en procesos naturales como en múltiples campos de la ingeniería. Una de sus apariciones en la naturaleza se da en la dinámica del manto terrestre, que se puede estudiar tratando al manto como un fluido, y la cual se rige bajo corrientes de convección natural producidas por el gradiente de temperatura existente entre la corteza terrestre y el núcleo de nuestro planeta. Otro ejemplo son los movimientos a gran escala producidos en la atmósfera, concretamente en las regiones denominadas celdas de Hadley, alrededor del ecuador, celdas de Ferrel, en las latitudes medias y celda Polar. Estos movimientos se deben a la diferencia de temperatura que se da entre las zonas polares y ecuatoriales. El fenómeno de convección natural es también la causa de la circulación termohalina, también conocida en oceanografía como cinta transportadora oceánica. Consiste básicamente en el movimiento del agua oceánica a gran escala y se produce por los gradientes de densidad debidos al flujo de calor en la superficie de los océanos y a los flujos de agua dulce. Este fenómeno tiene un impacto muy significativo en el clima de todo el planeta, así como en las corrientes oceánicas.

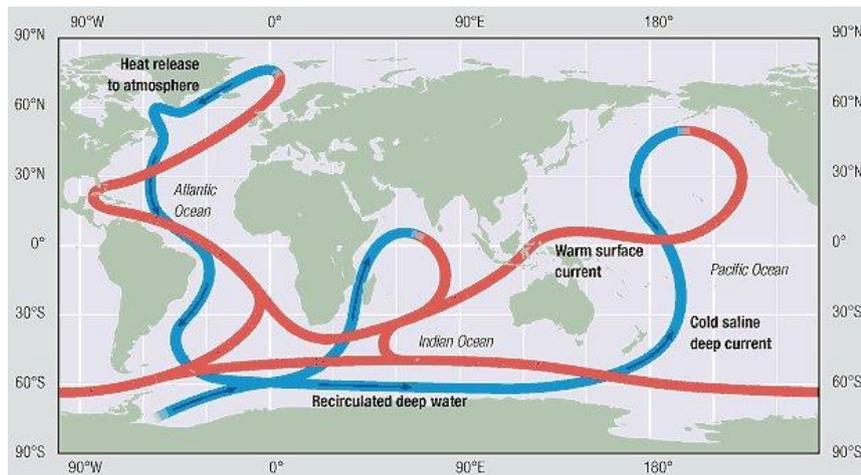


Figura 2. Generación de corrientes oceánicas mediante el fenómeno de circulación termohalina.

En cuanto a aplicaciones de este tipo de fenómeno de convección en la ingeniería también se pueden encontrar varios ejemplos. Uno de ellos afecta al diseño de los captadores solares empleados para generar energía térmica a partir de la energía solar, siendo la eficiencia de este proceso dependiente de las cámaras con aire que por efecto de convección natural transmiten el calor al intercambiador de calor. Otras aplicaciones se hallan en la industria electrónica, concretamente en los procesos de refrigeración de los equipos de computación y sistemas de ventilación o calefacción. Finalmente, otra de las aplicaciones industriales en las que se da este fenómeno, y que atañe especialmente al trabajo realizado, es en el proceso de formación de cristales para uso industrial, como puede ser la formación de monocristales de silicio para componentes electrónicos mediante el proceso Czochralski, en el cual, los gradientes de temperatura aplicados al contenedor cilíndrico del material a cristalizar, son determinantes en las características de los cristales resultantes.

Desde el punto de vista aeroespacial también existen numerosos casos de interés en los que aparece el fenómeno de convección. Cuando por ejemplo se produce la reentrada de un vehículo espacial, existen varias fases de la maniobra en las que se intercambia calor entre las placas térmicas protectoras de la aeronave y el medio que la rodea por convección, ya sea natural o forzada. De hecho, una vez el vehículo ha aterrizado, el enfriamiento del mismo se produce meramente por convección natural. Otros ejemplos son los diversos elementos (radiadores de placas o conductos normalmente) que se utilizan para intercambiar calor entre los fluidos de trabajo de los distintos sistemas, este intercambio de calor también se realiza por convección, en ocasiones natural. Para finalizar, otra de los casos en los que el papel de la convección natural es muy importante se trata de los tanques de fluidos criogénicos usados en microgravedad. Estos tanques se utilizan durante misiones espaciales para transportar combustible principalmente. Posibles transmisiones de calor de sistemas externos hacia el tanque pueden generar un fenómeno de convección Rayleigh-Bénard en el interior del tanque que lleve a pérdidas de masa del fluido (fugas) y despresurizaciones. Hay que tener en cuenta que la densidad de los gases en condiciones de muy baja gravedad puede verse modificada, lo cual hace más difícil de predecir si cabe este fenómeno. Para tratar de

conocer mejor estos casos, experimentos con convección de Rayleigh-Bénard están siendo realizados en el espacio.

1.4 Objetivos

El fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard lleva siendo objeto de estudio desde principios del siglo XX. Durante este tiempo se han realizado múltiples investigaciones ya sea de forma experimental, teórica o, ya en los últimos años, empleando algún tipo de software para simular computacionalmente este fenómeno. No obstante, y en parte debido a que los casos en los que se puede dar este tipo de fenómeno, o una variante del mismo, son de muy diversa índole, el interés en su estudio no se ha perdido en absoluto. En el presente trabajo se persiguen los siguientes objetivos relacionados con el fenómeno de convección Rayleigh-Bénard:

- Alcanzar un conocimiento más profundo acerca del fenómeno de convección natural o convección de Rayleigh-Bénard a través de la consulta de trabajos previos realizados en este campo y con la implementación y resolución, empleando el software computacional Nek5000, de un problema de mecánica de fluidos que incluya una forma de este fenómeno.
- Aprender las bases del código experimental de CFD Nek5000 (software de gran interés para aplicaciones CFD debido a las características que se expondrán más adelante) mediante el estudio de su documentación, la instalación del mismo y la ejecución de casos ejemplo. Ser capaz de programar y resolver un problema propio, obteniendo y procesando sus resultados.
- Resolver un problema de mecánica de fluidos de aplicación industrial o similar que presente el fenómeno de convección Rayleigh-Bénard o una de sus variantes y realizar un estudio sobre el mismo. Concretamente se resolverá un caso en el que el fluido se encuentra en un contenedor anular cilíndrico, cuya superficie inferior es calentada con un gradiente de temperatura radial, y cuya superficie superior se encuentra en contacto con el aire. Se realizará un estudio de como los parámetros de relación de aspecto del problema, gradiente de temperatura aplicado y número de Biot, que relaciona el calor transmitido por el fluido al medio externo a través de la superficie superior con la conducción de calor en el seno el fluido, afectan sobre el número de Rayleigh crítico del problema, es decir sobre el desarrollo de inestabilidades en el fluido.
- Analizar y comparar los resultados obtenidos con resultados de estudios similares realizados por otros medios, ya sea experimentalmente o mediante el uso de otros softwares de computación.
- Extraer conclusiones de los resultados obtenidos y la evaluación de los mismos, tratar de obtener tendencias o comportamientos sobre cómo los parámetros estudiados afectan al problema.

2. Características sobre el software usado, Nek5000

2.1 Descripción básica

Nek5000 es un código escalable, de libre acceso y que basa su discretización espacial en el método de elementos espectrales, empleado para resolver problemas de mecánica de fluidos computacional desarrollado por Fischer. Los lenguajes de programación del código son Fortran77 y C. Inicialmente se diseñó para simular flujos laminares, turbulentos incompresibles, o compresibles con bajos números de Mach, con transferencia de calor y transporte de especies. Posteriormente también se implementó la resolución de las ecuaciones magnetohidrodinámicas incompresibles. Su uso está pensado para computación en paralelo, es decir empleando múltiples procesadores que resuelven subdominios del problema, no obstante también puede trabajar en serie.

El hecho de que se trate de un código que basa su discretización en el método de elementos espectrales junto con su naturaleza a usarse en computación en paralelo hace que las posibles aplicaciones de Nek5000 sean muy diversas e interesantes tanto desde un punto de vista académico o de investigación (astrofísica, oceanografía, modelado de flujo a través del sistema cardiovascular), como desde un punto de vista industrial (procesos de combustión, enfriamiento de reactores nucleares, aerodinámica).

Nek5000, a través de su discretización espacial basada en el SEM, divide el dominio físico en un cierto número, E , de elementos hexaédricos en los cuales las ecuaciones de la dinámica del fluido son resueltas por medio de aproximaciones locales basadas en polinomios ortogonales de elevado orden. Concretamente el código utiliza polinomios de Legendre de orden N sobre puntos de Gauss-Legendre-Lobatto. De esta manera el número total de puntos que posee la malla del dominio es de $E \cdot N^3$.

La discretización temporal se basa en métodos de división de elevado orden que generan subpasos independientes para advección, disipación e incompresibilidad. Los términos lineales, para los subpasos de los términos viscosos y de presión, son resueltos implícitamente. Los términos no lineales de las ecuaciones se resuelven explícitamente.

2.2 Discretización espacial basada en SEM

2.2.1 Introducción

Reseña histórica.

En la actualidad existen numerosas referencias y estudios realizados acerca del método de los elementos finitos. La mayoría de casos que implican a este método están dedicados a aplicaciones estructurales, no obstante, y aunque originalmente no fue desarrollado para este campo, el método de elementos finitos también puede conseguir resultados satisfactorios en problemas de mecánica de fluidos. Una de las principales razones por la que se puede dar esto es la dificultad para modelar los términos no lineales de la ecuación de Navier-Stokes.

La idea de resolver una ecuación diferencial empleando una serie de aproximaciones locales ha sido ampliamente trabajada durante las últimas décadas. Ya en su día Courant usó una malla de triángulos para conseguir una solución aproximada al problema de Dirichlet a través de una interpolación lineal a trozos. Durante la década de 1960 se comenzó a desarrollar el método de los elementos finitos, centrando su uso, principalmente, en problemas de elástica lineal plana. Los primeros métodos de elementos finitos implementados usaban una aproximación polinómica de orden bajo, hasta que Oden empleó series de Fourier para generar un conjunto de elementos rectangulares. Este se puede considerar el primer intento de desarrollar un conjunto de elementos espectrales a través de una aproximación discreta de orden superior.

El método de elementos finitos fue introducido en la mecánica de fluidos a finales de la década de 1970 y fue utilizado de manera frecuente durante la década de 1980 para simulaciones de grandes escalas de flujos. También se consiguió utilizar a finales de la misma década, y obteniendo resultados satisfactorios, en simulaciones aerodinámicas con viscosidades nulas (para simplificar las ecuaciones de Navier-Stokes en la ecuación de Euler) en las que los métodos de diferencias finitas presentaban menor eficiencia de cálculo debido a la complejidad geométrica del problema aerodinámico en cuestión. Los algoritmos desarrollados para simulaciones de aerodinámica computacional permitían una discretización y generación de malla no-estructurada muy eficientes empleando algoritmos de triangulación y tetragonalización. Desde entonces el interés de la comunidad se ha centrado en la simulación no estacionaria de las ecuaciones de Navier-Stokes requiriendo una gran precisión en la resolución de las capas límites y una mínima dispersión de errores a lo largo de grandes intervalos de tiempo de integración.

Fundamentos de los métodos espectrales.

La formulación de los métodos espectrales actuales (también conocidos como métodos numéricos de elevado orden) fue introducida por primera vez por Gottlieb y Orszag en 1977. La discretización en las distintas dimensiones fue formulada como un producto de tensores 1D en dominios separados, formando un conjunto de dominios conectados ortogonalmente.

Los métodos espectrales buscan obtener una solución aproximada a la solución exacta, $u(x)$, a lo largo del dominio mediante una expansión en serie discreta en cada punto del dominio, empleando una función base $\phi_n(x)$, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$u(x) \approx u_N(x) = \sum_{n=0}^N \hat{u}_n \cdot \phi_n$$

Mediante un proceso de minimización de una función residuo (definida como la diferencia entre la solución exacta y la aproximada), se obtienen los coeficientes \hat{u}_n . Existen diferentes esquemas de métodos espectrales que proponen distintas funciones base para la resolución de un problema mediante este método (polinomios de Chebyshev, polinomios de Legendre...).

Principalmente los métodos espectrales se pueden clasificar en dos tipos, los métodos pseudoespectrales y los métodos de Galerkin. Los primeros están asociados con la generación de una malla en base a una serie de nodos. Los coeficientes \hat{u}_n en este caso se obtienen haciendo que la función residuo alcance un valor nulo en los nodos. El segundo tipo, los métodos de Galerkin, están relacionados con el método de los residuos ponderados, el cual busca obtener los coeficientes \hat{u}_n haciendo una ponderación de la función residuo según un conjunto de funciones test (funciones “de prueba”), y de nuevo buscando minimizar o hacer nula la función residuo. Los métodos de Galerkin normalmente usan como funciones test las mismas funciones que las base ($\phi_n(x)$), no obstante en algunas variantes de estos métodos, como la Petro-Galerkin, estos dos tipos de funciones, las base y las test, pueden ser distintas. También existen otros métodos espectrales similares a los del tipo Galerkin pero con otro tipo de variaciones, como los Tau-Espectrales, cuya principal diferencia es estos últimos consiguen cumplir las condiciones de frontera empleando un conjunto de funciones distintas a las funciones base (aplicando estas solamente en el dominio discretizado). Una diferencia a tener en cuenta entre los métodos pseudoespectrales y los de tipo Galerkin es que, en los primeros, los coeficientes \hat{u}_n representan el valor en el nodo de la variable física que se está calculando, mientras que en los métodos de tipo Galerkin o los Tau-Espectrales no.

La convergencia de estos tipos de métodos espectrales (tanto del tipo Galerkin como los pseudoespectrales) es exponencial. A diferencia del método de elementos finitos o el método de diferencias finitas, la convergencia no tiene un orden fijo, y está relacionada con

el máximo nivel de regularidad de la solución. Este tipo de convergencia, también conocida como convergencia espectral, tiene la propiedad de que cada vez que se duplica el número de nodos el error obtenido en la solución numérica se ve reducido en al menos dos órdenes de magnitud, a diferencia de los métodos de órdenes reducidos. No obstante esta característica de la convergencia se puede perder fácilmente en cuanto el dominio es irregular o las soluciones de la ecuación tienen una regularidad finita.

2.2.2 Interés en CFD

Precisión de elevado orden.

Los métodos numéricos de elevado orden, que engloban principalmente a los métodos espectrales y a los métodos implícitos de diferencias finitas, han sido usados durante las últimas dos décadas, de forma casi exclusiva, en simulaciones DNS de flujos turbulentos. Las principales razones por las que se les da estos usos es que estos métodos proporcionan una rápida convergencia y presentan errores de dispersión y difusión reducidos, además su menor volumen de datos facilita el procesamiento de datos de entrada y salida y hace que una computación en paralelo empleando estos métodos sea más eficiente.

Para muchas aplicaciones en la ingeniería, donde una precisión del orden del 10% es suficiente, un orden de convergencia cuadrática suele ser suficiente para simular problemas estacionarios. No obstante, en simulaciones o problemas no estacionarios en los que se deban realizar integrales durante rangos de tiempo muy largos este criterio de precisión puede ser no válido.

A continuación se tratará de explicar cómo afecta la integración durante un rango temporal largo al orden de precisión de un método numérico y al coste de computación. Se considera que se da un fenómeno de convección a una velocidad constante, y se asume que se requiere una malla de un número de elementos $N^{(k)}$ (donde k representa el orden del esquema o método) para reducir el error de la solución a un nivel ϵ . Se asume también que se va a realizar la integración del problema durante un número de periodos de tiempo M y que el orden de la integración temporal es despreciable ya que el salto temporal adoptado es muy pequeño (suficientemente pequeño para que sea despreciable). Dados tres esquemas de integración de diferencias finitas de segundo, cuarto y sexto orden, el número de puntos de la malla de cada uno ($N^{(2)}, N^{(4)}, N^{(6)}$) para obtener un error concreto, se puede expresar, según el estudio realizado por Kreiss y Oliger, como:

$$N^{(2)} \propto 20 \cdot M^{1/2}$$

$$N^{(4)} \propto 7 \cdot M^{1/4}$$

$$N^{(6)} \propto 5 \cdot M^{1/6}$$

Analizando las expresiones se puede observar que estas dependen del número de periodos de tiempo durante los que se ha de integrar, y que, al incrementar el orden del esquema, el error se reduce. Para tratar de comparar el coste computacional que tendría esta integración empleando cada uno de estos esquemas, respectivamente ($W^{(2)}, W^{(4)}, W^{(6)}$), se considera que los esquemas de mayor orden realizan un número mayor de operaciones, proporcional al orden del esquema y que el error obtenido es el anterior, quedando:

$$W^{(2)} \propto 20 \cdot M^{1/2}$$

$$W^{(4)} \propto 14 \cdot M^{1/4}$$

$$W^{(6)} \propto 15 \cdot M^{1/6}$$

Los resultados obtenidos se ilustran en la Figura 3, donde se han representado cada una de las expresiones obtenidas para poder valorar de forma intuitiva la eficiencia de cada uno de los esquemas, hablando en términos de coste computacional (eje Y), a medida que se incrementa el número de periodos de integración (eje X). Se puede observar como al inicio, el esquema de diferencias finitas de 4º orden (línea punteada) resulta ser superior (en términos de eficiencia) a los esquemas de 2º y 6º orden (línea continua y a trazos respectivamente). No obstante, a partir de un cierto número de periodos de tiempo, el esquema de sexto orden es el que resulta más adecuado. Si se evalúan las expresiones anteriores para ordenes de 100 periodos temporales de integración, el coste computacional del esquema de orden superior es la mitad del de 4º orden, y unas seis veces inferior al de 2º orden, por lo que su utilidad queda demostrada.

En la simulación de un problema de mecánica de fluidos con la ecuación completa de Navier-Stokes se deben tener en cuenta además otras consideraciones, como puede ser la discretización temporal, que puede modificar más aún el punto a partir del cual un esquema de mayor orden empieza a ser más eficiente que otro de orden inferior. Además, si se modifica el orden de precisión que se desea obtener en la solución, se pueden dar casos en los que esquemas de orden superior comiencen a ser más eficientes que los esquemas de orden inferior incluso en integraciones de rangos de tiempo muy cortos. Por todo esto queda demostrado que si en un problema se requiere una solución con un elevado nivel de precisión y el rango de tiempo de integración es elevado, un método de orden elevado va a ser más eficiente que otro de orden inferior.

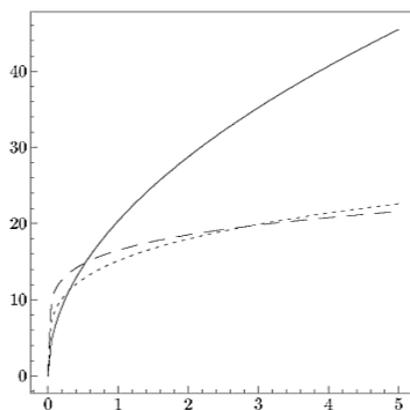


Figura 3. Evolución del coste computacional (eje Y) con el número de periodos de integración (eje X) para tres esquemas numéricos de integración distintos: 2º orden de diferencias finitas (línea continua), 4º orden (línea punteada) y 6º orden (línea a trazos).

Por otro lado, se puede demostrar también que las simulaciones de mecánica de fluidos una elevada precisión en la solución puede llegar a ser necesaria incluso en problemas estacionarios (no dependientes del tiempo). Diversos estudios de problemas considerando un flujo de Stokes (muy bajo número de Reynolds, muy inferior a 1) moviéndose por ciertas geometrías, demostraron que se requerían esquemas de elevado orden de precisión para poder obtener resultados satisfactorios en las componentes de velocidad del flujo y poder captar con precisión la formación de remolinos.

Discretización no estructurada.

Se ha demostrado que el proceso de refinamiento requerido en ciertos problemas con geometrías complejas resulta ser más eficiente cuando se emplean discretizaciones del dominio no estructuradas. Ciertas características, como el refinamiento local o la adaptación de forma eficiente de una malla, dependen estrechamente de la flexibilidad de una discretización a la hora de descomponer un dominio, ya sea en elementos triangulares y tetraédricos (o de otro tipo de geometría 3D), o en elementos cuadriláteros o hexaédricos “no conformes”. A esta última forma de discretizar el dominio se le conoce como discretización no estructurada, y, a diferencia de las discretizaciones estructuradas (que han sido las predominantes hasta ahora, usándose en la resolución de problemas estacionarios o cuasi-estacionarios), se espera que sea el tipo de discretización más extendido a la hora de resolver problemas no estacionarios en los próximos años.

Para ejemplificar el interés de la discretización no estructurada o “no conforme”, se plantea a continuación un caso en el que un flujo libre avanza hacia un medio cilindro, tal y como se muestra en la

Figura 4. Flujo libre avanzando y pasando alrededor de un semicilindro.

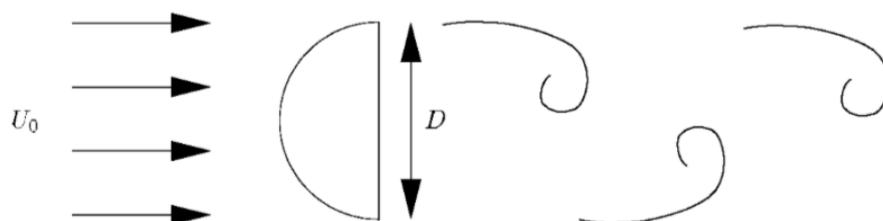


Figura 4. Flujo libre avanzando y pasando alrededor de un semicilindro.

Se simula este problema empleando dos tipos de discretización del dominio, una estructurada, que emplea un total de 276 elementos, y otra no estructurada que cuenta con 176 elementos. Representando los contornos de la vorticidad del flujo tras pasar el el semicilindro en la 8 se puede observar que en el caso en el que se usa la malla estructurada el contorno de los vórtices generados no está tan bien definido como en el caso con la malla no estructurada. Esto se puede interpretar como una mala resolución, por parte del caso con discretización estructurada, de las escalas del flujo de menor tamaño. En cambio, el caso con la malla no estructurada logra una mejor aproximación al comportamiento del flujo ante la perturbación generada por el semicilindro, creando elementos más pequeños cerca del mismo para poder captar mejor las escalas más pequeñas. Además, evita utilizar elementos en exceso en las zonas donde la solución es más simple y conserva los límites del campo lejano a una misma distancia.

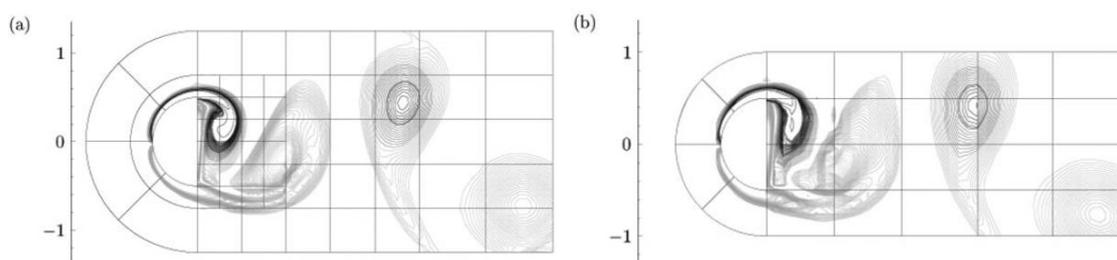


Figura 5. Contornos instantáneos de vorticidad generados tras el paso de un flujo libre por un semicilindro. A la derecha se ha empleado una discretización estructurada, a la izquierda una discretización no estructurada.

Convergencia "HP".

En las bases del método de los elementos finitos creadas durante la década de 1970, se estableció que la convergencia del método sería de tipo " h ". Este tipo de convergencia consiste en que, el error de la solución numérica se reduce algebraicamente cada vez que se refina la malla, es decir cada vez que se introduce un mayor número de elementos haciendo que estos sean de un tamaño menor. Este tipo de convergencia no afecta para nada al tipo de polinomio utilizado en la interpolación, que seguirá siendo del mismo orden que antes de realizar el refinamiento de la malla. No obstante existe otro tipo de convergencia que consiste en mantener el tamaño de los subdominios (es decir, mantener el número de elementos del que se compone la malla sin modificar el tamaño de estos), e incrementar el orden de los polinomios de interpolación empleados, buscando reducir así el error de la solución

numérica. Este último método se conoce como convergencia tipo “p” y es comúnmente utilizado en los métodos espectrales. Una imagen de cómo se implementan estas estrategias de convergencia (o refinamiento se muestra a continuación.

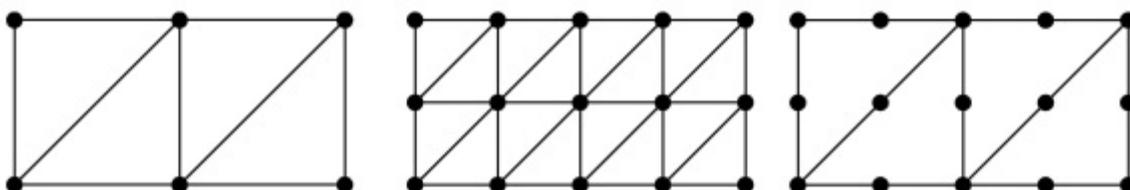


Figura 6. Tipos de procesos de convergencia (refinamiento). A la izquierda malla original, en el centro malla tras aumentar el número de elementos (convergencia tipo “h”) y a la derecha malla tras aumentar el grado de los polinomios de interpolación (convergencia tipo “p”).

Normalmente, a medida que se requieren soluciones más precisas, con menos error, se emplean métodos que puedan incorporar convergencia de tipo “p” ya que logran una reducción del error exponencial, y por tanto más rápida que la convergencia de tipo “h”. No obstante B. A. Szabó propuso, a finales de la década de 1980, un nuevo tipo de convergencia que empleara los dos tipos ya conocidos. En este nuevo tipo de refinamiento o proceso de convergencia, llamado de tipo “hp” se incrementarían al mismo tiempo el número de subdominios (o elementos en los que se discretiza la malla) y el orden de los polinomios de interpolación de los elementos, ya sean realizados estos dos cambios de forma uniforme en todo el dominio o de forma localizada según los requerimientos de la geometría del problema.

Como ejemplo de este tipo de convergencia y los resultados que consigue frente a las otras estrategias de convergencia convencionales, se presenta un caso en el que se resuelve el problema de ecuación diferencial elíptica de Helmholtz alrededor de una geometría compleja como puede ser las islas del Reino Unido. En la 10 se muestra, a la izquierda, cómo se ha procedido para incrementar la convergencia (el tipo de refinamiento), siendo la figura (a) la malla original, la segunda figura, (b), muestra la malla tras aplicar un refinamiento tipo “h” aumentando el número de elementos, mientras que la figura (c) emplea un refinamiento tipo “p” incrementando el orden de los polinomios de interpolación sobre la malla mostrada en (a). Finalmente la última figura del grupo de la izquierda, (d) representa el proceso de convergencia tipo “p” sobre la malla (b). En la figura de la derecha, € se muestra una representación de la evolución de la norma del error para cada una de las mallas a medida que se aumentan los grados de libertad. Se puede observar como al inicio, la malla (b), refinamiento tipo “h” sobre (a) converge más rápidamente que la malla (c), refinamiento tipo “p” sobre (a). La malla (d) aunque presenta un error menor al inicio, lleva un grado de convergencia menor que (b) (comparando las pendientes se observa). A medida que se incrementan los grados de libertad, las mallas que han sido refinadas con criterio tipo “p” comienzan a converger más rápidamente (ya que el error se reduce en estas de forma exponencial). No obstante, si se busca encontrar el camino más óptimo de convergencia, al inicio queda demostrado que sería más interesante aplicar un refinamiento de los elementos

de la malla original y más adelante un refinamiento de los polinomios de interpolación sobre la malla original.

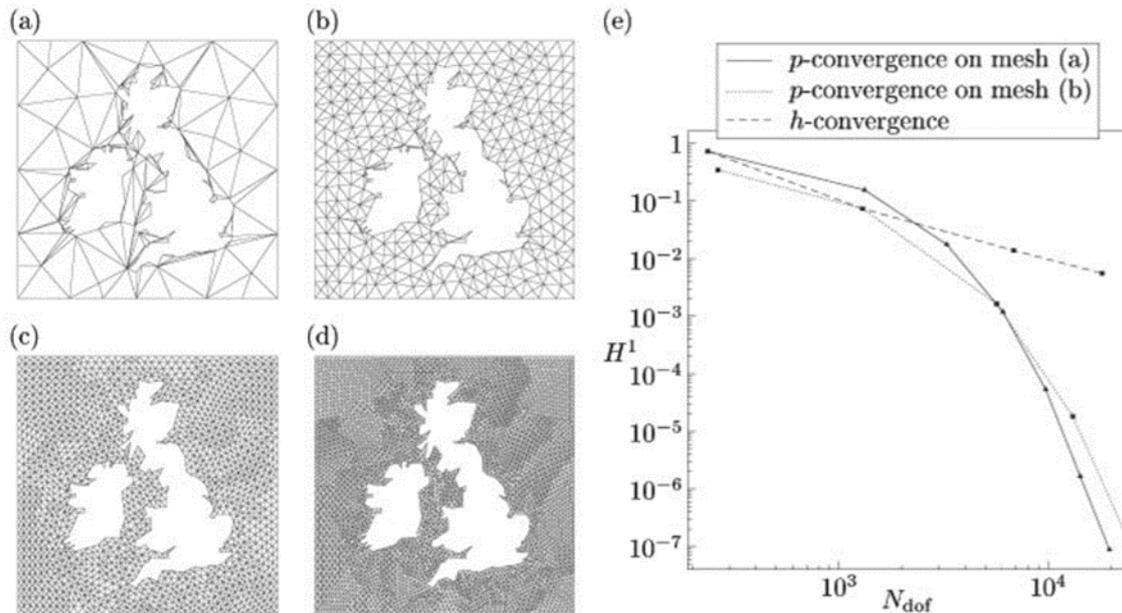


Figura 7. Estudio de la resolución de la ecuación diferencial elíptica de Helmholtz alrededor de una geometría compleja. A la izquierda tipos de malla empleados, siendo (a) la original, (b) un refinamiento tipo “h” (a), (c) un refinamiento tipo “p” de (a) y (d) un refinamiento tipo “p” de (b). A la derecha evolución del error con el número de grados de libertad en cada caso.

2.2.3 Características básicas de los métodos espectrales

Método de los residuos ponderados.

Cuando se trata de resolver un problema numéricamente lo que se está haciendo es obtener una aproximación de la solución exacta reemplazando los infinitos elementos diferenciales del problema por una representación finita de elementos. Este tipo de aproximaciones implican que la ecuación diferencial original que se pretende resolver no se verá cumplida en absolutamente todo el dominio del problema, sino solo en un cierto número de puntos finitos, es decir se cumplirán solo un cierto número de condiciones impuestas por el problema. La elección de las condiciones que serán cumplidas mediante el proceso de resolución del problema viene definida por el tipo de método numérico (también se puede llamar esquema) que se utiliza para la resolución del problema. De ahí que se diferencie entre, por ejemplo, métodos pseudoespectrales y métodos de tipo Galerkin según la estrategia que se siga para cumplir las condiciones impuestas por el problema.

El método de los residuos ponderados muestra cómo eligiendo diferentes “funciones prueba” (funciones de ponderación) en un problema con formulación integral o formulación débil se pueden desarrollar distintos métodos o esquemas numéricos. Considerando una ecuación diferencial lineal en un dominio Ω , definida como:

$$L(u) = 0$$

Esta ecuación diferencial lineal está sujeta a una serie de condiciones iniciales y condiciones de frontera. Se asume además que la solución $u(x, t)$ puede ser representada con suficiente precisión mediante una aproximación con la siguiente forma:

$$u^\delta(x, t) = u_0(x, t) + \sum_{i=1}^{N_{dof}} \hat{u}_i(t) \cdot \Phi_i(x)$$

Donde $\Phi_i(x)$ representan las denominadas funciones de expansión, $\hat{u}_i(t)$ son una serie de coeficientes desconocidos (hay tantos como grados de libertad N_{dof}), y $u_0(x, t)$ son los valores que cumplen las condiciones iniciales y las condiciones de frontera. Cabe destacar que las funciones de expansión, $\Phi_i(x)$, también cumplen algunas de las condiciones de frontera como son las condiciones de frontera de Dirichlet. Si se sustituye la solución obtenida por la aproximación, en la ecuación diferencial descrita previamente, se obtiene un residuo, es decir no se cumple la igualdad de que la ecuación diferencial evaluada en la solución aproximada es igual a cero, sino que se obtiene un cierto residuo, matemáticamente:

$$L(u^\delta) = R(u^\delta)$$

No obstante, dado que no se tiene una forma determinada de obtener los coeficientes $\hat{u}_i(t)$ que den la solución aproximada, se establece una restricción en el residuo que permite establecer un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para determinar los coeficientes $\hat{u}_i(t)$. En caso de que el problema no dependa del tiempo, se podría establecer, con la restringiendo el residuo que se obtiene, un sistema de ecuaciones algebraicas para obtener \hat{u}_i .

Para definir la restricción impuesta en residuo que se obtiene (R) se debe definir primero el producto escalar de Legendre (f, g) sobre el dominio Ω :

$$(f, g) = \int_{\Omega} f(x)g(x)dx$$

La restricción impuesta en R establece que el producto escalar del residuo y las funciones de ponderación o funciones de prueba, sea igual a cero:

$$(v_j(x), R) = 0, \quad j = 1, \dots, N_{dof}$$

Siendo $v_j(x)$ las funciones de ponderación. El residuo ponderado, cuando se cumple la ecuación anterior, se hace nulo y de ahí el nombre de la técnica de resolución numérica. Cuando el número de grados de libertad del problema N_{dof} aumenta y tiende a un número infinito, el residuo $R(x)$ tiende a cero ya que la solución numérica $u^\delta(x, t)$ obtenida se aproxima más a la solución exacta $u(x, t)$. No obstante, la naturaleza de los esquemas viene determinada por la elección del tipo de funciones de expansión $\Phi_i(x)$ y de las funciones de ponderación $v_j(x)$, como se muestra en la siguiente tabla en la que se presentan los

principales esquemas que utilizan la estrategia de los residuos ponderados para obtener su solución numérica:

Función de ponderación	Tipo de método numérico
$v_j(x) = \delta(x - x_j)$	<i>Colocación</i>
$v_j(x) = \begin{cases} 1, & \text{en } \Omega_j \\ 0, & \text{fuera de } \Omega_j \end{cases}$	<i>Volumenes finitos</i>
$v_j(x) = \frac{\partial R}{\partial \hat{u}_j}$	<i>Minimos cuadrados</i>
$v_j(x) = \Phi_j$	<i>Galerkin</i>
$v_j(x) = \Psi_i (\neq \Phi_j)$	<i>Petrov – Galerkin</i>

Tabla 2. Clasificación de los distintos métodos de residuos ponderados.

En el método de las colocaciones las funciones de ponderación $v_j(x)$ consisten en funciones de Dirac evaluadas en cada nodo del dominio discretizado. De esta manera se hace cero el residuo en cada uno de los nodos y se logra cumplir la ecuación diferencial del problema en ese punto.

El método de los mínimos cuadrados parte de la idea originaria de estimación por mínimos cuadrados de Gauss. De esta manera se utiliza el residual y los coeficientes \hat{u}_j obtenidos para calcular las nuevas funciones de ponderación, que proporcionarán a su vez unos nuevos coeficientes más adecuados.

En el método de Galerkin se escogen como funciones de ponderación las mismas funciones que las de expansión, $v_j = \Phi_j$. Otras variantes de este método, como el Petrov-Galerkin, emplean como funciones de ponderación funciones similares a las de expansión, pero no exactamente iguales. La variante Petrov-Galerkin se basa en alterar las funciones de expansión para conseguir una mayor estabilidad numérica o imponer una cierta condición en el sentido en el que se propaga el flujo.

Con todo lo explicado hasta el momento, cabe decir que el método de los residuos ponderados no define si un método es espectral o no. Generalmente los métodos espectrales son aquellos que utilizan un conjunto de funciones de expansión globales, es decir las funciones de expansión $\Phi_i(x)$ que utilizan son funciones definidas no nulas en todo el dominio del problema, lo que equivale a hacer una interpolación global en todo el dominio. Esta es una de las principales con respecto a los métodos de elementos finitos, que interpolan localmente cada elemento del dominio. No obstante, ambos tipos de métodos, espectrales y de elementos finitos, pueden usar las metodologías numéricas descritas anteriormente con respecto al método de residuos ponderados.

Formulación de Galerkin.

Para describir como se plantea un problema usando un método de Galerkin a continuación se realiza la formulación del mismo para un caso sencillo, el de la ecuación de Poisson:

$$L(u) = \nabla^2 u + f = 0$$

Esta ecuación tiene aplicación en varios campos como pueden ser flujos irrotacionales, problemas estacionarios de transmisión de calor, o problemas que presentan potenciales eléctricos o gravitacionales. Aplicando la ecuación a un problema 1D se obtiene:

$$L(u) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f = 0$$

Considerando que el dominio se extiende para valores de x comprendidos entre cero y uno, se pueden considerar las siguientes condiciones de frontera:

$$u(0) = g_D \quad \frac{\partial u}{\partial x}(1) = g_N$$

Donde g_D y g_N son dos valores concretos. La condición de contorno de la variable u al inicio del dominio hace referencia a las condiciones de frontera esenciales (también conocidas como condiciones de frontera de Dirichlet). Mientras que la otra condición de frontera consiste en una condición de frontera "natural", también denominada condición de frontera de Neumann.

Para seguir construyendo una aproximación de la ecuación de Poisson en su forma diferencial, se multiplica esta misma ecuación por una función de ponderación (o prueba) $v(x)$, la cual, por definición, será nula en todas las condiciones de frontera de Dirichlet, y se integra el producto a lo largo de todo el dominio:

$$(v, L(u)) = \int_0^1 v \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f \right) dx = 0$$

Se puede observar que la anterior ecuación sería equivalente a evaluar la ecuación diferencial de Poisson en una solución aproximada u^δ , y realizar el producto entre el residuo de esa evaluación y la función de ponderación.

El siguiente paso que se debe hacer, siguiendo el procedimiento de la formulación clásica de métodos espectrales tipo Galerkin es integrar por partes la ecuación anterior, obteniendo:

$$\int_0^1 \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} dx = \int_0^1 v f dx + \left[v \frac{\partial u}{\partial x} \right]_0^1$$

En caso de tener un número de dimensiones mayor (2D, 3D), en vez de integrar por partes habría que aplicar el teorema de la divergencia de Gauss para poder obtener una expresión similar partiendo de la ecuación puramente integral. Aplicando las condiciones de frontera de tipo Dirichlet y Neumann, que son conocidas, se puede simplificar la expresión anterior en:

$$\int_0^1 \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} dx = \int_0^1 v f dx + v(1)g_N$$

Aquí se puede observar que el sentido de la integración por partes era poder seguir simplificando la expresión haciendo uso de las condiciones de frontera de Neumann, que de otro modo no se podrían haber usado. También se puede observar que, si estas condiciones de frontera de Neumann fueran nulas, se seguiría contando con una única expresión integral con la que sería difícil trabajar.

La parte integral de la ecuación anterior se conoce como “forma débil” de la ecuación, y para poder hallar una aproximación a la solución exacta del problema, $u(x)$, se deberá hacer uso de una aproximación por Galerkin que básicamente ofrece una expansión finita $u^\delta(x)$ de la solución exacta. Reemplazando la última expresión obtenida, por su expansión en número finito de términos queda:

$$\int_0^1 \frac{\partial v^\delta}{\partial x} \frac{\partial u^\delta}{\partial x} dx = \int_0^1 v^\delta f dx + v^\delta(1)g_N$$

Integración numérica.

En la formulación de Galerkin son necesarias técnicas para poder evaluar en cada elemento del dominio discretizado integrales del tipo:

$$\int_{-1}^1 u(\xi) d\xi$$

Donde $u(\xi)$ puede estar formado por los productos de los polinomios de ciertas funciones base (por ejemplo $u(\xi) = \Phi_p(\xi) \cdot \Phi_q(\xi)$). No obstante, ya que $u(\xi)$ puede tomar expresiones muy distintas en función del problema, se debe desarrollar una técnica general o automática para poder calcular el tipo de integrales antes mostrada. Una de las técnicas más extendidas para conseguir esto es realizar una integración numérica mediante el método de las cuadraturas, que básicamente trata de aproximar el valor de la integral según la suma de una serie finita de términos:

$$\int_{-1}^1 u(\xi) d\xi \approx \sum_{i=0}^{Q-1} w_i u(\xi_i)$$

Siendo w_i una constante específica y ξ_i representando uno de los valores en que se pueden encontrar alguno de los puntos (en total son Q puntos) discretizados en el intervalo $-1 \leq \xi_i \leq 1$.

Aunque hay muchos tipos diferentes de integraciones numéricas, a continuación se centrará el trabajo en la cuadratura de Gauss. Este método es particularmente adecuado para obtener una buena precisión integrando numéricamente cuando el integrando, en este caso la función $u(\xi)$, presenta pocas discontinuidades. El procedimiento comienza sustituyendo el integrando por un polinomio de Lagrange usando los Q coeficientes de ξ_i (uno para cada punto del dominio discretizado):

$$u(\xi) = \sum_{i=0}^{Q-1} u(\xi_i) h_i(\xi_i) + \epsilon(u)$$

Siendo $\epsilon(u)$ una aproximación del error. Sustituyendo la expresión anterior en el tipo de integral que se quiere resolver:

$$\int_{-1}^1 u(\xi) d\xi = \sum_{i=0}^{Q-1} w_i u(\xi_i) + R(u)$$

Donde:

$$w_i = \int_{-1}^1 h_i(\xi) d\xi$$
$$R(u) = \int_{-1}^1 \epsilon(u) d\xi$$

La resolución de la expresión completa de la integral se puede lograr utilizando distintos métodos para definir los ceros y las ponderaciones de los polinomios, y en el caso de la cuadratura de Gauss pueden ser tres, Gauss-Legendre, Gauss-Radau-Legendre y Gauss-Lobatto-Legendre.

Estimación de error.

A continuación se expondrán algunos de los errores básicos en los métodos espectrales tipo Galerkin así como parte del desarrollo de la formulación que se emplea para su cálculo.

En primer lugar existe el error debido a la expansión tipo “ h ” explicada anteriormente. Considerando que se toman polinomios de interpolación de grado 1, en una malla cualquiera, al aumentar el número de elementos en los que se discretiza, es decir al aproximar el tamaño de cada elemento a cero, se consigue converger a la solución exacta.

Siguiendo, por ejemplo, con el problema discutido anteriormente de la ecuación de Helmholtz 1D, el error vendrá determinado por el error de la norma de la energía, que se puede expresar de acuerdo a las referencias consultadas como:

$$(\|\epsilon\|)^2 \leq h \cdot N_{el} \cdot \left((C \cdot h)^2 + \lambda \cdot \left(C \cdot \frac{h^2}{8} \right)^2 \right)$$

Donde N_{el} representa el número de elementos en los que se ha discretizado el dominio, h es el tamaño de los elementos y λ y C son constantes que depende del problema que se está resolviendo. Nótese también que en la expresión del error la igualdad es de menor o igual, dado que la ecuación muestra el error más grande que se puede obtener en el dominio discretizado.

Por otro lado, el error debido a la interpolación polinomial realizada se debe básicamente a consideraciones acerca de los polinomios de Legendre, y se puede expresar en términos del grado de los polinomios de expansión empleados. Depende también de la norma de la solución (el término k es una constante que depende también de esta):

$$\|\epsilon\| \leq P^{1-k} \cdot \|u\|$$

Finalmente se puede calcular el error que se obtiene cuando se realiza una expansión o refinamiento de tipo “ h ” y “ p ” al mismo tiempo, es decir cuando primero se refina la malla reduciendo el tamaño de los elementos, y después se incrementa el grado de los polinomios de interpolación. La expresión mostrada es la obtenida en un estudio realizado por Babuska y Suri:

$$\|\epsilon\| \leq C \cdot h^{\mu-1} \cdot P^{1-k} \|u\|$$

Siendo μ el valor mínimo entre el término k (función de la norma de la solución) y el grado de los polinomios de interpolación utilizados más una unidad ($P + 1$).

2.3 Características del solver

Nek5000 es capaz de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes no-estacionarias, flujo incompresible, en 2D axisimétrico y 3D, con transferencia de calor por convección forzada o natural en una geometría fija o variable con el tiempo. También puede resolver las ecuaciones de Navier-Stokes en flujo compresible en el régimen de bajo número de Mach y las ecuaciones magnetohidrodinámicas (MHD). Las variables que proporciona como solución son las componentes de velocidad del fluido, (u_x, u_y, u_z) , la presión (estática), p , y la temperatura, T . Estas variables se hallan en el dominio fluido definido en el caso y dependen de la posición espacial, (x, y, z) , y del tiempo, t .

Ecuaciones de Navier-Stokes para fluido incompresible.

Las ecuaciones que gobiernan el movimiento del fluido son las ecuaciones de momento y continuidad. En el caso de fluido incompresible, en forma dimensional son, respectivamente:

$$\rho(\delta_t u + u \cdot \nabla u) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \cdot f$$

$$\nabla u = 0$$

Siendo $\tau = \mu[\nabla u + \nabla u^T]$. Si la viscosidad del fluido es constante en todo su dominio, el tensor de esfuerzo viscoso se puede expresar como $\nabla \tau = \mu \Delta u$.

A parte de las ecuaciones que gobiernan la dinámica del fluido, Nek5000 también resuelve automáticamente la ecuación de la energía en todo el dominio:

$$\rho c_p (\delta_t T + u \cdot \nabla T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + q_{vol}$$

Ecuaciones de Navier-Stokes compresibles para bajos números de Mach.

Las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles difieren principalmente en que la divergente de la velocidad no es nula (el término de la derecha de la ecuación de continuidad no es nulo). Cuando se da este caso el sistema de ecuaciones no es cerrado y se requiere otra ecuación de estado que relacione las variables de estado, es decir se requiere una ecuación de la forma $p = f(p, T)$. Nek5000 emplea una aproximación de bajo número de Mach, basada en desacoplar la presión de la velocidad y transformando el sistema de ecuaciones en uno tal que se pueda resolver numéricamente de forma similar al caso incompresible. Las ecuaciones de bajo Mach en forma adimensional son:

$$\rho \left(\frac{du}{dt} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \cdot f$$

$$\rho \left(\frac{d\rho}{dt} + u \cdot \nabla \rho \right) = -\nabla u$$

$$\rho \left(\frac{dT}{dt} + u \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot k \nabla T$$

Siendo $\tau = \mu \left[\nabla u + \nabla u^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot u I \right]$.

La ecuación de estado implementada para esta aproximación es, hasta el momento de la versión de código utilizada, la ecuación de los gases ideales $p = \rho RT$. De esta manera se puede emplear densidad variable y viscosidad variable. El sistema de ecuaciones es resuelto sustituyendo $\rho = f(p, T)$ en la ecuación de continuidad y obteniendo de esta manera lo que se denomina como divergencia térmica, que es básicamente expresar la divergencia de la velocidad como función de la temperatura.

Ecuaciones MHD incompresibles.

La magnetohidrodinámica se basa en la idea de que campos magnéticos pueden inducir corrientes en un fluido conductivo en movimiento, que a su vez crea fuerzas en el fluido que modifican los campos magnéticos. El conjunto de ecuaciones que definen la magnetohidrodinámica son una combinación de las ecuaciones de Navier-Stokes para la dinámica del fluido y las ecuaciones de electromagnetismo de Maxwell. Todas estas ecuaciones diferenciales se han de resolver simultáneamente. Considerando un fluido de velocidad (u, v, w) , sometido a un campo magnético B , las ecuaciones incompresibles de la MHD son:

$$\rho(\delta_t u + u \cdot \nabla u) = -\nabla p + \mu \Delta u + B \cdot \nabla B$$

$$\nabla \cdot u = 0$$

$$\delta_t B + u \cdot \nabla B = -\nabla q + \eta \Delta B + B \cdot \nabla u$$

$$\nabla \cdot B = 0$$

Siendo η la resistividad del fluido.

2.4 Programando una simulación

Para realizar una simulación (programar un problema/caso y lanzar su cálculo) son necesarios tres archivos, un archivo *.rea*, un archivo *.usr*, y un archivo *SIZE*. En cada uno de estos archivos se definen parámetros y/o funciones esenciales para la simulación, los cuales se describen en las próximas líneas. Además, en caso de lanzar una simulación en paralelo, es decir empleando múltiples procesadores a la vez (como se realizó en este trabajo, empleando 30 procesadores), un cuarto archivo, *.map*, que contiene información sobre cómo los elementos del dominio se reparten entre los distintos procesadores utilizados, será necesario. Este cuarto archivo es generado a partir del archivo *.rea* al ejecutar el comando *genmap*. En el siguiente esquema se ilustra el proceso de programar y simular un caso con los distintos tipos de archivos y operaciones o comandos a ejecutar.

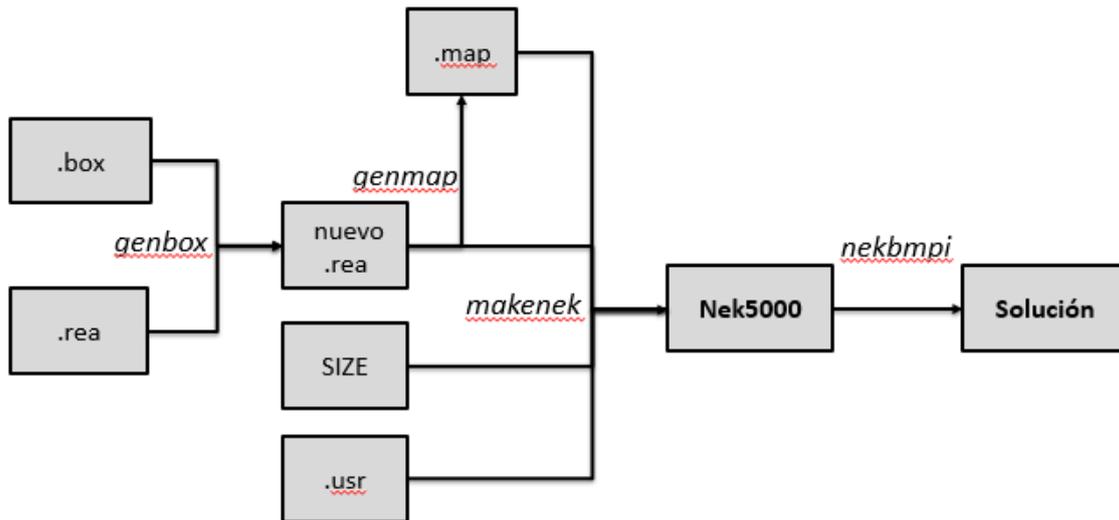


Figura 8. Diagrama de flujo con información sobre los archivos y comandos necesarios para la generación y simulación de un caso.

Archivo *SIZE*.

El archivo *SIZE* define el tamaño del problema que se va a simular, es decir los puntos espacialmente distribuidos en los que se evaluará la solución, el número de elementos por procesador etc. Este archivo también se encarga de definir la memoria requerida por cada procesador para lanzar la simulación y cómo se distribuye esta. A continuación se especifican algunos de los parámetros más importantes de este archivo así como su función.

- **ldim**, este parámetro determina las dimensiones del problema, toma valor 2 para problemas 2D axisimétricos o 3 para problemas 3D (como fue en el caso resuelto en este trabajo).
- **lx1**, define el orden de precisión, siendo este orden $N = lx1 - 1$. Nek5000 está optimizado para trabajar con órdenes de 7, por lo que este parámetro se definió con un valor de 8.
- **lxd**, define el orden polinómico de integración de los términos convectivos. Se define como $3 \cdot lx1/2$
- **lx2**, toma valores de $lx1$ o $lx1 - 2$ y según su valor determina la formulación de Navier-Stokes empleada, y el orde de aproximación para la presión, que viene dado por $lx2 - 1$.
- **lelt**, determina el máximo número de elementos asignados a cada procesador.

El número total máximo de puntos generados en la malla que son asignados a cada procesador se define como:

$$n_{max} = lx1 \cdot lz1 \cdot ly1 \cdot lelt$$

En el caso de un problema 3D, $lz1 = ly1 = lx1$. El número de puntos de malla asignado a cada procesador determina la memoria necesaria en cada uno de estos.

Archivo *.rea*.

El archivo *.rea* consta de varias partes, cada una de ellas alberga información de distinta naturaleza acerca del problema. Al inicio se encuentran las líneas de parámetros de ejecución (definidos como *p01*, *p02*,...) que establecen por ejemplo, el número de pasos simulados, el paso temporal, la tolerancia entre iteraciones, viscosidad (o Reynolds), densidad, conductividad o frecuencia con la que se vuelcan resultados entre otros.

Seguidamente se encuentran los interruptores lógicos. Son parámetros que toman valores 0 o 1 e indican ciertas características del problema como si es estacionario o no estacionario, si se trata de un problema compresible por aproximación de bajo Mach, si la malla o las fronteras del dominio se mueven o cambian con el tiempo, si se ha de resolver convección, etc.

Tras los interruptores lógicos se define la geometría del problema definiendo las coordenadas *x*, *y*, *z* de cada punto de cada elemento, indicando el número total de elementos y las dimensiones del problema. En caso de que la geometría del problema presente curvaturas, tras definir las coordenadas de los puntos de cada elemento, se especifica el tipo de curvatura que se da y en qué región espacial.

A continuación se encuentra la información relacionada con las condiciones de frontera. Para cada cara de cada elemento se especifica el tipo de condición de frontera de cada campo (velocidad y temperatura). Cabe decir que tanto la definición de la geometría como la información de las condiciones de frontera se generaron de forma automática ejecutando el comando *genbox* previa programación de un archivo *.box* que contenía las instrucciones para generar la malla. En este archivo se especifica básicamente las dimensiones del problema (3), el número de elementos en cada dirección y que existe geometría cilíndrica. También se especifican las condiciones de frontera en cada uno de los campos para el radio inicial y final de la geometría, así como de las caras inferior y superior y cómo estas varían radialmente.

Las últimas líneas del archivo *.rea* contienen información sobre si se quiere leer algún archivo que sirva de condiciones iniciales del problema, y la forma en que se vuelca la solución.

Archivo *.usr*.

Una de las características más importantes de Nek5000 es la capacidad de programar subrutinas en lenguaje Fortran77 que se vayan ejecutando durante la simulación. Estas subrutinas se encuentran en el archivo *.usr* y a su vez el archivo permite acceso a todas las variables de ejecución en tiempo durante la simulación. De esta manera se pueden incluir muchas opciones al problema como propiedades variables a lo largo del tiempo, fuentes de

calor, o condiciones iniciales o de frontera distintas a las definidas en el archivo *.rea* o que cambien a lo largo del tiempo. Una subrutina especialmente interesante es la *userchk()* que se ejecuta antes y después de cada paso temporal y permite interrogar u obtener información sobre la solución para llevar a cabo tareas de diagnóstico. Esta rutina es esencialmente la que se empleó para poder realizar el estudio paramétrico modificando el ΔT y *Biot* del problema.

A parte de las rutinas que puede crear el usuario, el archivo *.usr* contiene algunas subrutinas predefinidas. Entre estas las más importantes son: *uservp* (permite definir las propiedades de las ecuaciones que gobiernan el problema), *userdat* (permite modificar la geometría del problema mientras la topología del problema se manenga), *userf* (permite definir el término *f* en las ecuaciones de Navier-Stokes), *userq* (define el término *q* en la ecuación de la energía), *userbc* (permite modificar las condiciones de frontera) y *useric* (define las condiciones iniciales del problema).

3. Descripción de la simulación

3.1 Características del problema simulado

Geometría y malla.

El problema simulado en Nek5000 consiste en una lámina de fluido a temperatura inicial $T_0 = 283K$, de grosor d , contenido en el espacio limitado entre dos cilindros concéntricos, tal y como se ilustra en el esquema adjuntado. Los cilindros poseen unos radios de a y $a + \delta$ respectivamente, cumpliéndose que $a = \delta$, es decir independientemente del valor del radio del cilindro menor, el radio del cilindro mayor siempre es el doble. La base del contenedor del fluido es calentada, imponiendo un gradiente de temperatura radial entre el cilindro interior y el exterior de $2.2 K$. Las paredes laterales se consideran adiabáticas y por la parte superior el fluido está en contacto con el aire, que se encuentra a una temperatura $T_{inf} = 293K$. La diferencia entre la temperatura en la base del cilindro menor y la temperatura ambiente se denomina ΔT y es la empleada para la definición del número de Rayleigh en el problema. Otro parámetro a definir es la relación de aspecto, definida como el cociente entre la diferencia de radios y el grosor de la capa del fluido, $\Gamma = \frac{\delta}{d}$.

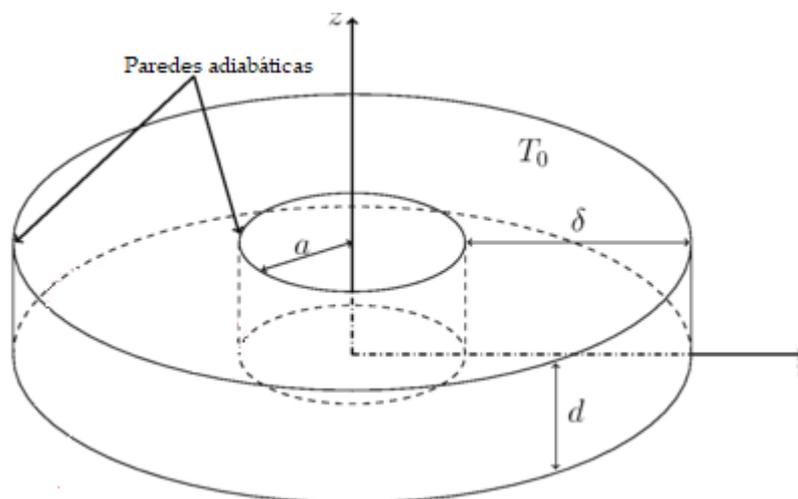


Figura 9. Esquema de la geometría del problema.

Para la generación de la malla se emplearon 240 elementos espectrales y polinomios de Legendre de orden 8, esto implica que cada elemento espectral a su vez está formado por 8 nodos en cada una de las direcciones del problema, haciendo que los nodos de la malla asciendan a un total de 122880. Esta malla ha sido creada de acuerdo con las conclusiones

extraídas de estudios de fenómenos de convección natural en dominios cilíndricos realizados previamente con el software que fueron verificados con ensayos experimentales.

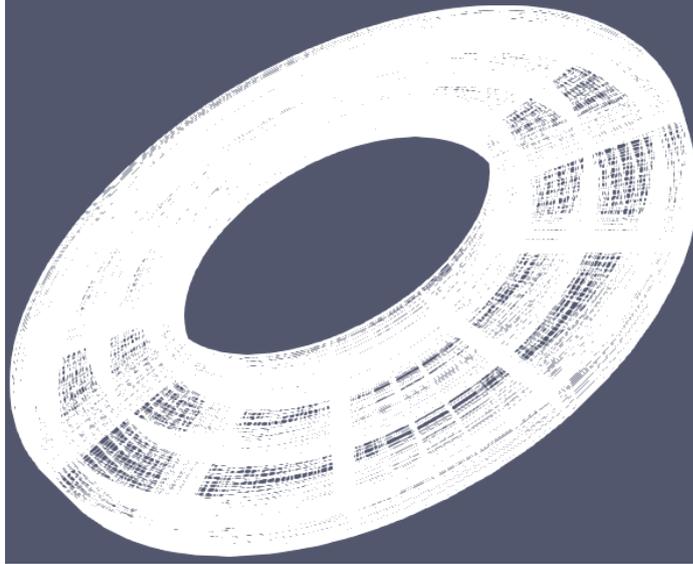


Figura 10. Malla generada para la simulación del problema.

Condiciones de contorno.

En cuanto a las condiciones de contorno impuestas, en lo referente al movimiento del fluido se establecen dos tipos de condiciones. En las paredes del dominio, esto es la base y las paredes laterales, se impone condición de no deslizamiento, es decir velocidad del fluido nula. Por el contrario, en la superficie superior del dominio, donde el fluido se encuentra en contacto con el aire, se impone una condición de deslizamiento libre. Esto implica que en esa región la velocidad del fluido en dirección perpendicular a la superficie sea nula, y que las derivadas parciales en dirección vertical del resto de componentes de la velocidad también sean nulas. En esta misma región del dominio, la capa superior, se impone una condición de Biot para modelar la transferencia de calor entre el fluido y la atmósfera. Además, como ya se ha comentado, las paredes laterales del dominio son adiabáticas, es decir el gradiente de temperatura en dirección normal a las mismas es nulo. Por último el gradiente de temperatura aplicado en la base comienza siendo $\Delta T K$ para las coordenadas de radio mínimo disminuye linealmente hasta tomar valores de $\Delta T - 2.2K$ en la región más externa. En la siguiente tabla se presenta un resumen de las condiciones.

$z = 0$	$z = d$	$r = a, a + \delta$
$u_r = 0$	$\delta_z u_r = 0$	$u_r = 0$
$u_\phi = 0$	$\delta_z u_\phi = 0$	$u_\phi = 0$
$u_z = 0$	$u_z = 0$	$u_z = 0$
$T(r) = \Delta T - \left(\frac{2.2}{\delta}\right)r$	$\delta_z T + Bi \cdot T = 0$	$\delta_n T = 0$

Tabla 3. Condiciones de contorno del problema resuelto.

Propiedades físicas del problema.

Con el objetivo de que la simulación del problema reflejara los tipos de procesos industriales que se utilizan para la formación de cristales de distinto tipo, las propiedades físicas dotadas al fluido fueron similares a las de ciertas siliconas. También cabe mencionar que no todas las propiedades del mismo fueron definidas de forma explícita, si no que se empleó también el número adimensional de Prandtl. En la siguiente tabla se muestra la información al respecto.

<i>Difusividad térmica</i> (κ)	$7 \cdot 10^{-8}$
<i>Coefficiente de dilatación térmica</i> (α)	$1 \cdot 10^{-3}$
<i>Número de Prandtl</i> ($Pr = \frac{\nu}{\kappa}$)	1
<i>Gravedad</i> (g)	9.8

Tabla 4. Resumen de las propiedades físicas del problema.

3.2 Estudio paramétrico sobre la aparición de inestabilidades

El objetivo final de simular el caso descrito previamente fue obtener una mayor comprensión sobre la aparición de inestabilidades en el flujo. Cuando el problema alcanza un estado inestable quiere decir que, bajo la influencia de una pequeña perturbación, el fluido comienza a moverse de tal manera que ya no vuelve a su estado de reposo inicial. Cuando esta situación se da, uno de los parámetros caracterizadores del problema, el número de Rayleigh, se dice que ha alcanzado su valor crítico. Dado que el dominio es cilíndrico, y por lo tanto simétrico en la dirección azimutal mientras no aparecen inestabilidades, cuando se alcance el número de Rayleigh crítico el gradiente de temperaturas en la dirección azimutal dejará de ser constante para un radio dado, es decir dejará de ser simétrico.

Con el fin de determinar bajo qué circunstancias comienzan a aparecer inestabilidades en el problema, se realizó un estudio paramétrico en el que se resolvió el problema para distintas geometrías, modificando la relación de aspecto del dominio, y modificando a su vez el número de Biot, que es el parámetro que relaciona el calor transmitido por el fluido al medio externo a través de la superficie superior con la conducción de calor en el seno del fluido. De esta manera se resolvieron 8 relaciones de aspecto distintas, $\Gamma = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$, y 11 números de Biot, $Bi = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.1, 1.2$. Para determinar cuándo se alcanzaba el Rayleigh crítico en el problema se comenzó resolviendo cada caso para un gradiente de temperatura $\Delta T = 0.1K$ y tras simular durante 2000 iteraciones, si no se detectaban variaciones en el gradiente de temperatura en dirección azimutal para un radio

concreto, se incrementaba en $0.1K$. Cuando se detectaban estas variaciones la simulación finalizaba y se volcaban los resultados.

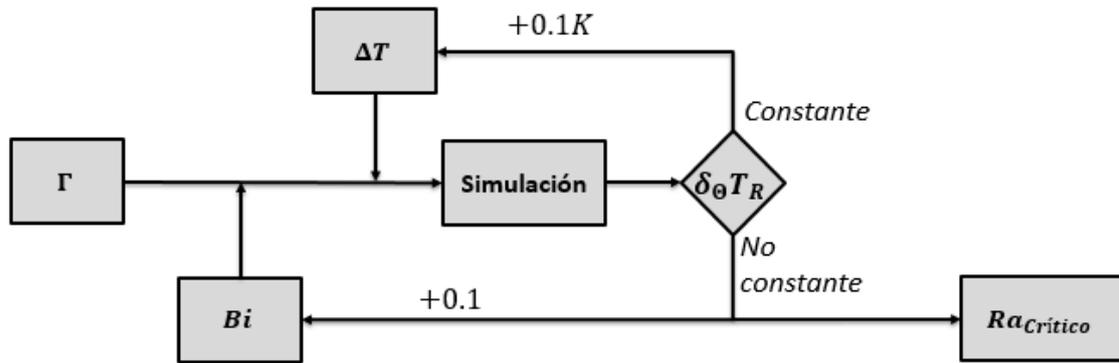


Figura 11. Diagrama de flujo sobre el estudio paramétrico realizado.

4. Resultados obtenidos

En las siguientes páginas se muestran los resultados obtenidos tras la realización del estudio paramétrico. Concretamente se muestra el campo de temperaturas junto a los vectores de velocidad obtenidos en la capa superior del dominio para cada uno de los casos simulados. También se ha decidido mostrar el comportamiento de la aparición de inestabilidades graficando el Rayleigh crítico obtenido en función del número de Biot para cada relación de aspecto.

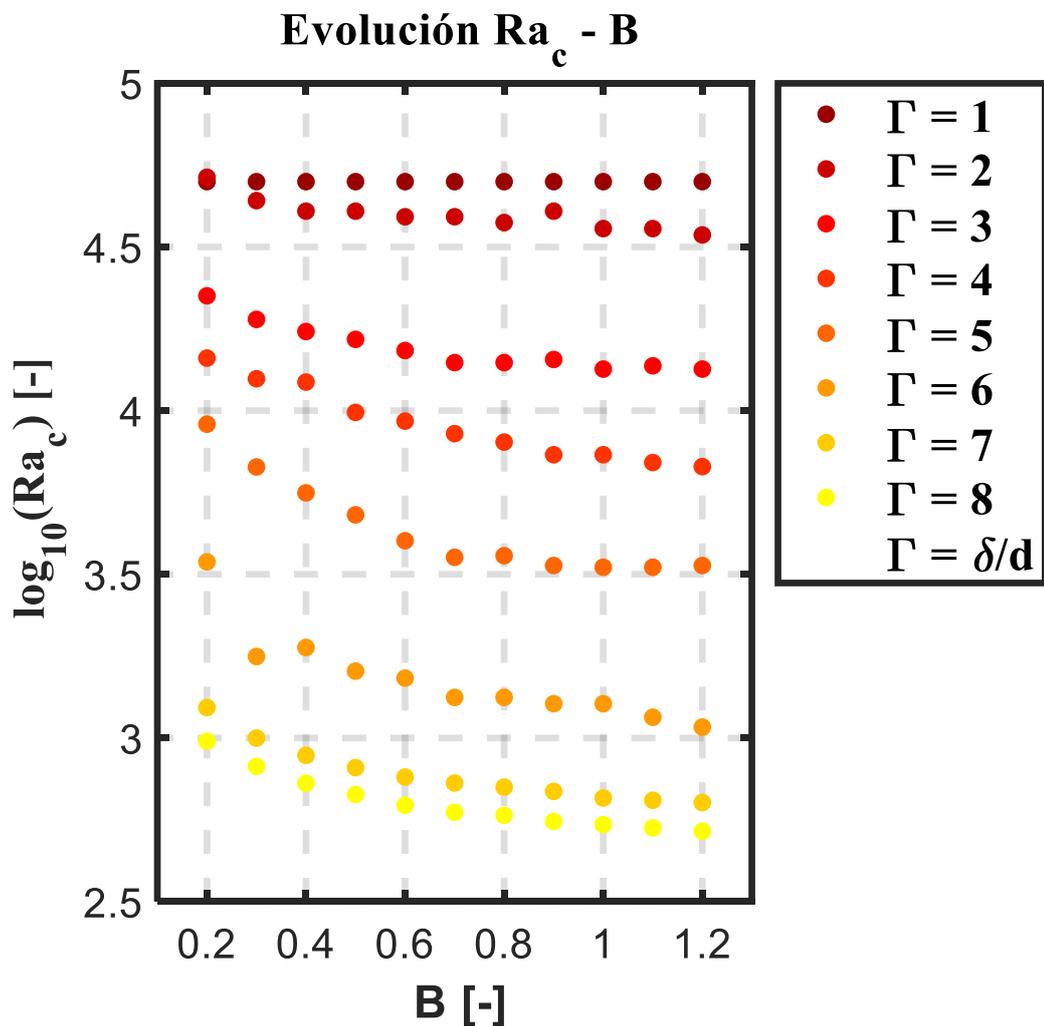


Figura 12. Dependencia del número de Rayleigh crítico con el número de Biot y la relación de aspecto del cilindro.

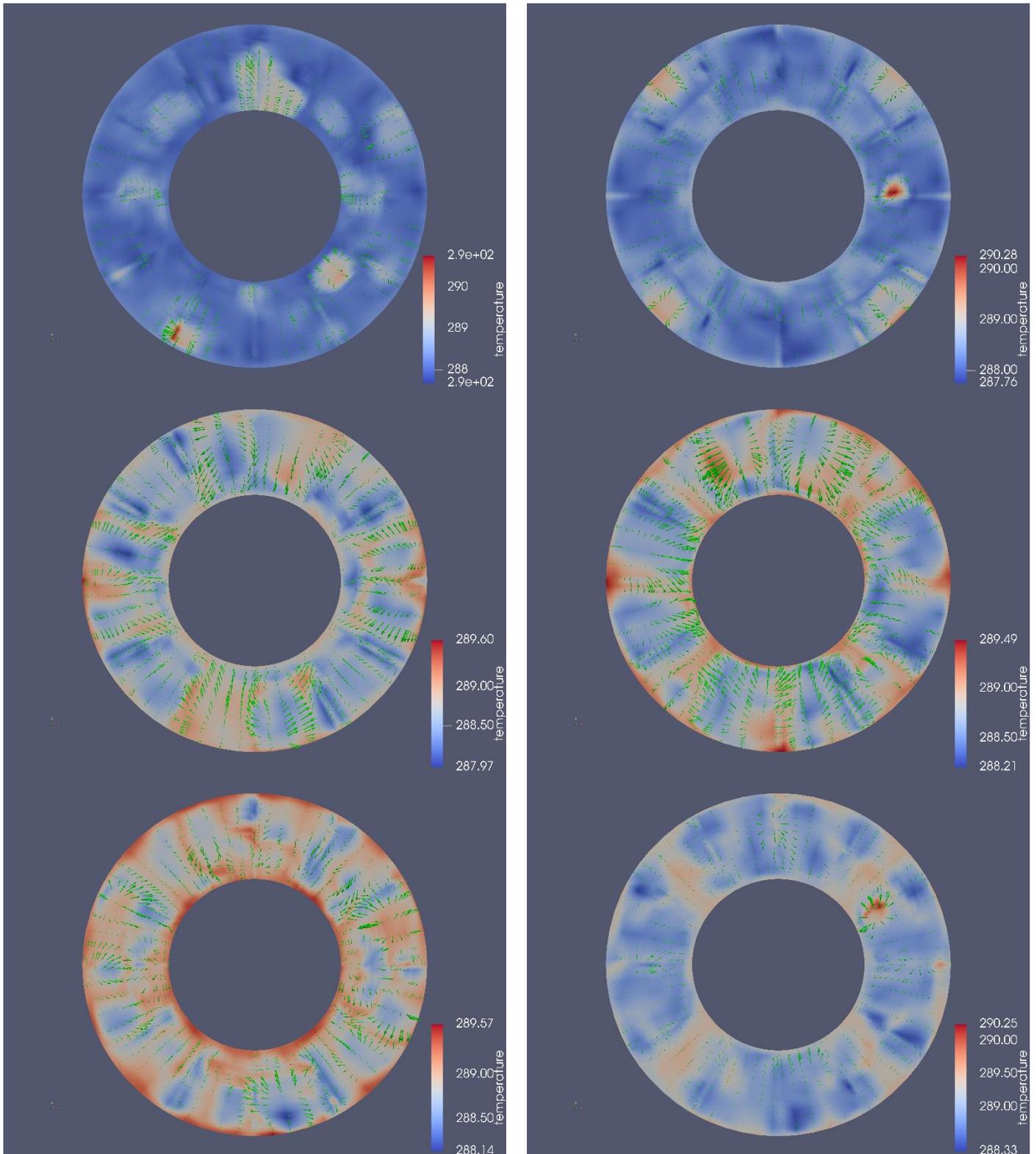


Figura 13. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 1, B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

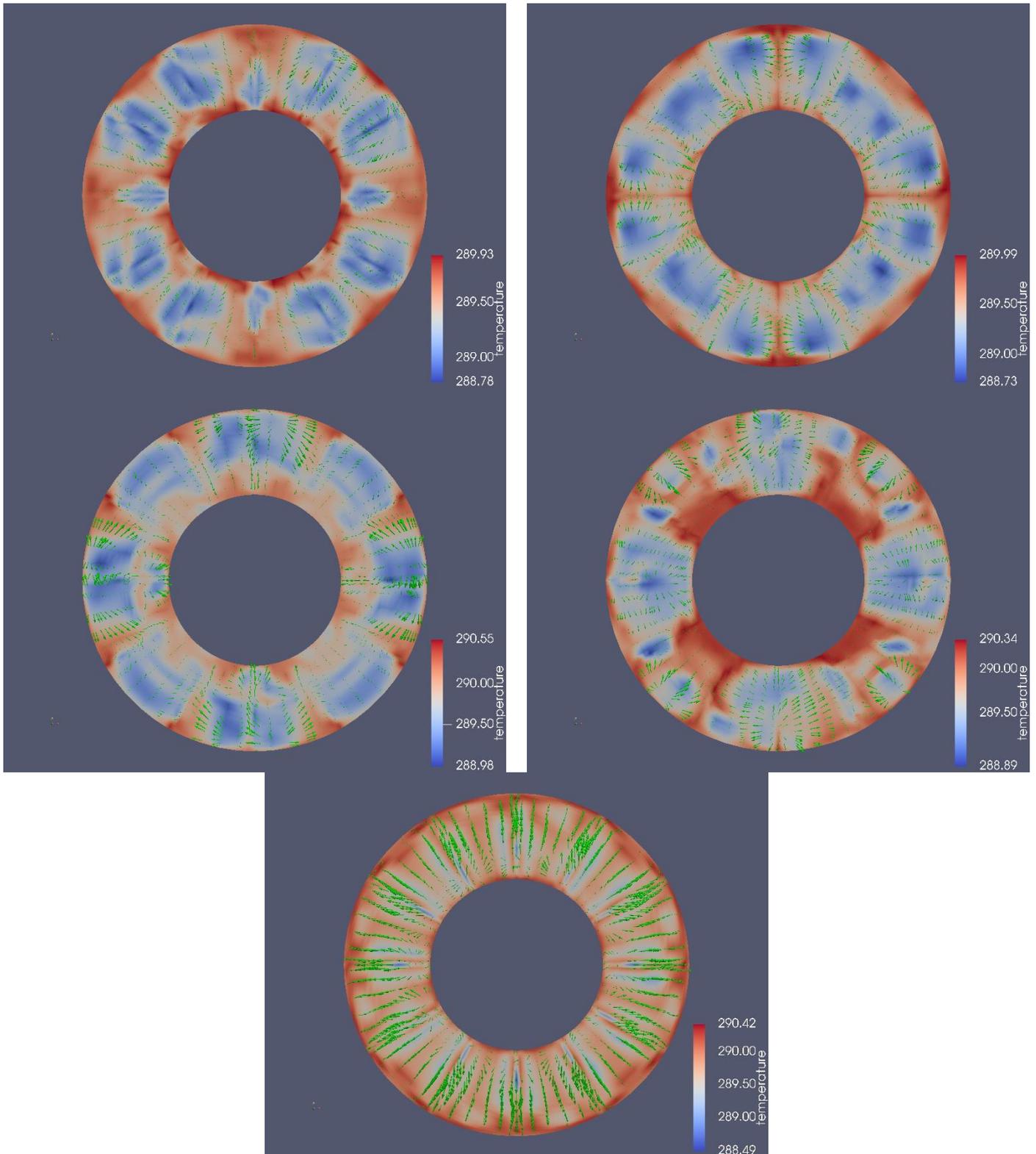


Figura 14. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 1, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

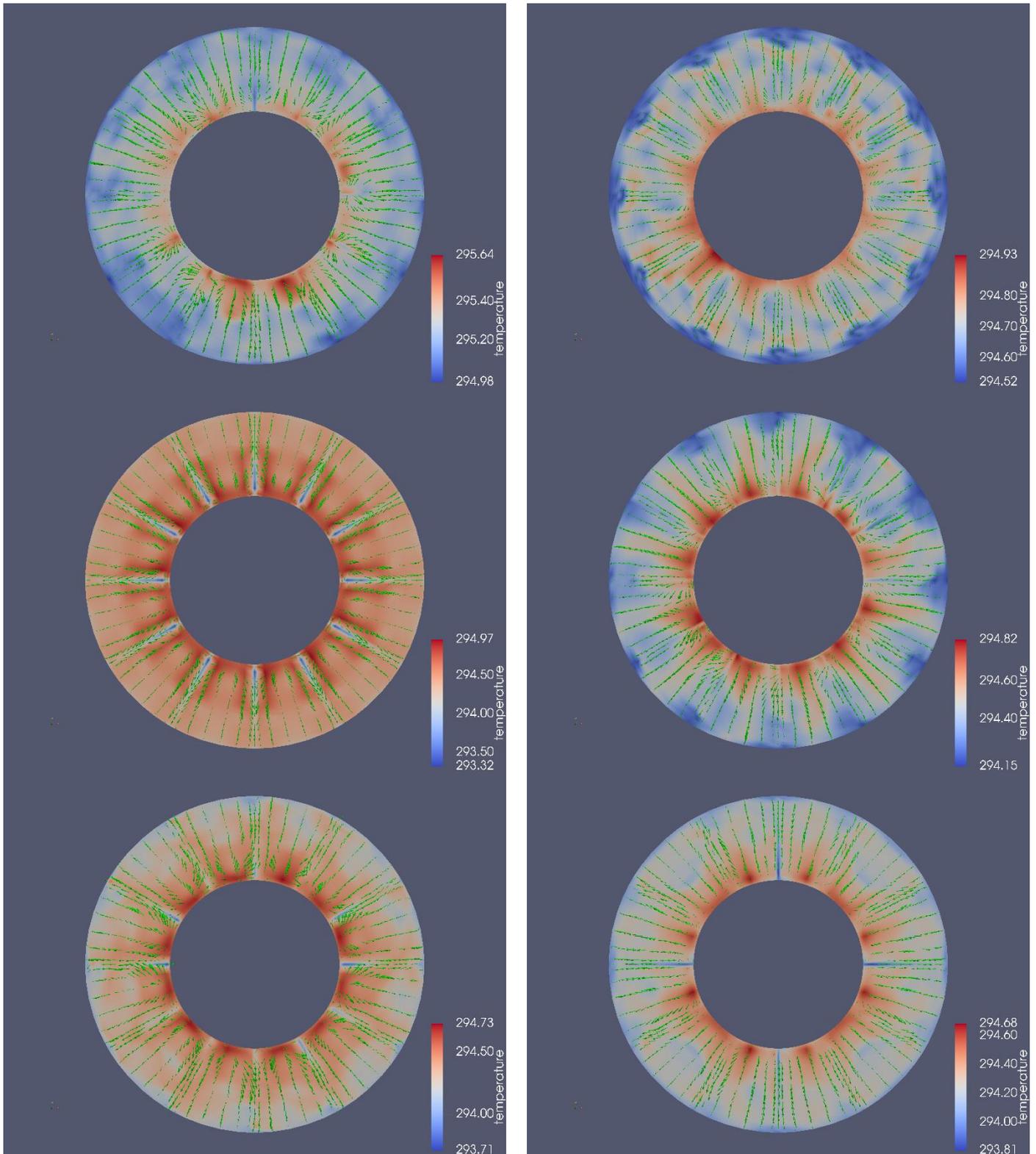


Figura 15. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 2$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

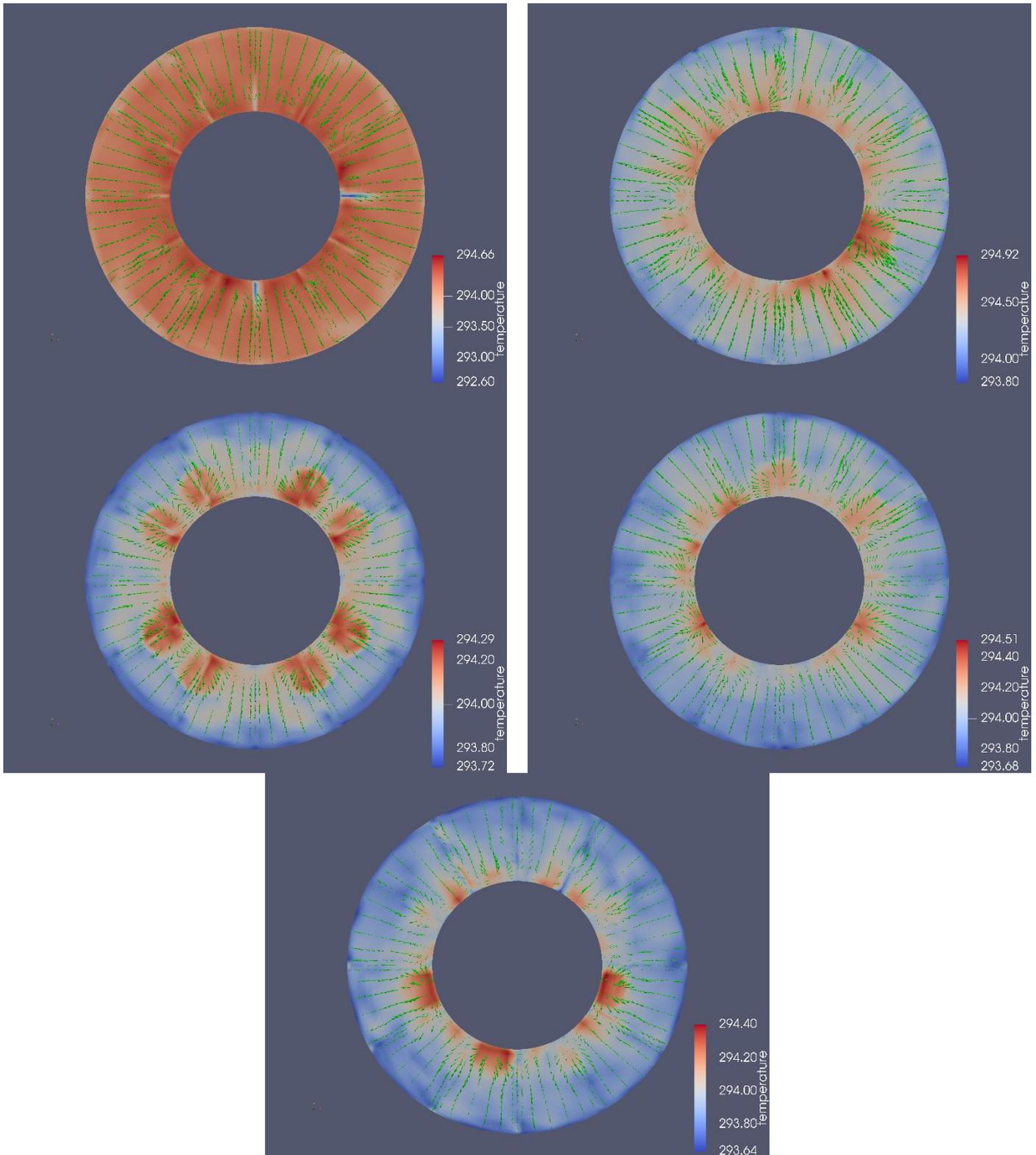


Figura 16. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 2$, $B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

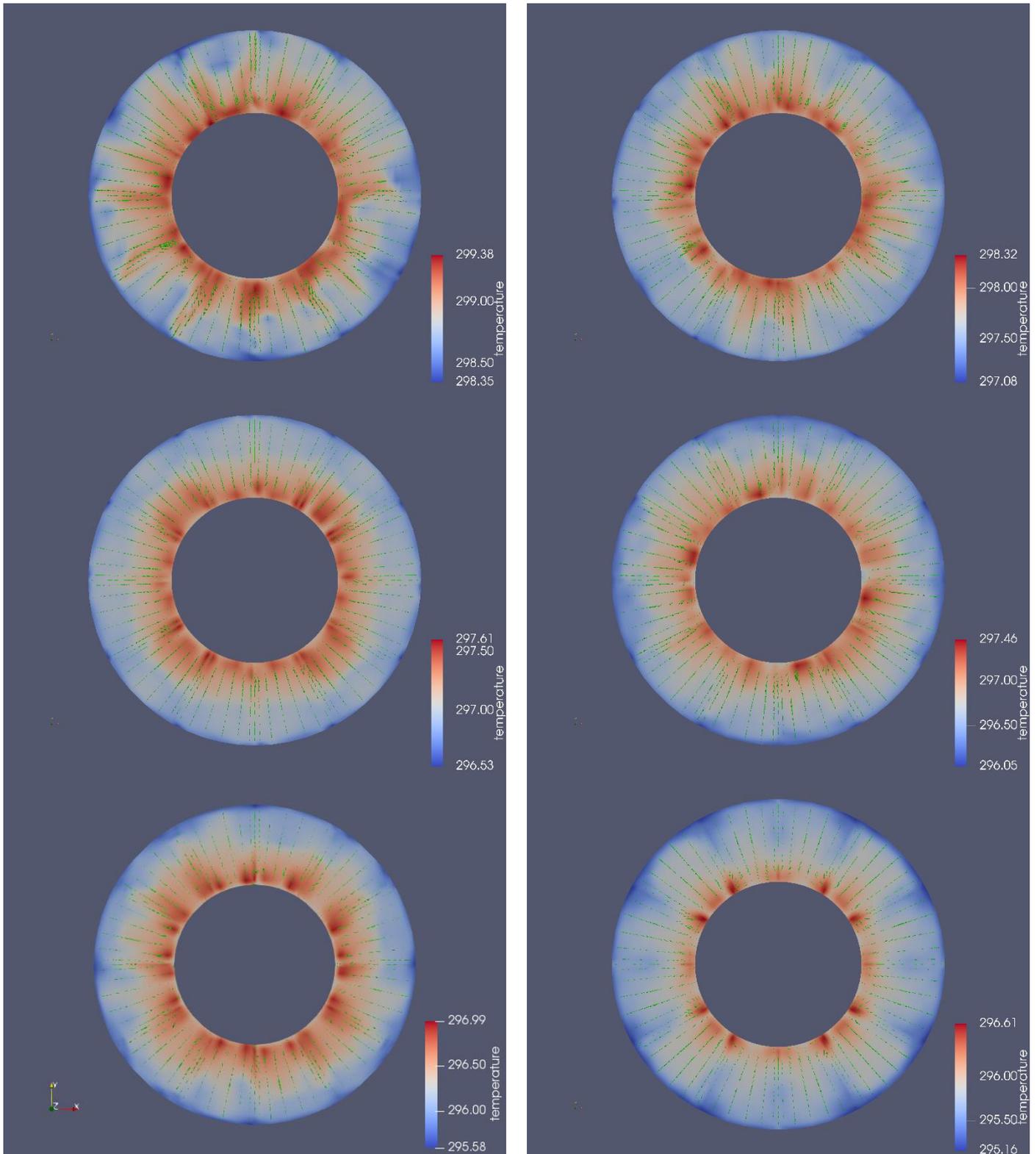


Figura 17. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 3$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

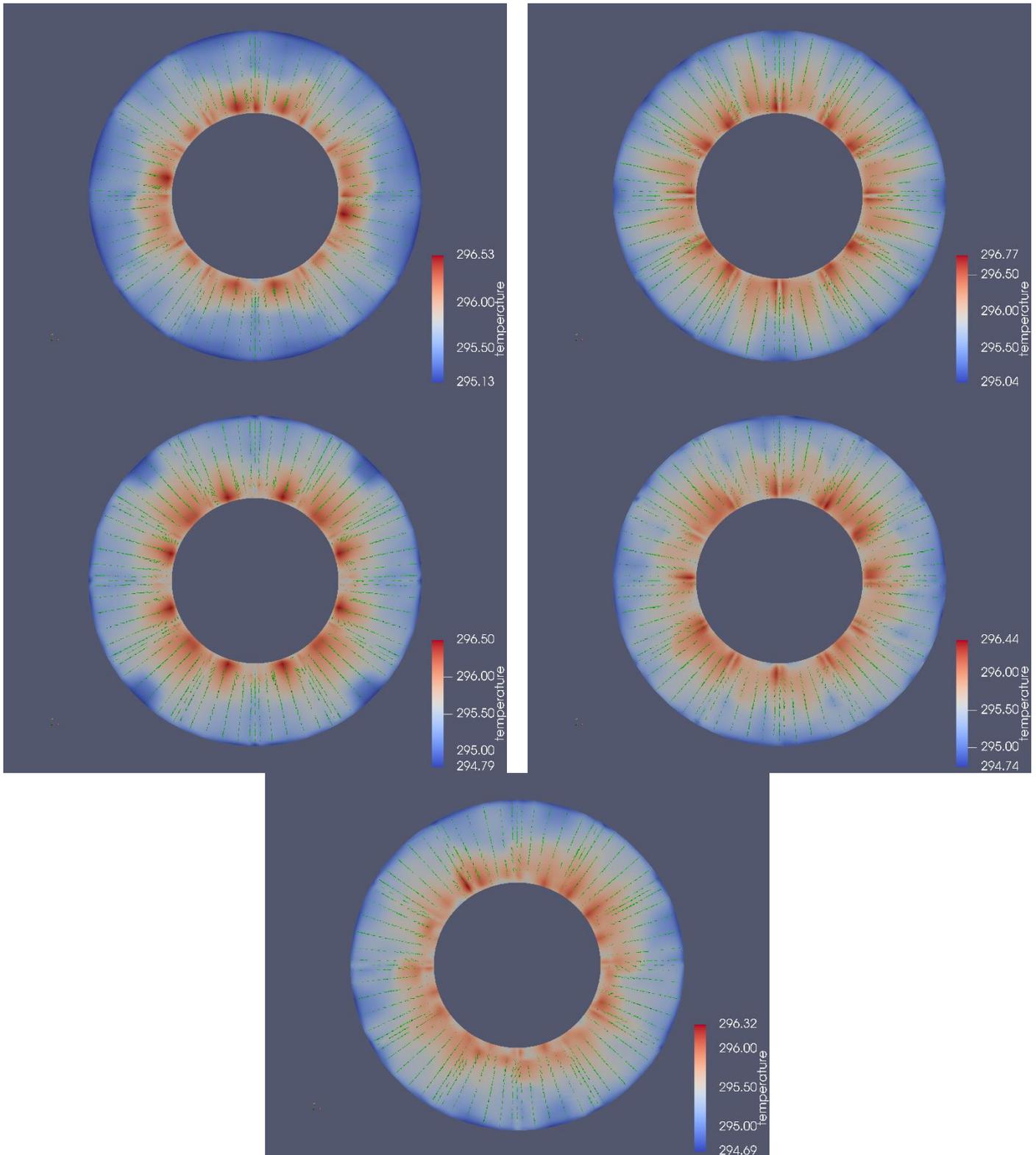


Figura 18. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 3, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

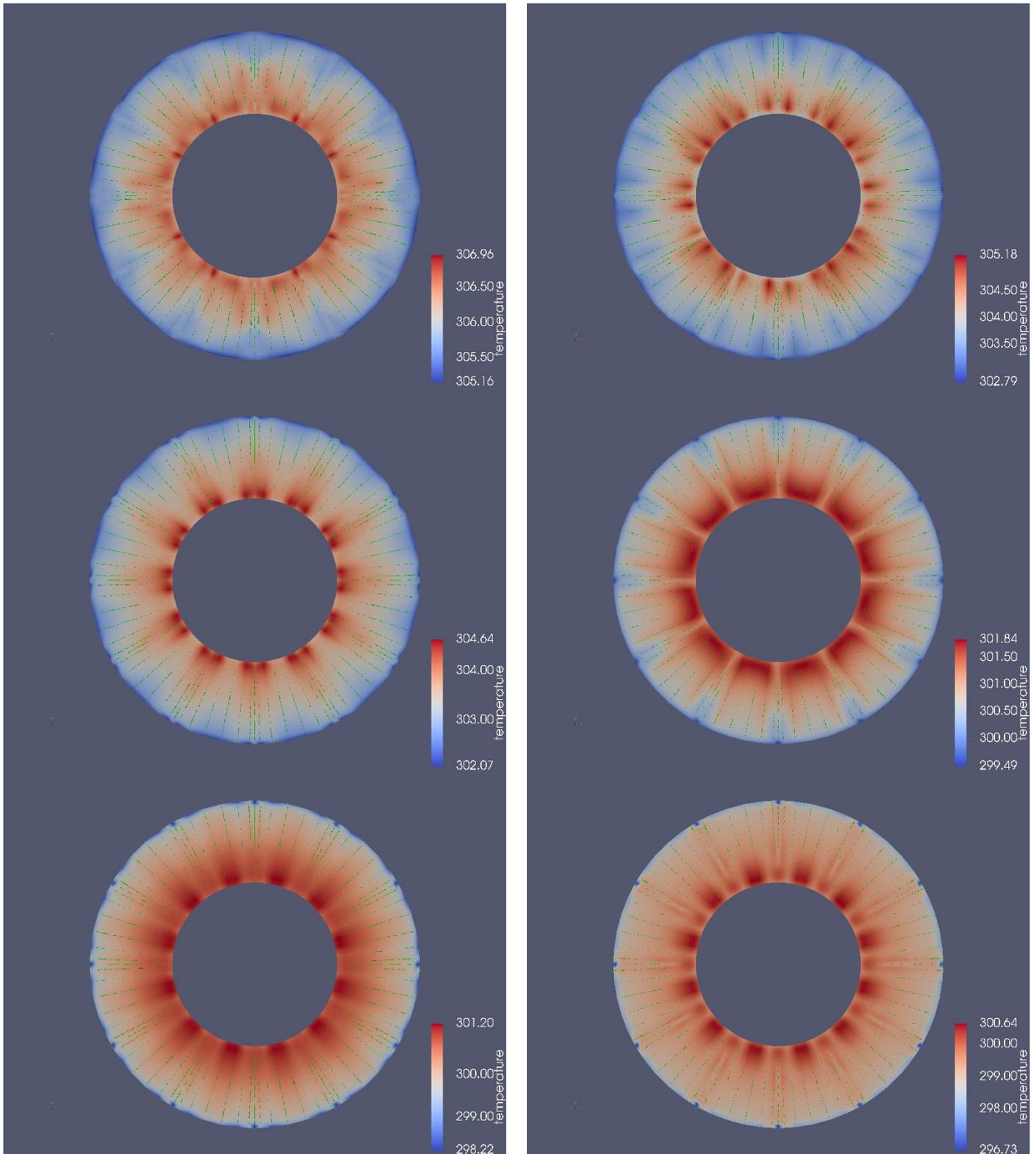


Figura 19. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 4$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

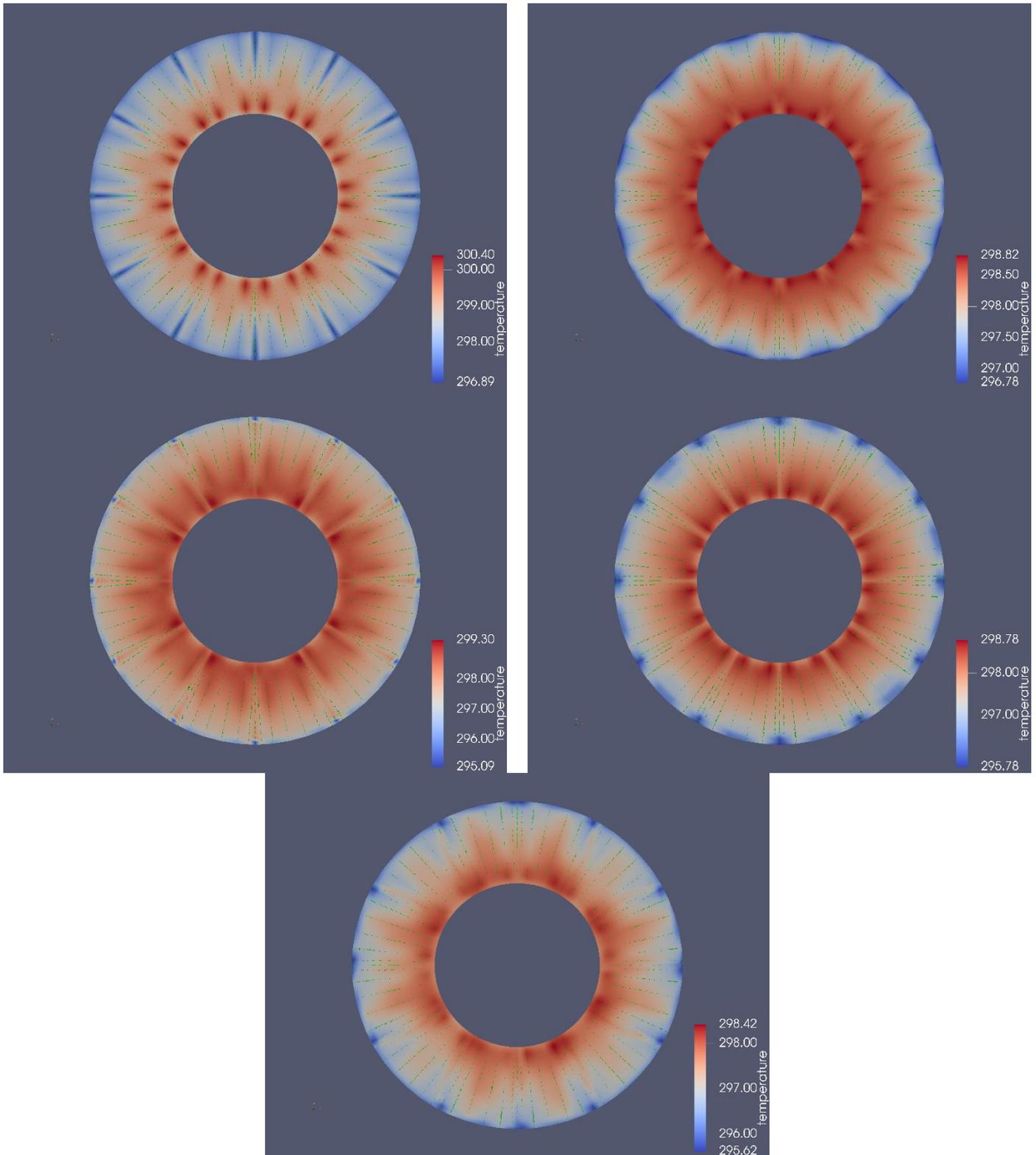


Figura 20. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 4, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

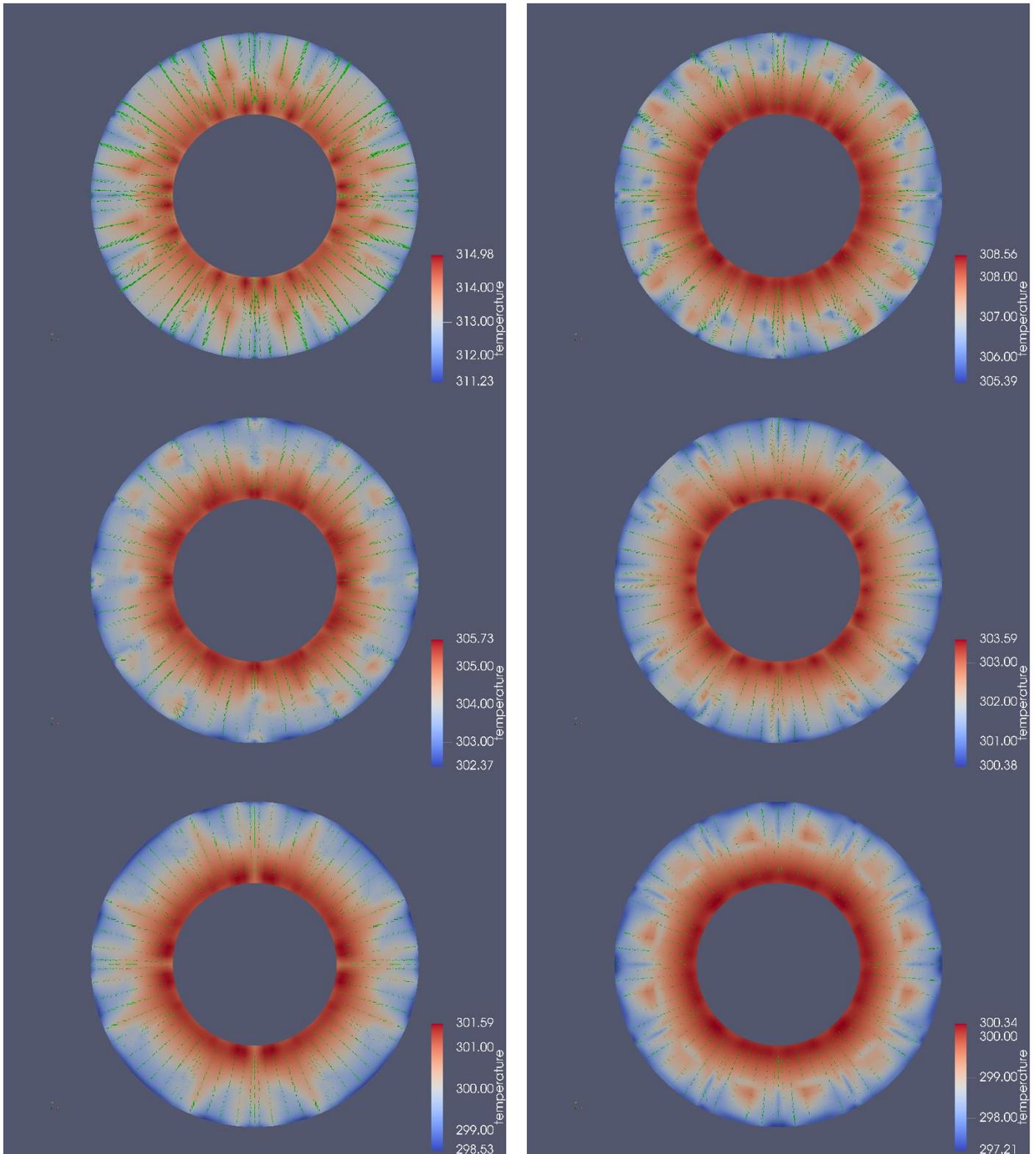


Figura 21. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 5$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

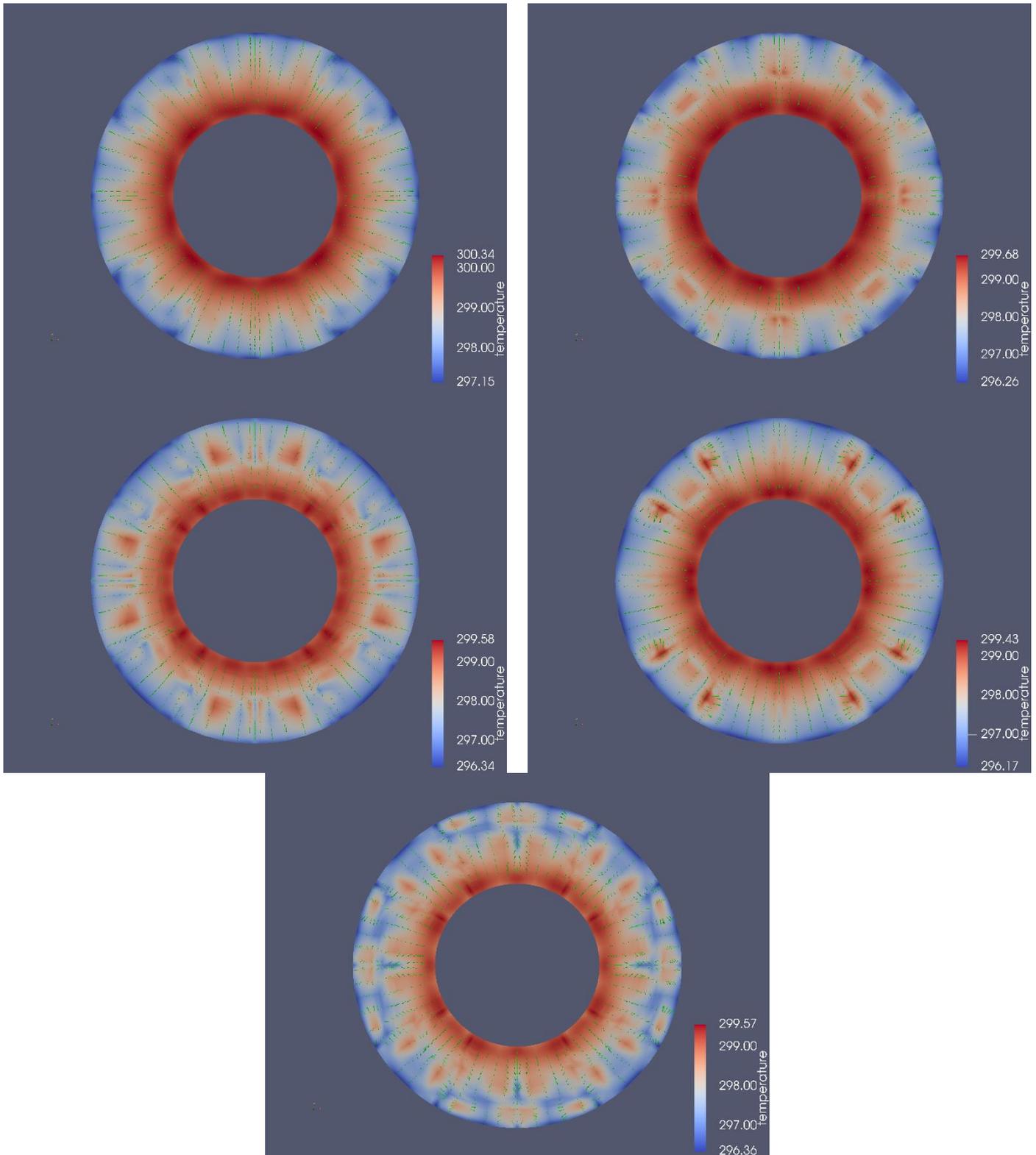


Figura 22. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 5, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

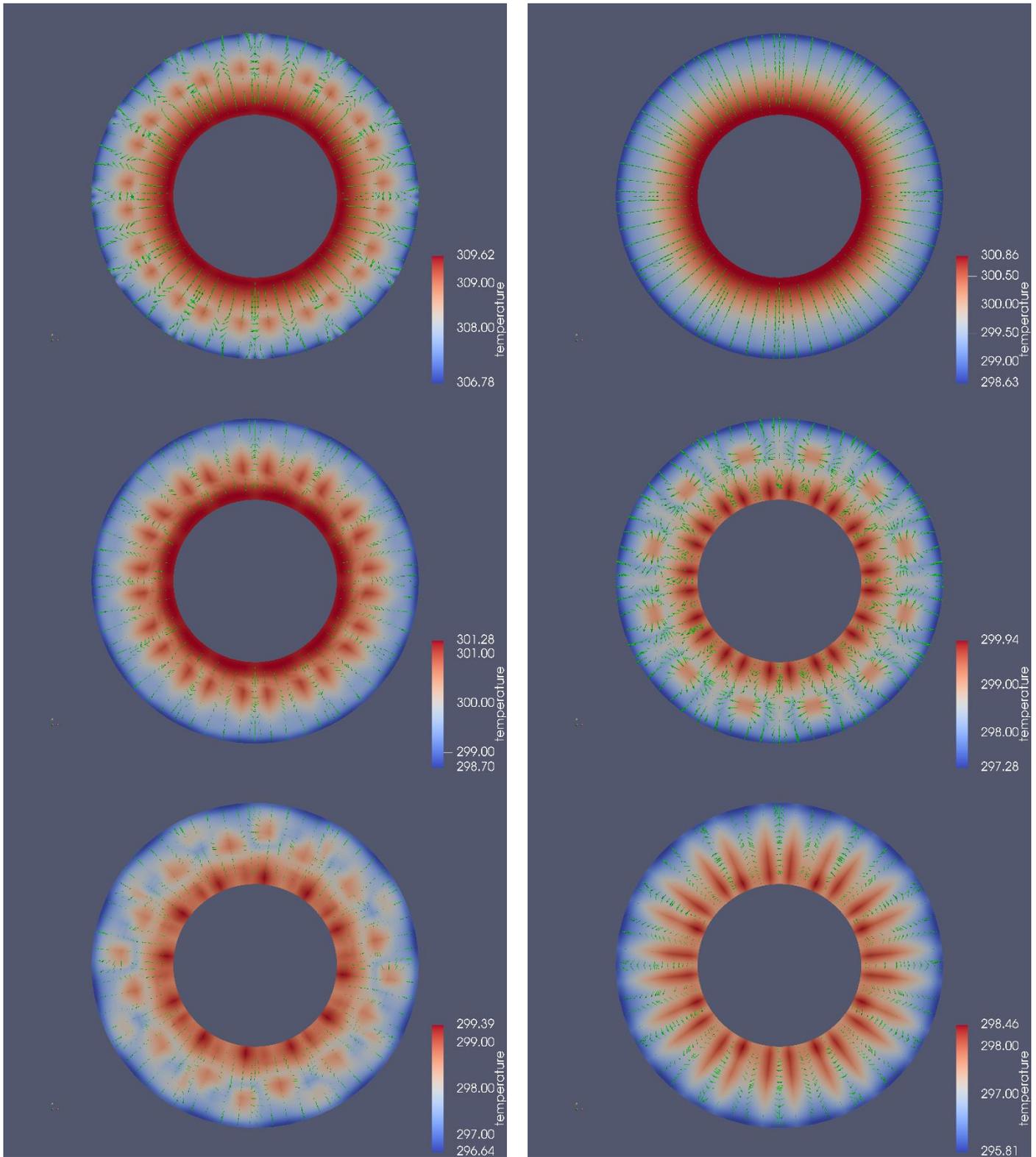


Figura 23. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 6$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

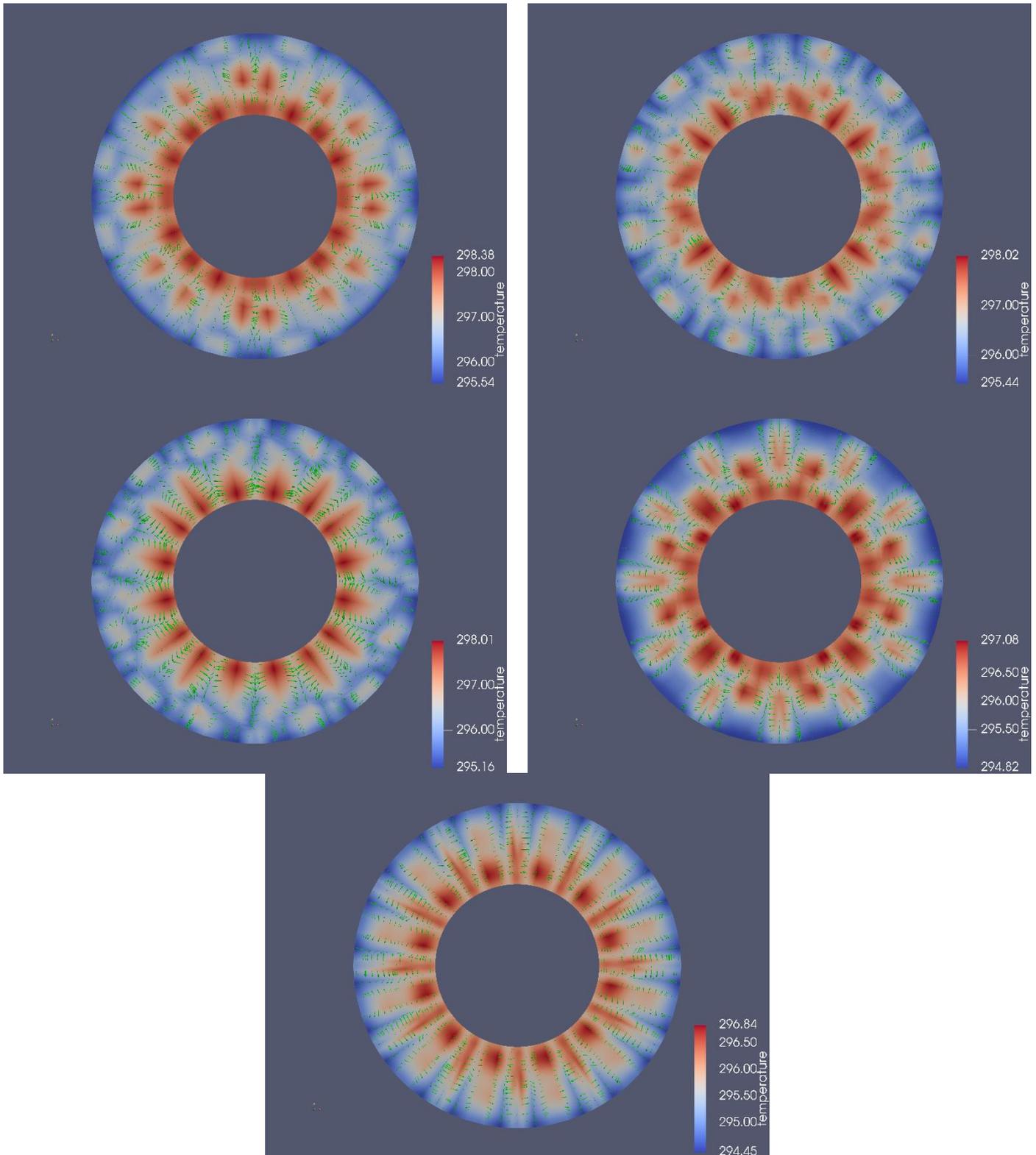


Figura 24. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 6, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

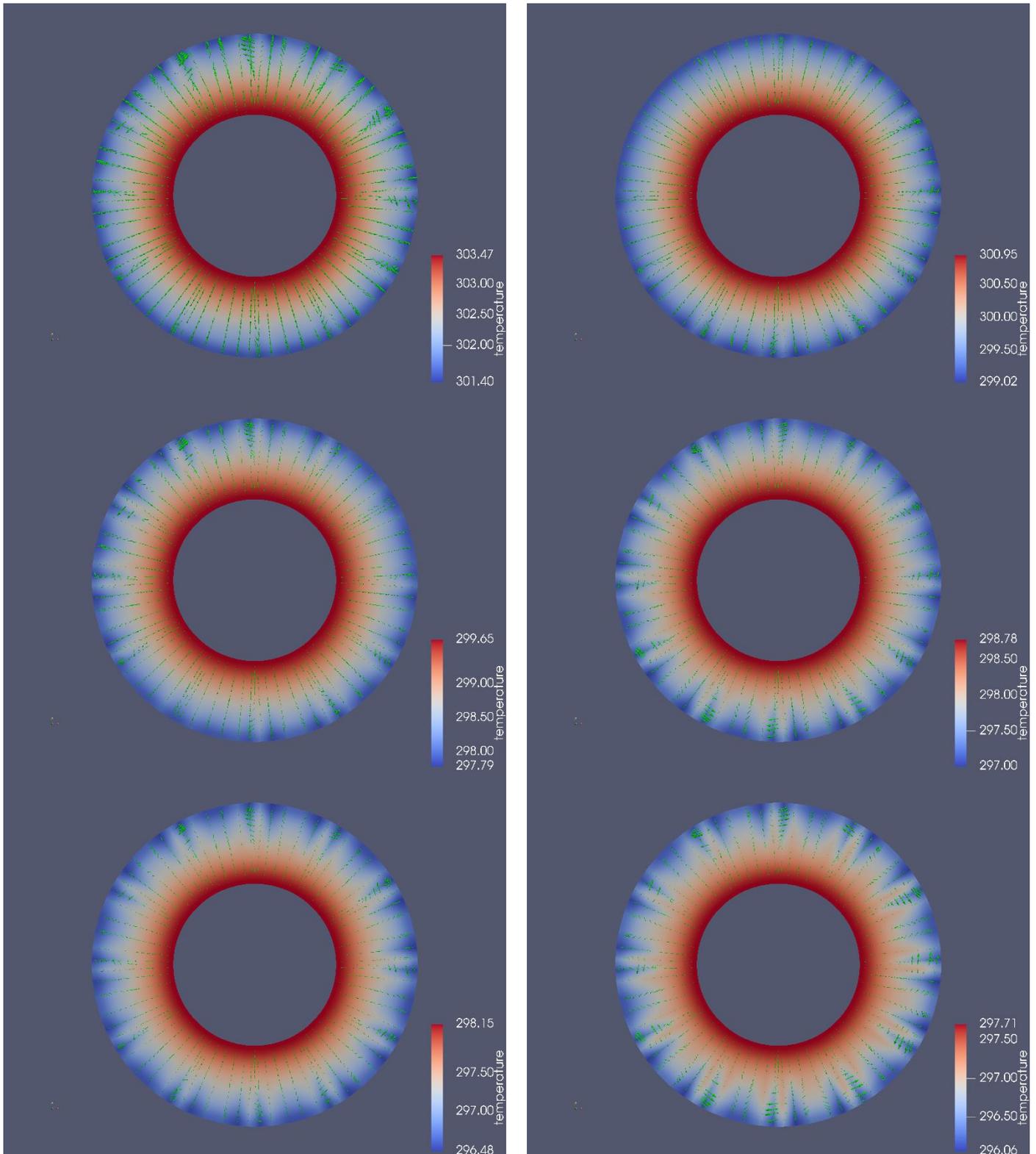


Figura 25.. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 7$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

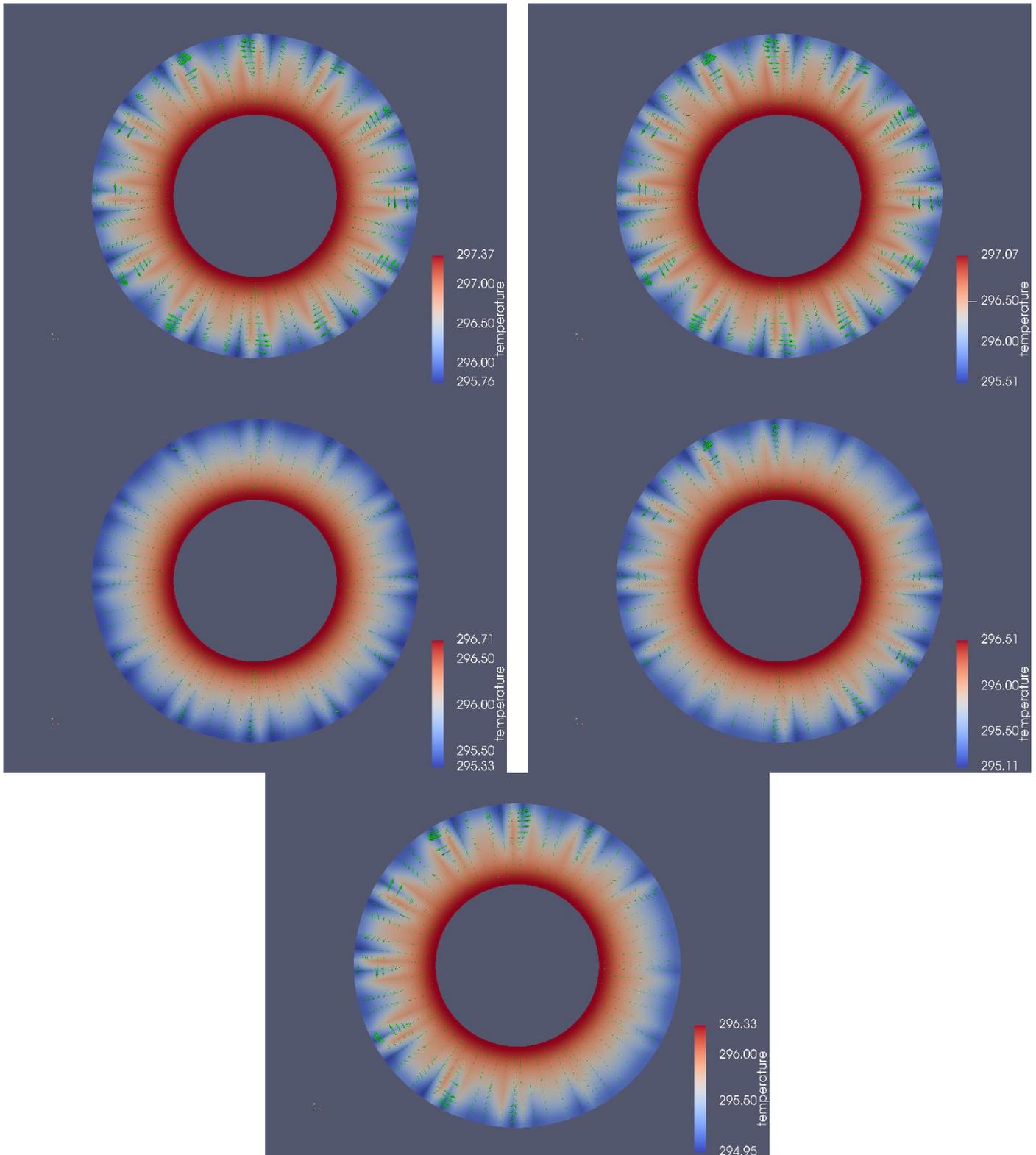


Figura 26. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 7, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

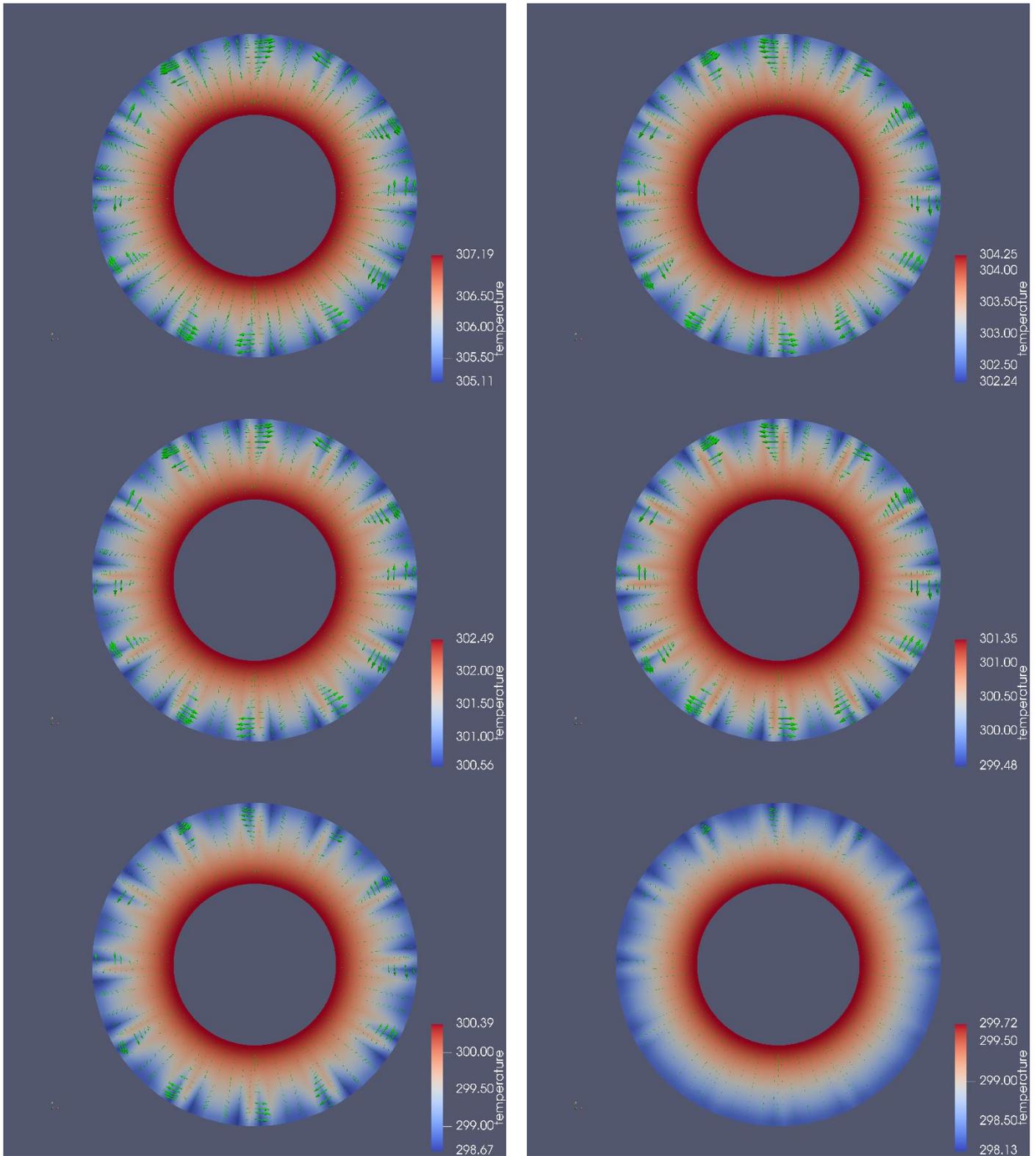


Figura 27. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 8$, $B = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ y 0.7 .

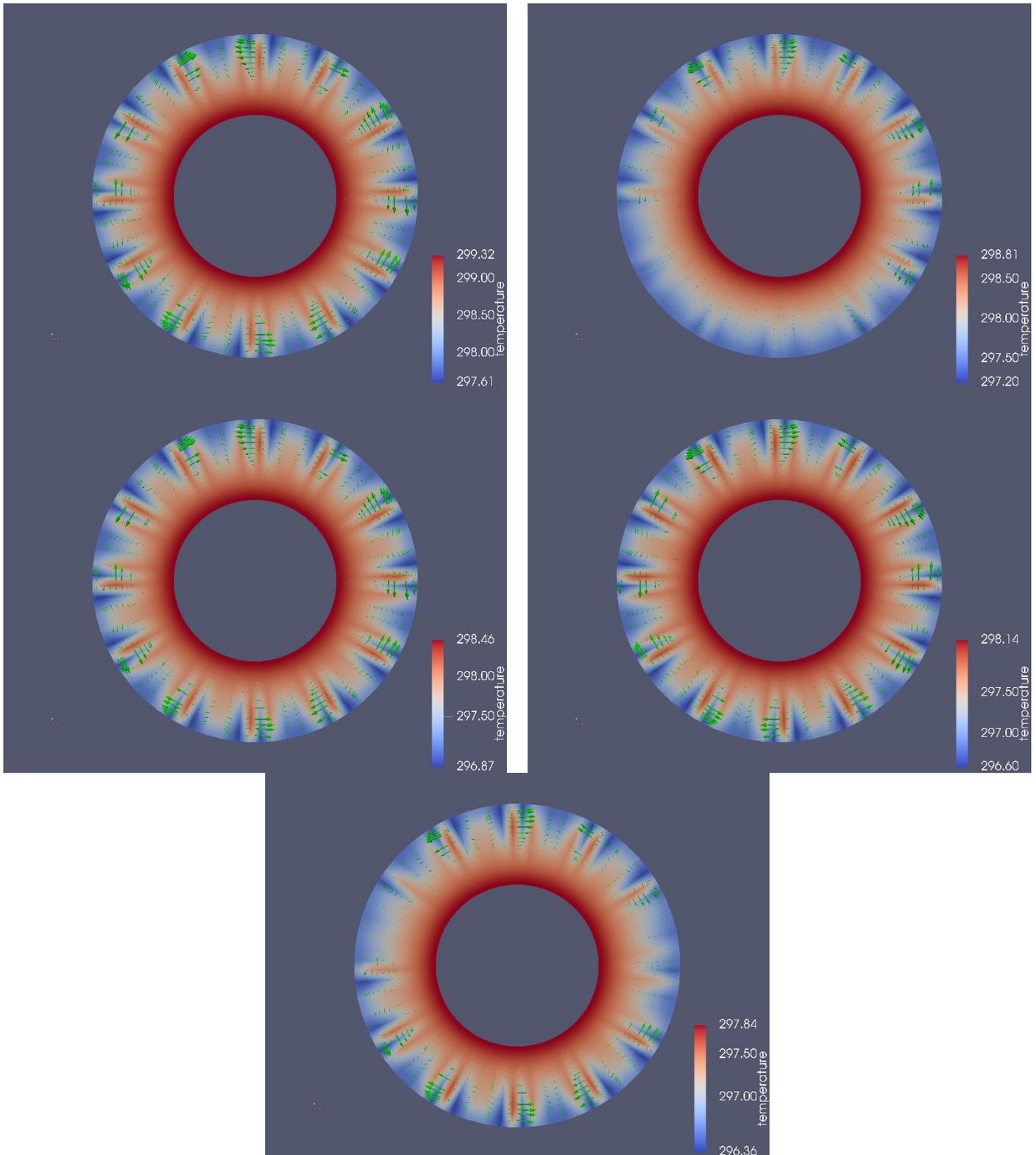


Figura 28. Resultados del campo de temperatura junto a vectores de velocidad en la capa superior para $\Gamma = 8, B = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1$ y 1.2 .

5. Discusión de los resultados

A continuación, se realizará un análisis de los resultados obtenidos discutiendo las principales ideas que se pueden extraer del estudio paramétrico y comparando los mismos con resultados estudios previos similares obtenidos mediante otros procedimientos, ya sea empleando otros códigos de computación o de forma experimental.

En primer lugar, observando únicamente los resultados obtenidos del estudio paramétrico realizado, los valores de Rayleigh crítico obtenidos para cada valor de relación de aspecto del problema y número de Biot, se extraen dos conclusiones. Una de ellas es que el número de Rayleigh crítico aumenta, de manera exponencial, a medida que la relación de aspecto del dominio cilíndrico disminuye, es decir al aproximarse la dimensión vertical a la longitudinal. Tal es así que, comparando por ejemplo los casos de relaciones de aspecto extremas, $\Gamma = 1$ y $\Gamma = 8$, el Rayleigh crítico en la primera es dos órdenes de magnitud mayor. Estos resultados concuerdan con los obtenidos por Hoyas *et al.* [14]. La justificación al incremento drástico en el Rayleigh crítico en relaciones de aspecto bajas se debe a la aparición de un único gran remolino en el centro del plano que produce una recirculación del flujo. Esto incrementa considerablemente la circulación de calor en todo el dominio cilíndrico. La segunda conclusión extraída de los resultados es que, al incrementar el número de Biot, el Rayleigh crítico del problema disminuye. Esta tendencia se da para todas las geometrías salvo cuando la relación de aspecto es la unidad. Probablemente los números de Rayleigh crítico para esta relación de aspecto no son todo lo precisos que deberían al mantenerse invariables independientemente del Biot. La causa más probable de esto es que el gradiente de temperatura, ΔT , aplicado para estos casos en el proceso iterativo fuera demasiado grande, por lo que la aparición de inestabilidades realmente sucede entre dos iteraciones y no se refleja hasta que realiza la segunda. El hecho de que el número de Rayleigh crítico disminuya al aumentar el número de Biot atiende al significado físico de este último. Al incrementar el número de Biot la transferencia de calor del fluido hacia al aire aumenta en relación a la conducción de calor en el seno del fluido, esto hace que el fluido presente una temperatura, y por tanto densidad, más heterogénea en todo el dominio. De esta manera las estructuras convectivas generadas son más proclives a desestabilizarse ante una perturbación. En caso contrario, al reducirse el número de Biot, la conducción en el seno del fluido aumenta en relación a la transferencia de calor hacia el aire, lo que hace que el fluido presente una temperatura más homogénea en el dominio y que los grandes remolinos generados sean más difíciles de desestabilizar.

Observando cómo afectan ambos parámetros al problema, se puede concluir que la relación de aspecto es mucho más influyente que el Biot, puesto que la variación del número de Rayleigh crítico con el primer parámetro alcanza hasta dos órdenes de magnitud, mientras que con el segundo no alcanza más de medio orden de magnitud. Otra conclusión a destacar es que parece ser que el número de Biot influye más en relaciones de aspecto

comprendidos entre 4 y 6. Cuanto más se aleja la relación de aspecto de ese rango, más se disipa el efecto del número de Biot.

Analizando las imágenes del campo de temperaturas en el plano $r - \phi$ se pueden identificar los tipos de estructuras que se forman una vez alcanzado el número de Rayleigh crítico y por tanto un estado inestable. Cabe decir en primer lugar que la mayoría de los casos obtenidos con el estudio paramétrico presentan estructuras que previamente han sido observadas en anteriores estudios de problemas similares. En general para valores de relación de aspecto menores $\Gamma < 5$, las estructuras formadas se podrían clasificar como ondas hidrotermales (HW), de acuerdo con los resultados obtenidos por Hoyas *et al* [9]. En este rango de relaciones no se puede concluir un efecto del número de Biot sobre las estructuras formadas. No obstante hay que comentar que para los casos con relación de aspecto $\Gamma = 1$ las estructuras formadas no presentan analogías con estudios previos. Esto se puede deber al hecho de haber utilizado un gradiente de temperatura ΔT excesivamente grande (debido a los resultados observados en el número de Rayleigh crítico obtenido), o a errores en la solución debido a una incorrecta programación.

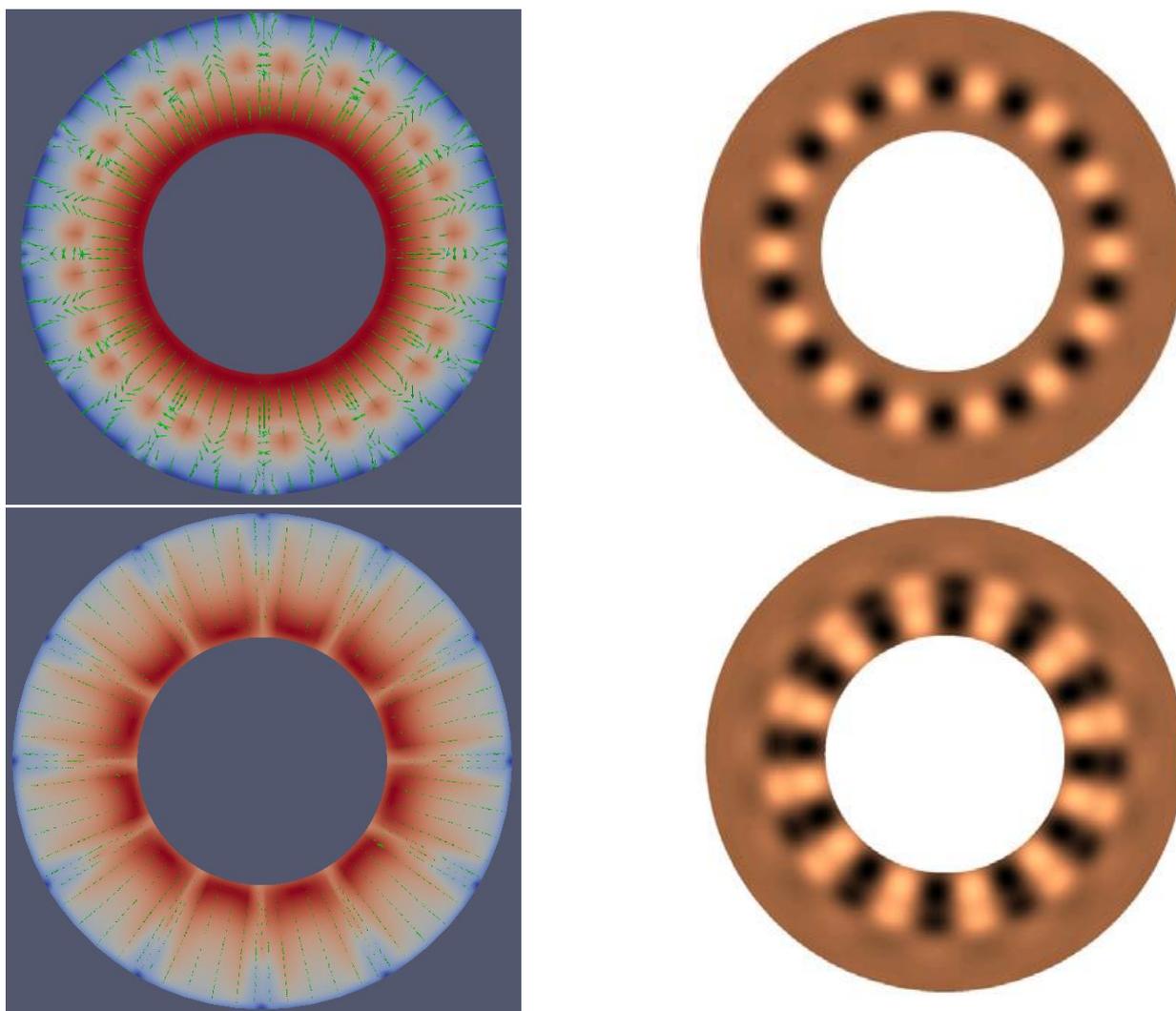


Figura 29. Comparación de estructuras generadas con resultados de [9]. Parte superior: rollos longitudinales, parte inferior ondas hidrotermales (HW).

Para relaciones de aspecto comprendidas entre 5 y 6 se observan estructuras que se pueden clasificar como ondas hidrotermales (HW) o rollos longitudinales (LR), en ocasiones parecen ser combinaciones de ambas. Se observa un efecto del número de Biot en las estructuras formadas en estos resultados, ya que cuanto mayor es este, mayor es el número de rollos longitudinales presentes en las zonas alejadas de la pared interior. Cabe mencionar que algunos de estos rollos longitudinales se pueden formar por la interacción de otros rollos aparecidos antes. En el caso de $\Gamma = 6, B = 1.2$ los rollos longitudinales generados desde la pared interior parecen crecer hacia la pared exterior. Esto se puede deber a que es tal el número de rollos longitudinales exteriores, que estos se acaban juntando entre sí y con los interiores.

En los resultados de relaciones de aspecto $\Gamma = 7$ y 8 no se puede determinar si las estructuras principalmente son ondas hidrotermales o rollos longitudinales que se extienden desde la pared interior a la exterior. Además en algunos de estos casos ($\Gamma = 7 B = 0.3$ y $\Gamma = 8 B = 0.7$) aparecen zonas que rompen totalmente la periodicidad y se asemejan a soluciones estables no críticas. Esto puede haber sido causado por una errónea implementación del código utilizado. En ninguno de los casos obtenidos se dieron rollos estacionarios.

6. Conclusiones

6.1 Sobre el trabajo realizado

Desarrollando el presente trabajo de fin de máster se ha realizado un estudio de estabilidad en un problema que presenta el fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard. Para ello se ha llevado a cabo un estudio paramétrico de la influencia de la relación de aspecto del dominio y el número de Biot del fluido sobre el número de Rayleigh crítico, el cual determina el comienzo de un estado inestable en el problema. El estudio se ha realizado empleando el código de mecánica de fluidos computacional Nek5000. Para ello se ha aprendido a utilizar este software, programar y lanzar un caso, mediante el estudio de su documentación y la ejecución de algunos casos de prueba. El caso programado y lanzado con Nek5000 consistía en un dominio formado por cilindros concéntricos, de paredes laterales adiabáticas, al que se aplica un gradiente de temperatura radial en su base y cuya capa superior estaba expuesta al aire libre.

El estudio paramétrico consistió en 88 simulaciones que barrieron relaciones de aspecto comprendidas entre valores de 1 y 8 y números de Biot entre 0.2 y 1.2. Tras el análisis de los resultados se concluyó que la relación de aspecto ejerce una gran influencia en la estabilidad del problema, pudiéndose incrementar el Rayleigh crítico en varios órdenes de magnitud para los casos con menor relación de aspecto en comparación con relaciones de aspecto grandes. El número de Biot, en comparación, resultó tener una influencia negligible.

Las estructuras formadas en los casos estudiados se pudieron relacionar la mayoría con estructuras identificadas en estudios anteriores. No obstante para $\Gamma = 1,7$ y 8 se observaron casos cuya solución en el campo de temperaturas de la capa superior indica que esta es errónea, debiéndose revisar el código utilizado en estos casos.

Como conclusión se puede afirmar que se ha alcanzado el conocimiento suficiente sobre el software Nek5000 como para programar y ejecutar casos de forma totalmente autónoma. Este era uno de los principales objetivos del trabajo, y su consecución garantiza que en el futuro este software de gran capacidad en la industria aeronáutica pueda utilizarse para resolver más problemas y contribuir a un mayor conocimiento en este sector. Además, se ha profundizado en la comprensión del fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard, proceso de convección de vital importancia en algunas aplicaciones aeroespaciales, entendiendo mejor cómo la geometría y el número de Biot afectan a la estabilidad del mismo.

6.2 Propuestas futuras

Como propuestas futuras relacionadas con el trabajo realizado se propone una revisión de los resultados obtenidos para relaciones de aspecto $\Gamma = 1$ e incluso menores, que ayuden a comprender la naturaleza del fluido en estos casos. Además se podría refinar el proceso iterativo llevado a cabo para realizar el estudio paramétrico, reduciendo la diferencia entre los gradientes de temperatura aplicados en cada iteración y así obtener números de Rayleigh crítico más precisos.

Otros estudios que también podrían resultar interesantes sería observar el efecto de las propiedades físicas del fluido y la gravedad en la estabilidad del problema. Para ello se propone un estudio paramétrico modificando los parámetros de gravedad y número de Prandtl. Por último, partiendo de las ecuaciones que modelan el fenómeno de la convección Rayleigh-Bénard, se podrían realizar ciertas modificaciones al código para incluir en las condiciones de contorno los términos de tensión superficial en la capa superior del dominio. De esta manera se podría estudiar un problema de Bénard-Marangoni.

Documento II: Pliego de condiciones

1. Ordenanza general de seguridad e higiene en el trabajo.

De acuerdo con la normativa establecida en la ordenanza general de seguridad e higiene en el trabajo descrita en el documento BOE-A-1971-380 publicado el 16 de marzo de 1971, para la realización de este proyecto han de tenerse en cuenta los artículos expuestos a continuación.

Artículo 1. Ámbito de aplicación.

A las disposiciones de esta Ordenanza se ajustará la protección obligatoria mínima de las personas comprendidas en el ámbito del Sistema de la Seguridad Social, a fin de prevenir accidentes y enfermedades profesionales y de lograr las mejores condiciones de higiene y bienestar en los centros y puestos de trabajo en que dichas personas desarrollen sus actividades.

Artículo 11. Obligaciones y derechos de los trabajadores.

Incumbe a los trabajadores la obligación de cooperar en la prevención de riesgos profesionales en la Empresa y el mantenimiento de la máxima higiene en la misma, a cuyos fines deberán cumplir fielmente los preceptos de esta Ordenanza y sus instrucciones complementarias, así como las órdenes e instrucciones que a tales efectos les sean dados por sus superiores.

Los trabajadores, expresamente, están obligados a:

A) Recibir las enseñanzas sobre Seguridad e Higiene y sobre salvamento y socorrismo en los centros de trabajo que les sean facilitadas por la Empresa o en las Instituciones del Plan Nacional.

B) Usar correctamente los medios de protección personal y cuidar de su perfecto estado y conservación.

C) Dar cuenta inmediata a sus superiores de las averías y deficiencias que puedan ocasionar peligros en cualquier centro o puesto de trabajo.

D) Cuidar y mantener su higiene personal, en evitación de enfermedades contagiosas o de molestias a sus compañeros de trabajo.

E) Someterse a los reconocimientos médicos preceptivos y a las vacunaciones o inmunizaciones ordenadas por las Autoridades Sanitarias competentes o por el Servicio Médico de Empresa.

F) No introducir bebidas u otras sustancias no autorizadas en los centros de trabajo, ni presentarse o permanecer en los mismos en estado de embriaguez o de cualquier otro género de intoxicación.

G) Cooperar en la extinción de siniestros y en el salvamento de las víctimas de accidentes de trabajo en las condiciones que, en cada caso, fueren racionalmente exigibles.

Todo trabajador, después de solicitar de su inmediato superior los medios de protección personal de carácter preceptivo para la realización de su trabajo, queda facultado para demorar la ejecución de éste, en tanto no le sean facilitados dichos medios, si bien deberá dar cuenta del hecho al Comité de Seguridad e Higiene o a uno de sus componentes, sin perjuicio, además, de ponerlo en conocimiento de la Inspección Provincial de Trabajo.

Artículo 13. Seguridad estructural.

1. Todos los edificios, permanentes o provisionales, serán de construcción segura y firme para evitar riesgos de desplome y los derivados de los agentes atmosféricos.

2. Los cimientos, pisos y demás elementos de los edificios ofrecerán resistencia suficiente para sostener y suspender con seguridad las cargas para los que han sido calculados.

3. Se indicará por medio de rótulos o inscripciones las cargas que los locales puedan soportar o suspender, quedando prohibido sobrecargar los pisos y plantas de los edificios.

Artículo 14. Superficie y cubicación.

1. Los locales de trabajo reunirán las siguientes condiciones mínimas:

a) Tres metros de altura desde el piso al techo.

b) Dos metros cuadrados de superficie por cada trabajador.

c) Diez metros cúbicos por cada trabajador.

2. No obstante, en los establecimientos comerciales, de servicios y locales destinados a oficinas y despachos la altura a que se refiere el apartado a) del número anterior podrá

quedar reducida hasta 2,50 metros, pero respetando la cubicación por trabajador que se establece en el apartado c), y siempre que se renueve el aire suficientemente.

3. Para el cálculo de la superficie y volumen no se tendrán en cuenta los espacios ocupados por máquinas, aparatos, instalaciones y materiales.

Artículo 15. Suelos, techos y paredes.

1. El pavimento constituirá un conjunto homogéneo, llano y liso sin soluciones de continuidad; será de material consistente, no resbaladizo o susceptible de serlo con el uso y de fácil limpieza.

Estará al mismo nivel, y de no ser así, se salvarán las diferencias de altura por rampas de pendiente no superior al 10 por 100.

2. Las paredes serán lisas, guarnecidas o pintadas en tonos claros y susceptibles de ser lavadas o blanqueadas.

3. Los techos deberán reunir las condiciones suficientes para resguardar a los trabajadores de las inclemencias del tiempo.

Si han de soportar o suspender cargas deberán reunir las condiciones que se establecen para los pisos en el artículo 13.

Artículo 25. Iluminación.— Disposiciones generales.

1. Todos los lugares de trabajo o tránsito tendrán iluminación natural, artificial o mixta apropiada a las operaciones que se ejecuten.

2. Siempre que sea posible se empleará la iluminación natural.

3. Se intensificará la iluminación de máquinas peligrosas, lugares de tránsito con riesgo de caídas, escaleras y salidas de urgencia.

4. Se deberá graduar la luz en los lugares de acceso a zonas de distinta intensidad luminosa.

Artículo 29. Iluminación de emergencia.

En todos los centros de trabajo se dispondrá de medios de iluminación de emergencia adecuados a las dimensiones de los locales y número de trabajadores ocupados simultáneamente, capaz de mantener al menos durante una hora, una intensidad de cinco lux, y su fuente de energía será independiente del sistema normal de iluminación.

Artículo 30. Ventilación, temperatura y humedad.

1. En los locales de trabajo y sus anexos se mantendrán, por medios naturales o artificiales, condiciones atmosféricas adecuadas, evitando el aire viciado, exceso de calor y frío, humedad o sequía y los olores desagradables.

2. Las emanaciones de polvo, fibras, humos, gases, vapores o neblinas, desprendidos en locales de trabajo, serán extraídos, en lo posible, en su lugar de origen, evitando su difusión por la atmósfera.

3. En ningún caso el anhídrido carbónico o ambiental podrá sobrepasar la proporción de 50/10.000, y el monóxido de carbono, la de 1/10.000.

Se prohíbe emplear braseros, salamandras, sistemas de calor por fuego libre, salvo a la intemperie y siempre que no impliquen riesgo de incendio o explosión.

4. En los locales de trabajo cerrados, el suministro de aire fresco y limpio por hora y trabajador será, al menos, de 30 a 50 metros cúbicos, salvo que se efectúe una renovación total del aire varias veces por hora, no inferior a seis veces para trabajos sedentarios ni diez veces para trabajos que exijan esfuerzo físico superior al normal.

5. La circulación de aire en locales cerrados se acondicionará de modo que los trabajadores no estén expuestos a corrientes molestas y que la velocidad del aire no exceda de 15 metros por minuto con temperatura normal, ni de 45 metros por minuto en ambientes muy calurosos.

6. En los centros de trabajo expuestos a altas y bajas temperaturas serán evitadas las variaciones bruscas por el medio más eficaz.

Cuando la temperatura sea extremadamente distinta entre los lugares de trabajo, deberán existir locales de paso para que los operarios se adapten gradualmente a unas y otras.

7. Se fijan como límites normales de temperatura y humedad en locales y para los distintos trabajos, siempre que el procedimiento de fabricación lo permita, los siguientes:

Para trabajos sedentarios: De 17 a 22 grados centígrados.

Para trabajos ordinarios: De 15 a 18 grados centígrados.

Para trabajos que exijan acusado esfuerzo muscular: De 12 a 15 grados centígrados.

La humedad relativa de la atmósfera oscilará del 40 al 60 por 100, salvo en instalaciones en que haya peligro por generarse electricidad estática, que deberá estar por encima del 50 por 100.

8. Las instalaciones generadoras de calor o frío se situarán con la debida separación de los locales de trabajo para evitar en ellos peligros de incendio o explosión, el desprendimiento de gases nocivos, irradiaciones directas de calor o frío y las corrientes de aire perjudiciales al trabajador.

9. Todos los trabajadores estarán debidamente protegidos contra las irradiaciones directas y excesivas de calor.

10. En los trabajos que hayan de realizarse en locales cerrados con extremado frío o calor se limitará la permanencia de los operarios estableciendo, en su caso, los turnos adecuados.

Artículo 31. Ruidos, vibraciones y trepidaciones.

1. Los ruidos y vibraciones se evitarán o reducirán en lo posible en su foco de origen, tratando de aminorar su propagación en los locales de trabajo.

2. El anclaje de máquinas y aparatos que produzcan ruidos, vibraciones o trepidaciones, se realizará con las técnicas más eficaces a fin de lograr su óptimo equilibrio estático y dinámico, tales como bancadas cuyo peso sea superior a 1,5 a 2,5 veces al de la máquina que soportan, por aislamiento de la estructura general o por otros recursos técnicos.

3. Las máquinas que produzcan ruidos o vibraciones molestas se aislarán adecuadamente y en el recinto de aquéllas sólo trabajará el personal necesario para su mantenimiento, durante el tiempo indispensable.

4. Se prohíbe instalar máquinas o aparatos ruidosos adosados a paredes o columnas de las que distarán como mínimo: 0,70 metros de los tabiques medianeros y un metro de las paredes exteriores o columnas.

5. Se extremará el cuidado y mantenimiento de las máquinas o aparatos que produzcan vibraciones molestas o peligrosas a los trabajadores y muy especialmente los órganos móviles y los dispositivos de transmisión de movimiento.

6. Los conductos con circulación forzada de líquidos o gases, especialmente cuando estén conectados directamente con máquinas que tengan órganos en movimiento, estarán provistos de dispositivos que impidan la transmisión de las vibraciones que generan aquéllas.

7. Estos conductos se aislarán con materiales absorbentes en sus anclajes y en las partes de su recorrido que atraviesen muros o tabiques.

8. El control de ruidos agresivos en los centros de trabajo no se limitará al aislamiento del foco que los produce, sino que también deberán adoptarse las prevenciones técnicas

necesarias para evitar que los fenómenos de reflexión y resonancia alcancen niveles peligrosos para la salud de los trabajadores.

9. A partir de los 80 decibelios, y siempre que no se logre la disminución de nivel sonoro por otros procedimientos, se emplearán obligatoriamente dispositivos de protección personal tales como tapones, cascos, etc., y a partir de los 110 decibelios se extremará tal protección para evitar totalmente las sensaciones dolorosas o graves.

10. Las máquinas-herramientas que originen trepidaciones, tales como martillos neumáticos, apisonadoras, remachadoras, compactadoras o vibradoras o similares deberán estar provistas de horquillas u otros dispositivos amortiguadores, y al trabajador que las utilice se le proveerá de equipo de protección personal antivibratorio (cinturón, guantes, almohadillas, botas).

11. Las máquinas operadoras automóbiles, como tractores, traíllas, excavadoras o análogas que produzcan trepidaciones y vibraciones estarán provistas de asientos con amortiguadores, y sus conductores serán provistos de equipo de protección personal adecuado, como gafas, guantes, etcétera.

Art. 51. Protección contra contactos en las instalaciones y equipos eléctricos.

1. En las instalaciones y equipos eléctricos, para la protección de las personas contra los contactos con partes habitualmente en tensión se adoptarán algunas de las siguientes prevenciones:

a) Se alejarán las partes activas de la instalación a distancia suficiente del lugar donde las personas habitualmente se encuentran o circulen, para evitar un contacto fortuito o por la manipulación de objetos conductores, cuando éstos puedan ser utilizados cerca de la instalación.

b) Se recubrirán las partes activas con aislamiento apropiado, que conserven sus propiedades indefinidamente y que limiten la corriente de contacto a un valor inocuo.

c) Se interpondrán obstáculos que impidan todo contacto accidental con las partes activas de la instalación. Los obstáculos de protección deben estar fijados en forma segura y resistir a los esfuerzos mecánicos usuales.

2. Para la protección contra los riesgos de contacto con las masas de las instalaciones que puedan quedar accidentalmente con tensión, se adoptarán, en corriente alterna, uno o varios de los siguientes dispositivos de seguridad:

a) Puesta a tierra de las masas. Las masas deben estar unidas eléctricamente a una toma de tierra o a un conjunto de tomas de tierra interconectadas, que tengan una resistencia apropiada. Las instalaciones, tanto con neutro aislado de tierra como con neutro unido a

tierra, deben estar permanentemente controladas por un dispositivo que indique automáticamente la existencia de cualquier defecto de aislamiento, o que separe automáticamente la instalación o parte de la misma, en la que esté el defecto de la fuente de energía que la alimenta.

b) De corte automático o de aviso, sensibles a la corriente de defecto (interruptores diferenciales), o a la tensión de defecto (relés de tierra).

c) Unión equipotencial o por superficie aislada de tierra o de las masas (conexiones equipotenciales),

d) Separación de los circuitos de utilización de las fuentes de energía, por medio de transformadores o grupos convertidores, manteniendo aislados de tierra todos los conductores del circuito de utilización, incluido el neutro.

e) Por doble aislamiento de los equipos y máquinas eléctricas.

3. En corriente continua, se adoptarán sistemas de protección adecuados para cada caso, similares a los referidos para la alterna.

Art. 57. Electricidad estática.

Para evitar peligros por la electricidad estática, y especialmente que se produzcan chispas en ambientes inflamables, se adoptarán en general las siguientes precauciones:

1. La humedad relativa del aire se mantendrá sobre el 50 por 100.

2. Las cargas de electricidad estática que pueden acumularse en los cuerpos metálicos serán neutralizadas por medio de conductores a tierra. Especialmente se efectuará esta conexión a tierra:

a) En los ejes y chumaceras de las transmisiones a correas y poleas.

b) En el lugar más próximo en ambos lados de las correas y en el punto donde salgan de las poleas, mediante peines metálicos.

e) En los objetos metálicos que se pinten o barnicen con pistolas de pulverización. Estas pistolas también se conectarán a tierra.

3. En sustitución de las conexiones a tierra que se refiere el apartado anterior se aumentará hasta un valor suficiente la conductibilidad a tierra de los cuerpos metálicos.

4. Para los casos que se indican a continuación, se adoptarán las siguientes precauciones:

a) Cuando se transvasen fluidos volátiles de un tanque-almacén a un vehículo-tanque, la estructura metálica del primero será conectada a la del segundo y también a tierra si el vehículo tiene neumáticos o llantas de caucho o plástico.

b) Cuando se transporten materias finamente pulverizadas por medio de transportadores neumáticos con secciones metálicas, estas secciones se conectarán eléctricamente entre sí, sin soluciones de continuidad y en toda la superficie del recorrido del polvo inflamable.

c) Cuando se manipule aluminio o magnesio finamente pulverizado, se emplearán detectores que descubran la acumulación de electricidad estática.

d) Cuando se manipulen industrialmente detonadores o materias explosivas, los trabajadores usarán calzado antielectroestático y visera para la protección de la cara.

5. Finalmente, cuando las precauciones generales y particulares descritas en este artículo, resulten ineficaces, se emplearán eliminadores o equipos neutralizadores de la electricidad estática y especialmente contra las chispas incendiarias. De emplearse a tal fin equipos radiactivos, se protegerán los mismos de manera que eviten a los trabajadores su exposición a las radiaciones.

Art. 82. Medios de prevención y extinción.

Norma general:

En los centros de trabajo que ofrezcan peligro de incendios, con o sin explosión, se adoptarán las prevenciones que se indican a continuación, combinando su empleo, en su caso, con la protección general más próxima que puedan prestar los servicios públicos contra incendios.

1. Uso del agua:

Donde existan conducciones de agua a presión, se instalarán suficientes tomas o bocas de agua a distancia conveniente entre sí y cercanas a los puestos fijos de trabajo y lugares de paso del personal, colocando junto a tales tomas las correspondientes mangueras, que tendrán la sección y resistencia adecuada.

Cuando se carezca normalmente de agua a presión o ésta sea insuficiente, se instalarán depósitos con agua suficiente para combatir los posibles incendios.

En los incendios provocados por líquidos, grasas o pinturas inflamables o polvos orgánicos, sólo deberá emplearse agua muy pulverizada.

No se empleará agua para extinguir fuegos en polvos de aluminio o magnesio o en presencia de carburo de calcio u otras sustancias que al contacto con el agua produzcan explosiones, gases inflamables o nocivos.

En incendios que afecten a instalaciones eléctricas con tensión, se prohibirá el empleo de extintores de espuma química, soda ácida o agua.

2. Extintores portátiles:

En proximidad a los puestos de trabajo con mayor riesgo de incendio, colocados en sitio visible y accesible fácilmente, se dispondrán extintores portátiles o móviles sobre ruedas, de espuma física o química, mezcla de ambas o polvos secos, anhídrido carbónico o agua, según convenga a la causa determinante del fuego a extinguir.

Cuando se empleen distintos tipos de extintores serán rotulados con carteles indicadores del lugar y clase de incendio en que deban emplearse.

Se instruirá al personal, cuando sea necesario, del peligro que presenta el empleo de tetracloruro de carbono, y cloruro de metilo en atmósferas cerradas y de las reacciones químicas peligrosas que puedan producirse en los locales de trabajo entre los líquidos extintores y las materias sobre las que puedan proyectarse.

Los extintores serán revisados periódicamente y cargados según las normas de las casas constructoras inmediatamente después de usarlos.

3. Empleo de arenas finas:

Para extinguir los fuegos que se produzcan en polvos o virutas de magnesio y aluminio, se dispondrá en lugares próximos a los de trabajo, de cajones o retenes suficientes de arena fina seca, de polvo de piedra u otras materias inertes semejantes.

4. Detectores automáticos:

En las industrias o lugares de trabajo de gran peligrosidad en que el riesgo de incendio afecte a grupos de trabajadores, la Delegación Provincial de Trabajo podrá imponer la obligación de instalar aparatos de fuego o detectores de incendios, del tipo más adecuado: aerotérmico, termoeléctrico, químico, fotoeléctrico, radiactivo, por ultrasonidos, etc.

5. Prohibiciones personales:

En las dependencias con alto riesgo de incendio, queda terminantemente prohibido fumar o introducir cerillas, mecheros o útiles de ignición. Está prohibición se indicará con carteles visibles a la entrada y en los espacios libres de las paredes de tales dependencias.

Se prohíbe igualmente al personal introducir o emplear útiles de trabajo, no autorizados por la Empresa, que puedan ocasionar chispas por contacto o proximidad a sustancias inflamables.

Es obligatorio el uso de guantes, manoplas, mandiles o trajes ignífugos, y de calzado especial contra incendios que las Empresas faciliten a los trabajadores para uso individual.

6. Equipos contra incendios:

En las industrias o centros de trabajo con grave riesgo de incendio se instruirá y entrenará especialmente al personal integrado en el equipo o brigada contra incendios, sobre el manejo y conservación de las instalaciones y material extintor, señales de alarma, evacuación de los trabajadores y socorro inmediato a los accidentados.

El personal de los equipos contra incendios dispondrá de cascos, trajes aislantes, botas y guantes de amianto y cinturones de seguridad; asimismo dispondrá, si fuera preciso, para evitar específicas intoxicaciones o sofocación, de máscaras y equipos de respiración autónoma,

El material asignado a los equipos de extinción de incendios: escalas, cubiertas de lona o tejidos ignífugos, hachas, picos, palas, etc., no podrá ser usado para otros fines y su emplazamiento será conocido por las personas que deban emplearlo.

La empresa designará el Jefe de equipo o brigada contra incendios, que cumplirá estrictamente las instrucciones técnicas dictadas por el Comité de Seguridad para la extinción del fuego y las del Servicio Médico de Empresa para el socorro de los accidentados.

7. Alarmas y simulacros de incendios:

Para comprobar el buen funcionamiento de los sistemas de prevención, el entrenamiento de los equipos contra incendios y que los trabajadores, en general, conocen y participan con aquéllos, se efectuarán periódicamente alarmas y simulacros de incendios, por orden de la Empresa y bajo la dirección del Jefe del equipo o brigada contra incendios, que sólo advertirá de los mismos a las personas que deban ser informadas en evitación de daños o riesgos innecesarios.

Documento III: Presupuesto

1. Presupuesto.

1.1 Introducción

A continuación, se describirán tanto los costes como el tiempo invertido en el desarrollo del presente trabajo. Atendiendo a su naturaleza, los costes se clasifican en costes en recursos humanos y en costes de material utilizado, dónde se incluyen los costes de amortización de los equipos empleados. En cuanto a lo que se refiere al tiempo invertido, cabe diferenciar dos etapas principales según las tareas realizadas. Durante la primera de ellas, que se desarrolló entre septiembre de 2017 y diciembre de 2017, se desarrollaron todas las tareas relacionadas a aprender a utilizar el software empleado para la simulación, mientras que, en la segunda, realizada entre junio de 2018 y septiembre de 2018, se llevó a cabo el modelado y la simulación del problema. Además del IVA, se

Los costes en recursos humanos recogen la inversión económica que supone el trabajo realizado por el personal involucrado en un determinado proyecto. En el caso del presente trabajo este personal se compone por un ingeniero superior y un ingeniero junior (graduado).

El material que ha sido utilizado consiste básicamente por los equipos y softwares que han sido necesarios para la realización de las tareas, estos son un ordenador portátil, la contratación de un servidor con el que realizar la simulación, el software compuesto por el paquete de *Microsoft Office*, el código *Nek5000*, cuyo coste es 0 al ser un código de acceso libre, y el software de post-procesamiento *Paraview*, también de acceso libre. A los costes materiales hay que sumar un porcentaje debido a costes indirectos, que incluye el coste de material fungible y otros.

Para el coste total se incluye una tasa del 6% de beneficio industrial y el IVA.

1.2 Presupuestos parciales

En primer lugar, se muestra la descomposición de los costes en recursos humanos.

Aprendizaje Nek5000	Tiempo (h)	Coste (€/h)	Importe (€)
Ingeniero superior	13	36	468
Ingeniero junior	126	12	1512
Subtotal		1980 €	

Tabla 5. Presupuesto de los costes de recursos humanos durante la primera etapa del trabajo.

Modelado y simulación del problema	Tiempo (h)	Coste (€/h)	Importe (€)
Ingeniero superior	25	36	900
Ingeniero junior	234	12	2808
Subtotal		3708 €	

Tabla 6. Presupuesto de los costes de recursos humanos durante la segunda etapa del trabajo.

Coste total recursos humanos	5688 €
-------------------------------------	---------------

Tabla 7. Coste total de los recursos humanos usados

A continuación, el desglose del presupuesto en costes de equipos, materiales y software.

Equipo/Software	Coste (€)
Ordenador	600
Servidor	2000 (contratación de 1 año)
Licencia Microsoft Office	300
Subtotal	2900 €

Tabla 8. Costes en equipos y software.

Costes adicionales (15%)	435 €
---------------------------------	--------------

Tabla 9. Costes materiales adicionales.

Coste equipos	2900 (€)	(€)
Período de amortización	3	(años)
Período amortizado	8	(meses)
Coste anual amortización	966.67	(€)
Coste mensual amortización	80.56	(€)
Coste de amortización de equipos	644.48 (€)	

Tabla 10. Presupuesto de los costes de amortización en equipos.

Coste	(€)
Recursos humanos	5688
Coste adicional materiales	435
Beneficio industrial (+6%)	367.38
IVA (+21%)	1362.98
Costes de amortización	644.48
Coste total	8497.84

Tabla 11. Cálculo de los costes totales.

1.3 Presupuesto final

El presupuesto final asciende a **ocho mil cuatrocientos noventa y siete euros con ochenta y cuatro céntimos.**

Coste total del trabajo	8497.84 €
--------------------------------	------------------

Tabla 12. Coste total.

Bibliografía:

- [1] Kreiss, H. O., Oliger, J., *Methods for the approximate solution of time dependant problems*, 1973.
- [2] Crandall, M.G., Rabinowitz, P.H., *Pertubation of Simple Eigenvalues and linearized Stability*, 1973.
- [3] Girault, V., Raviart, P.A., *Finite element methods for Navier-Stokes equations*, 1986.
- [4] Benardi, C., Maday, Y., *Approximations spectrales de problemes aux limites elliptiques*, 1992.
- [5] Marqués, F., Net, M., Massaguer, J.M., *Thermal convection in vertical cylinders. A method based on potentials of velocity. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1993.
- [6] Babuska, I., Suri, M., *The p and h-p versions of thee finite element method, basic principles and properties*, 1994.
- [7] G.E. Karniadakis, S.J. Sherwin, *Spectral /hp element methods for CFD*, 2005.
- [8] Hoyas, S., *Estudio teórico y numérico de un problema de Bénard-Marangoni*, 2013.
- [9] Hoyas, S., Fajardo, P., Gil, A., Pérez-Quiles, M.J., *Analysis of bifurcations in a Bénard-Marangoni problem: Gravitational effects*, 2014.
- [10] C.F. Rowlatt, T.N. Phillips, *A spectral element formulation of the immersed boundary method for Newtonian fluids*, 2014.
- [11] Sudhir, S., Chibueze, K., *A spectral-element discontinuous Galerkin lattice Boltzmann method for simulating natural convection heat transfer in a horizontal concentric annulus*, 2014.
- [12] Schlatter, P. et al, *Pipe flow simulations: numerical methods and DNS*, 2014.
- [13] Fischer, P., *Nek documentation*, 2015.
- [14] Hoyas, S., Fajardo, P., Pérez-Quiles, M.J., *Influence of geometrical parameters on the linear stability of a Bénard-Marangoni problem*, 2016.
- [15] Mennemann, J.F., Marko, L., Schmidt, J., Kemmetmüller, W., Kugi, A., *The spectral element method as an efficient tool for transient simulations of hydraulic systems*, 2017.
- [16] Antoranz, A., *A numerical study of turbulent heta transfer in pipes*, 2017.

Agradecimientos:

Con este trabajo finalizan mis estudios de máster, dos intensos años que sin duda han contribuido muy positivamente a mi desarrollo como ingeniero, y también como persona. En las siguientes líneas me gustaría dar las gracias a todas aquellas personas que me han acompañado durante este tiempo.

Me gustaría dar las gracias en primer lugar a Sergio Hoyas Calvo, tutor de este trabajo, por haberme permitido realizar el mismo bajo su dirección y por el tiempo y el conocimiento aportados, que han sido esenciales para su correcto desarrollo. Agradecer también a todos los profesores que han contribuido en la docencia del máster.

El camino recorrido no ha sido fácil, no obstante he contado con gente a mi alrededor que lo han hecho más llevadero, ofreciéndome su ayuda y generando un ambiente de distensión cuando así lo necesitaba. Gracias a mis amigos y compañeros de clase y a mis compañeros de piso (la lista es muy larga y no querría dejarme a nadie), ha sido un placer y una suerte haber compartido este tiempo con vosotros, pues cuando el ambiente es el adecuado, resulta mucho más fácil trabajar con motivación y entusiasmo. Agradecer también a Axel, Hita, Pérez, Joaquín, Irene, Alejandro, Archi, Tedy, María Dolores, Jorge y Pau por vuestra amistad durante tantos años.

Mi estancia en Linköping fue una experiencia inolvidable, y aunque breve, en la que conocí a gente que siempre permanecerá en mi corazón. Muchas gracias a mis amigos Erasmus y compañeros de corredor.

A mi madre, mi padre y mis hermanos, gracias por vuestro cariño, por vuestra dedicación y sacrificio para darme lo mejor. Gracias por enseñarme el valor del esfuerzo y la constancia.