

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO

Modelos de mecánica de fluidos de baja fidelidad en 3D

TRABAJO FIN DE MÁSTER DE INGENIERÍA
AERONÁUTICA

ALUMNO: MARC RODRÍGUEZ PASTOR

TUTOR UPV: LUIS MIGUEL GARCÍA-CUEVAS GONZÁLEZ

CURSO ACADÉMICO: 2019-2020



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



8 de julio de 2020

Resumen

En este proyecto, se implementó en Python un esquema numérico ya originado previamente en el instituto de investigación CMT- Motores Térmicos que es capaz de resolver las ecuaciones de Euler en 3D. A lo largo del trabajo, se trató también de mejorar los resultados obtenidos mediante la inclusión de un esquema de alto orden (k-scheme) o el estudio de integradores temporales implícitos (Euler implícito) con tal de obtener la máxima precisión consumiendo los menores recursos computacionales posibles. Este esquema se formuló tanto en cartesianas como en cilíndricas con tal de poder analizar geometrías más realistas, que tuvieran un significado físico más relevante a la hora de analizar los flujos que transcurren a través de un MCIA.

Para comprobar los resultados, se empleó el experimento formulado por Sod para ver el comportamiento del esquema numérico ante grandes saltos de presión, mucho mayores que los de cualquier MCIA. Esto evidenció la necesidad de usar limitadores de flujo (MDT, FCT) que permitieran reducir las sobreoscilaciones generadas por el esquema numérico cerca de las discontinuidades, sin sacrificar precisión en aquellas zonas suaves. En el caso del FCT, se consideró pertinente realizar un estudio paramétrico del coeficiente de difusión contra el paso temporal (CFL), con el fin de encontrar el punto óptimo entre tiempo de cálculo y las sobreoscilaciones obtenidas. Finalmente, se comprobó el esquema en cilíndricas para saber si la dirección radial funcionaba correctamente mediante un experimento numérico en el que se le asignaba a una zona interna de un cilindro una presión distinta a los valores iniciales de la zona externa.

Palabras clave: ecuaciones de Euler, discretización espacial, integrador temporal, esquemas de alto orden, limitadores de flujo, simulación numérica.

Resum

En aquest projecte, es va implementar en Python un esquema numèric ja originat prèviament en l'institut d'investigació CMT- Motors Tèrmics que és capaç de resoldre les equacions d'Euler en 3D. Durant aquest treball, es va tractar de millorar també els resultats obtinguts mitjançant l'inclusió d'un esquema d'alt ordre (k-scheme) o estudiant la possibilitat d'utilitzar integradors temporals implícits (Euler implícit), consumint la menor quantitat de recursos computacionals possibles amb la màxima precisió. Aquest esquema es va formular tant en coordenades cartesianes com en cilíndriques amb la finalitat de poder analitzar geometries més realistes, que tingueren un significat físic major a l'hora d'analitzar els fluxes que transcorren a través d'un MCIA.

Per comprobar els resultats, es va emprar l'experiment formulat per Sod per a veure el comportament de l'esquema numèric davant de grans salts de pressió, molt majors que els de qualsevol MCIA. Açò va evidenciar la necessitat d'utilitzar limitadors de fluxe (MDT, FCT) que permeten reduir les sobreoscil·lacions obtingudes per l'esquema numèric al voltant de les discontinuïtats, preservant la precisió en aquelles zones més suaus. En el cas del FCT, es va considerar pertinent realitzar un estudi paramètric del coeficient de difusió davant del pas temporal (CFL), per tractar de trobar el punt òptim entre el temps de càlcul i les sobreoscil·lacions esdevingudes. Finalment, es va comprobar l'esquema en cilíndriques per saber si la direcció radial funcionava correctament mitjançant un experiment numèric en el que se li assignava a una zona interna d'un cilindre una pressió diferent als valors inicials de la zona externa.

Paraules clau: equacions d'Euler, discretització espacial, integrador temporal, esquemes d'alt ordre, limitadors de fluxe, simulació numèrica.

Abstract

A numerical scheme previously developed at CMT- Heat Engines Institute was implemented in Python during the project, this software is able to solve the Euler equations in 3D. Several initiatives were taken along this work in order to improve the accuracy and the amount of computational resources used by this programme, like implementing high-order schemes (k-schemes) or studying different temporal integrators (implicit Euler). It is also important to remark that most of the ducts that can be found in a reciprocating engine are cylindrical, so it was decided to implement this code in that system of reference too in order to represent more realistic geometries.

Any result in computational fluid dynamics is completely useless if it is not tested with any empirical/analytical data. For this reason, the code was tested using the experiment of the shock tube (Sod). In this particular case, some of the variables of interest had huge discontinuities at some particular points of the domain, which induced the appearance of oscillations close to them. These empirical evidences showed that it was necessary to use some kind of flux limiter (MDT, FCT) for avoiding the induced oscillations that appeared. The flux limiters try to deal with this problem, but preserving the accuracy in those regions where the solution is smooth. For the FCT, a parametric study of the diffusion coefficient versus the time step (CFL) was conducted in order to analyse which were the optimal values of both variables that minimize the induced oscillations together with the error, maximising the time step at the same time. Finally, the radial direction was checked for the cylindrical-based code by means of a numerical experiment where an inner cylindrical region was set with an initial pressure larger than the outer region.

Keywords: Euler equations, spatial discretization, temporal integrator, high order scheme, flux limiters, numerical simulation.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivos	3
1.3. Estructura del Trabajo Final de Máster	3
2. Base teórica	5
2.1. Deducción de las ecuaciones de Euler	5
Ecuación de continuidad	6
Ecuación de cantidad de movimiento	6
Ecuación de la Energía	8
Ecuación de cierre - ley de gas perfecto	8
Ecuaciones de Euler	9
2.2. Tipos de discretización espacial	10
Upwind de primer orden	11
k-scheme	12
2.3. Integradores temporales	12
Euler	15
Runge-Kutta de 4 pasos explícito	16
Euler implícito de primer orden	16
2.4. Condición de estabilidad CFL	18
2.5. Limitadores de flujo	21
MDT	21
FCT	22
2.6. Tipos de condiciones de contorno- condición de pared	23
2.7. Resolución numérica de las ecuaciones de Euler en coordenadas cilíndricas - El problema de la singularidad	23
3. Implementación numérica	26
3.1. Esquema numérico	26
3.2. Estructura del programa en cartesianas	31

3.3.	Particularización de las condiciones de contorno	38
3.4.	Limitadores de flujo	39
3.5.	Integrador implícito	42
	Formulación de las derivadas para los volúmenes internos	42
	Particularización de las derivadas en los volúmenes con c.d.c.	53
3.6.	Implementación del código en coordenadas cilíndricas	55
4.	Validación y resultados numéricos	60
4.1.	Onda de choque en un tubo	60
	Valores iniciales y condiciones de contorno aplicadas	62
	Resultados	62
	Estudio paramétrico del CFL vs ϑ mediante el método FCT	72
	Resultados integrador implícito	76
4.2.	Validación problema en coordenadas cilíndricas	76
	Experimento de tubo de choque	77
	Valores iniciales y definición del caso radial- Experimento 2	77
	Evolución temporal del problema inicial en la simulación numérica	78
	Análisis uso del Rk4 sin limitador de flujo	82
	MDT upwind vs MDT k-scheme	84
	FCT	85
5.	Conclusiones	87
5.1.	Sugerencias como trabajos futuros	88
6.	Anexo	90
7.	Anexo 2	98
7.1.	Presupuesto económico	98
	Coste de mano de obra	98
	Amortización del coste de los equipos	99
	Material fungible	100
	Presupuesto Final	100
7.2.	Huella de carbono	101
	Identificación de las fuentes	101
	Datos de la actividad	101
	Datos de emisión	101
	Cálculo	102

Índice de figuras

2.1. Malla 1D del problema de convección-difusión [1]	11
2.2. Esquema del dominio de dependencia de la solución (a), y al dividir por dos tanto paso temporal como tamaño de malla (b) [2]	20
3.1. Proyección de las velocidades almacenadas en los centroides adyacentes al conector en cuestión.	29
3.2. Imagen de la interpolación lineal en el volumen para obtener la cantidad de movimiento en el centroide.	30
3.3. Sistema de numeración de los volúmenes en cartesianas y posicionamiento del S.R.	32
3.4. Numeración de los conectores en cartesianas en la dirección Y (izquierda) y en la dirección Z (derecha).	33
3.5. Numeración de los conectores en contacto con las condiciones de contorno en cartesianas.	34
3.6. Esquema de la función principal del programa	35
3.7. Esquema de la función ‘actualiza’	36
3.8. Esquema de la función ‘cálculo nuevo estado’	37
3.9. Construcción de las rectas para la aproximación del valor en un k-scheme dependiendo de si la velocidad es positiva (izquierda) o negativa (derecha) [3]	39
3.10. Significado de los índices para el cálculo de las derivadas en las ecuaciones de cantidad de movimiento.	45
3.11. Conectores y volúmenes implicados en la aproximación de una variable de interés en el conector superior de una celda para un flujo positivo ($\rho u S_c \geq 0$)	47
3.12. Conectores y volúmenes implicados en la aproximación de una variable de interés en el conector superior de una celda para un flujo negativo ($\rho u S_c < 0$)	47
3.13. Esquema de la discretización del cilindro, donde la numeración en negro corresponde a los volúmenes, la roja a los conectores azimutales, la verde a los conectores radiales y la azul a los nodos de los volúmenes.	56
3.14. Interpolación del k-scheme para un conector radial contenido en un volumen adyacente a la singularidad, para $\rho u_r S_c \geq 0$	58

3.15. Interpolación del k-scheme para un conector azimutal contenido en un volumen adyacente a la singularidad, para $\rho u_\theta S_c \geq 0$ (izquierda) y $\rho u_\theta S_c \leq 0$ (derecha).	58
3.16. Esquema del cálculo de cantidad de movimiento en la dirección radial (izquierda) y en la eje azimutal (derecha).	59
4.1. Esquema del flujo en un instante posterior a la rotura del diafragma [4]	61
4.2. Perfil de P a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$	63
4.3. Perfil de ρ a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$	63
4.4. Perfil de T a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$	63
4.5. Perfil de u a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$	63
4.6. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.2-Rk4-upwind) con $N_X = 250$	65
4.7. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=1.2-Rk4-upwind) con $N_X = 250$	65
4.8. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-k-scheme) con $N_X = 250$	67
4.9. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$	67
4.10. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-k-scheme) con $N_X = 100$	68
4.11. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-k-scheme) con $N_X = 100$	68
4.12. Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$	69
4.13. Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$	69
4.14. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$	69
4.15. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$	69
4.16. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 250$	71
4.17. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-upwind-MDT) para $N_X = 250$	71
4.18. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.6-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 100$	72
4.19. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.6-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 500$	72
4.20. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.6-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 250$	72
4.21. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-k-scheme-MDT) para $N_X=250$	75
4.22. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-k-scheme-FCT($\vartheta=0.2$)) para $N_X=250$	75
4.23. Imagen transversal para instante $1 \cdot 10^{-5}s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)	78
4.24. Imagen transversal para instante $1 \cdot 10^{-5}s$ de la mitad superior del cilindro (4.23)	78
4.25. Imagen transversal para instante $7 \cdot 10^{-5}s$ de la mitad superior del cilindro (6.24)	79
4.26. Imagen transversal para instante $1.5 \cdot 10^{-4}s$ de la mitad superior del cilindro (6.25)	80
4.27. Imagen transversal para instante $2 \cdot 10^{-4}s$ de la mitad superior del cilindro (6.26)	80
4.28. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ de la mitad superior del cilindro (6.27)	81
4.29. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ con un CFL de 0.1	82
4.30. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ con un CFL de 1	82
4.31. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ con un CFL de 2.2	83
4.32. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ con un CFL de 0.5 usando un k-scheme	84
4.33. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ con un CFL de 0.5 usando upwind	84
4.34. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4}s$ con un CFL de 1.5 usando FCT($\vartheta=0.5$)	85

4.35. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 2.5 usando FCT($\vartheta=0.5$)	86
6.1. Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$. . .	90
6.2. Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$. . .	90
6.3. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$. . .	90
6.4. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$. . .	90
6.5. Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$. .	91
6.6. Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$. .	91
6.7. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$. .	91
6.8. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$. .	91
6.9. Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$. . .	92
6.10. Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$	92
6.11. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$. . .	92
6.12. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$	92
6.13. Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$	93
6.14. Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$	93
6.15. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$	93
6.16. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$	93
6.17. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-ksch-FCT) para $N_X = 250$. .	94
6.18. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.1-Rk4-ksch-FCT) para $N_X = 250$. .	94
6.19. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT) para $N_X = 250$. .	94
6.20. Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas	95
6.21. Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas	95
6.22. Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas	95
6.23. Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas	95
6.24. Imagen transversal para instante $7 \cdot 10^{-5} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)	96
6.25. Imagen transversal para instante $1.5 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)	96
6.26. Imagen transversal para instante $2 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)	96
6.27. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)	96
6.28. Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con Rk4 y un CFL de 3	97

Índice de cuadros

2.1. Valores de k con su respectivo esquema [1]	12
3.1. Equivalencia de las variables entre el desarrollo de $P_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c$ y el de $P_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c$	49
3.2. Equivalencia de las variables entre el desarrollo de $P_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c$ y el de $P_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c$	51
4.1. Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 250$ sin ningún tipo de limitador	64
4.2. Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 100$ sin ningún tipo de limitador, empleando un integrador Rk4	66
4.3. Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 500$ sin ningún tipo de limitador, empleando un integrador temporal Rk4	66
4.4. Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 250$ con MDT, empleando un integrador temporal Rk4.	68
4.5. Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 500$ con MDT, empleando un integrador temporal Rk4	70
4.6. Tabla del estudio paramétrico de ϑ contra CFL para $N_X = 250$	73

Nomenclatura

- ϕ : variable de interés o estudio.
- Ω : volumen fluido donde se integra la ecuación.
- t : instante temporal o variable temporal.
- F : flujo de la variable de interés que trasiega por la superficie de un VF.
- S : superficie del volumen de control.
- Q_s : término fuente de superficie, usado en la forma general de las ecuaciones conservativas.
- Q_v : término fuente de volumen, usado en la forma general de las ecuaciones conservativas.
- \vec{n} : vector normal a la superficie.
- $\vec{\nabla}$: operador divergencia.
- \vec{u} : vector velocidad.
- ρ : variable densidad.
- u : componente X de la velocidad.
- v : componente Y de la velocidad.
- w : componente Z de la velocidad.
- $\bar{\sigma}$: tensor de esfuerzos.
- $\bar{\tau}$: tensor de esfuerzos internos viscosos.
- μ : viscosidad dinámica.
- Λ : segundo coeficiente de viscosidad.
- δ_{ij} : delta de kronecker, aparece en la ecuación de cantidad de movimiento.
- \vec{b} : fuerza volumétrica en la ecuación de cantidad de movimiento.
- P : variable presión.
- e_0 : energía total por unidad de masa.
- e : energía interna específica por unidad de masa.
- k_D : coeficiente de conducción en la ley de Fourier
- T : temperatura
- \vec{w} : trabajo ejercido por las fuerzas volumétricas.
- q_h : calor transmitido al sistema por vías externas diferentes a la conducción.

- W_f : trabajo realizado por las fuerzas externas.
- h_0 : entalpía total.
- h : entalpía.
- γ : ratio de calores específicos.
- C_v : calor específico a volumen constante.
- C_p : calor específico a presión constante.
- W : vector de variables conservativas/de estado
- $F(W, t)$: vector de flujos del sistema de ecuaciones
- ε : coeficiente de difusión en la ecuación de convección-difusión.
- k : valor que regula el esquema de discretización.
- ϕ_n : solución de una PDE para un determinado instante temporal (sección integradores temporales).
- $\phi(x_n)$: aproximación de la solución real mediante series de Taylor.
- x_i : coordenada del centroide en el dominio discretizado.
- e_n : error local en un determinado instante temporal.
- E_n : error global al llegar a un determinado instante n.
- δ^0 : perturbación inicial en el sistema
- δ^n : perturbación después de n pasos temporales
- δ^t : perturbación resultante al llegar a un instante t.
- ξ : constante ficticia que relacionaría el vector de variables de estado W con la derivada temporal.
- Δt : paso temporal.
- W^n : vector que contiene las variables de estado para un determinado instante temporal n.
- W^{n+1} : vector que contiene las variables de estado para el siguiente estado temporal $n + 1$.
- $A(W, t)$: parte del vector de flujos no relacionada linealmente con las condiciones de contorno.
- $b(t)$: parte del vector de flujos relacionada con las condiciones de contorno.

- λ : autovalor del problema, cuyo valor es normalmente la suma de la velocidad del fluido y la de la propagación de la onda. Si aparece con la forma λ_m significa que hay diversos autovalores en el problema.
- ϑ : coeficiente de difusión en el método FCT.
- $\theta(W)$: función difusiva del método FCT.
- $\Psi(W)$: función antidifusiva del método FCT.
- u_r : componente radial de la velocidad en coordenadas cilíndricas.
- u_θ : componente azimutal de la velocidad en coordenadas cilíndricas.
- u_x : componente longitudinal de la velocidad en coordenadas cilíndricas.
- V_i : volumen en el centroide i
- ϵ : difusión artificial reconstruida en el método MDT.
- L^2 : norma del error acumulado.
- L^∞ : norma del máximo error registrado.
- CFL : número de Courant
- err_i : es la desviación entre la solución analítica y la numérica para una determinada posición.

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo se explicará brevemente qué importancia tiene este trabajo dentro del desarrollo actual de los distintos modelos termofluidodinámicos relacionados con los conductos internos de un MCIA, así como los objetivos básicos de esta tesis una vez fue planteada.

1.1. Motivación

Históricamente, el proceso de diseño de los componentes internos de un motor de MCIA ha sido un proceso costoso, donde era necesario elaborar distintos modelos físicos con los que se realizaban una serie de experimentos para obtener datos reales en un banco de prueba. Usando estos datos, se podían realizar las modificaciones pertinentes sobre los componentes para obtener un diseño final. Como se puede deducir, este proceso consumía una enorme cantidad de recursos tanto a nivel material como humano.

Por este motivo, herramientas alternativas como el CFD han aparecido en los últimos años. Este tipo de simulaciones permiten ahorrar los costes de obtener un modelo físico del motor, pero es necesario también emplear a un técnico experto en el tema que sea capaz de realizarla correctamente, además de que algunas simulaciones pueden tener un coste computacional y temporal bastante elevado de igual forma, ya que para obtener buenos resultados se requiere desarrollar geometrías detalladas y mallarlas correctamente, siendo necesario escoger algún modelo de turbulencia si se desea tener en cuenta los fenómenos de viscosidad, por lo que la dificultad del cálculo aumenta.

Por lo tanto, ambas soluciones exigen una gran cantidad de recursos, por lo que sería bastante útil poder poseer una herramienta que dé un resultado preliminar relativamente fiable, de forma rápida y poco costosa a nivel computacional. A raíz de esto, se decidió desarrollar en el Centro de Motores Térmicos (CMT-UPV) un modelo 1D de baja fidelidad que permitiera conocer rápidamente qué diseños podían llegar a ser prometedores y cuales no, con tal de poder optimizar de mejor manera los recursos de los que se disponen. Si un modelo daba buenos resultados para

una determinada geometría en este cálculo preliminar, el prototipo pasaba a la fase de evaluación mediante algún software comercial de CFD, si volvía a dar buenos resultados, se elaboraba un modelo que se evaluaba en el banco de ensayos para obtener el desarrollo final.

A pesar de esto, existían algunas geometrías (como pueden ser los silenciadores) donde por culpa de las variaciones de área y dirección aparecían fenómenos 3D que eran bastante relevantes para describir el comportamiento del flujo, y que por lo tanto no podían ser despreciados. De esta forma, fue necesario desarrollar un modelo tridimensional que representara estos fenómenos más complejos [5].

Este programa resultó ser más eficiente computacionalmente hablando que los softwares comerciales de CFD debido a las simplificaciones de las ecuaciones que se tuvieron en cuenta, ya que no consideraban los términos difusivos de la cantidad de movimiento (eliminando la necesidad de obtener modelos de turbulencia) o los términos cruzados involucrados en esta. Estas simplificaciones pueden resultar abusivas en fases avanzadas de un proyecto de diseño pero para cálculos preliminares pueden permitir obtener un cálculo más o menos realista con pocos recursos y poder empezar a realizar una primera criba entre las distintas opciones. Es necesario por lo tanto que este código obtenga resultados que representen de forma relativamente fidedigna la realidad, pero sobretodo que sean muy rápidos, buscando de esta forma la optimización del código 3D que ya se realizó en [5].

Por lo tanto, con el objetivo de aumentar tanto la eficiencia como la precisión del esquema numérico ya implementado, en esta ampliación de [5] se ha tratado de añadir la posibilidad de usar esquemas de discretización espacial de alto orden (k-scheme), los cuales permiten aumentar la fiabilidad de los datos obtenidos (dentro de las hipótesis del modelo realizadas). Con tal de poder hacer el modelo más eficiente computacionalmente hablando, se ha estudiado también el uso de diferentes integradores temporales, ya que dependiendo de cual se escogiera, el paso temporal podía ser aumentado de forma ostensible.

En un principio, el código 3D fue ideado en coordenadas cartesianas con tal de poder realizar la discretización espacial con mayor sencillez. Sin embargo, la mayoría de conductos (así como silenciadores) que existen dentro de un MCIA tienen forma cilíndrica. Es necesario por lo tanto, tratar de obtener el esquema numérico en este tipo de coordenadas, ya que así se podrán realizar análisis más realistas sobre la geometría del motor. Esta necesidad también ha sido abordada a lo largo de esta tesis final de máster.

En definitiva, este trabajo se puede justificar dentro del programa ya desarrollado por el CMT por el hecho de que hay algunas características del mismo (discretización de los términos, integradores temporales...) que se podían optimizar y mejorar, teniendo potencial todavía para incrementar la calidad de los resultados obtenidos sin incurrir en un sobre coste temporal excesivo.

1.2. Objetivos

El principal objetivo de este trabajo por lo tanto era la implementación del método desarrollado anteriormente en el CMT [5] en Python, ya que permitiría una mayor versatilidad a la hora de actualizar el código. Además, este código debía de tratar de modelar los resultados de la forma más fiel posible respecto de la realidad, por lo que también se intentó que este modelo contuviera las ecuaciones de Euler en coordenadas cilíndricas de forma funcional, de tal forma que fuera posible utilizar diversos tipos de integradores temporales o un discretizador espacial de alto orden si así se deseaba. Aún así, este objetivo principal se podía dividir en distintas fases:

- Implementación del método en Python de forma algorítmica en cartesianas y validación de los resultados mediante un problema de Riemann
- Implementación del método en Python con un integrador implícito en cartesianas y validación de los resultados mediante un problema de Riemann
- Implementación de las ecuaciones de Euler en cilíndricas de forma algorítmica en Python, validando los resultados mediante un problema de Riemann.
- Optimización del paso temporal realizando un estudio paramétrico cruzado entre los distintos métodos de integración temporal (explícitos e implícitos) y de discretización espacial (upwind de primer orden, k-scheme), empleando también ambos tipos de limitadores de flujo (MDT y FCT), con la finalidad de descubrir la solución que obtuviera un menor error con un mayor paso temporal y minimizando al máximo las oscilaciones. Al mismo tiempo, se busca el valor óptimo de ϑ en FCT siguiendo estos criterios de optimización.
- Comprobar la certeza de las hipótesis sobre el rendimiento, tanto de los integradores temporales (explícitos vs implícitos), como de los discretizadores espaciales (upwind vs k-scheme), con el fin de ver si los principales teoremas sobre cálculo computacional son ciertos.

1.3. Estructura del Trabajo Final de Máster

Este trabajo se ha estructurado en distintos capítulos claramente diferenciados con tal de facilitar la lectura del mismo, así como el aprovechamiento de la información que contiene dependiendo de las necesidades del lector. En el presente capítulo, se trata de dar una primera justificación sobre la realización del proyecto, así como los objetivos que se pretenden alcanzar con el mismo.

En el segundo capítulo, se otorga una base teórica que permite conocer los fundamentos del cálculo numérico con tal de poder abordar la resolución de las ecuaciones de Euler. En primer lugar, se deducen de forma detallada estas ecuaciones, justificando las hipótesis tomadas en relación al funcionamiento normal de un MCLA corriente. Luego, se presentan de forma enumerativa los distintos métodos de integración temporal considerados, así como los esquemas de discretización espacial. En último lugar, se describen los limitadores de flujo y la razón por la que son

necesarios, así como los fundamentos de los métodos considerados en este trabajo.

En el tercer capítulo, se presenta el esquema numérico de la malla escalonada que se empleó en la resolución del problema, así como la discretización de las distintas ecuaciones y métodos de limitación de flujo. También se detalla como se particularizó tanto la condición de estabilidad de Courant, como las condiciones de contorno de pared para el presente caso. Por último, se presentan las modificaciones realizadas al planteamiento con tal de abordar el problema en cilíndricas.

En el cuarto capítulo, se muestra el proceso de validación de los resultados del problema cartesiano mediante la simulación de una onda de choque en un tubo (tubo de sod). En este análisis, se formulan algunas conclusiones por lo que respecta a la estabilidad numérica en cuanto a los diferentes integradores temporales y sus errores, precisión de los discretizadores espaciales... Así como el estudio paramétrico del paso temporal mediante el empleo de los distintos limitadores de flujo y el comportamiento de estos métodos. Por último, se detallan los resultados obtenidos para el problema en cilíndricas, donde se validó tanto la dirección longitudinal como la radial.

En el quinto capítulo, se resumen las principales conclusiones extraídas del presente proyecto, y se enumeran algunas de las áreas que no se pudieron explorar en el mismo como posibles alternativas de trabajo para el futuro.

Capítulo 2

Base teórica

2.1. Deducción de las ecuaciones de Euler

En primer lugar, es necesario volver a los primeros principios con el fin de comprender de donde vienen las ecuaciones conservativas, facilitando así el proceso de simplificación de las mismas y la comprensión del razonamiento empleado. Las ecuaciones conservativas se denominan así por el hecho de que la variación de las variables en los volúmenes fluidos viene dada por los flujos que entran o salen de estos volúmenes, más la acción de los términos fuente que anidan en ellos. Los desarrollos aportados en esta sección están basados en los expuestos en [6].

Como ya se sabe, las variables conservativas vienen recogidas en tres tipos de ecuaciones distintas: masa, momento y energía. Por lo que respecta al resto de variables, como pueden ser la presión, la temperatura y la entropía, no se pueden considerar como conservativas.

Así pues, si se considera un volumen arbitrario Ω , limitado en el espacio por una superficie S , se puede expresar la variación temporal de una propiedad ϕ en el volumen tal y como se puede ver en 2.1.1:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi d\Omega \quad (2.1.1)$$

Una vez definido esto, es necesario expresar de alguna forma el flujo que trasiega a través de la superficie: $-\oint_S \vec{F} dS$. Si a esto se le añade la acción de los términos fuente tanto en la superficie como en el volumen (Q_s y Q_v), se obtiene la expresión integral conservativa 2.1.2:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi d\Omega + \oint_S \vec{F} \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega} Q_v d\Omega + \oint_S \vec{Q}_s \cdot \vec{n} dS \quad (2.1.2)$$

Esta última expresión se puede derivar de forma diferencial si se emplea uno de los teoremas matemáticos más relevantes a la hora de elaborar este trabajo, el teorema de Gauss, el cual dice

que:

$$\oint_S \vec{F} \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{F} d\Omega \quad (2.1.3)$$

Por lo tanto, sustituyendo esta expresión en la forma integral 2.1.2, se obtiene que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{F} d\Omega = \int_{\Omega} Q_v d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_s d\Omega \quad (2.1.4)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{F} = Q_v + \vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_s \quad (2.1.5)$$

2.1.5 es la expresión diferencial, la cual es más restrictiva porque exige que las funciones implicadas sean diferenciables. Una vez definida esta expresión, antes de proceder a deducir las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía, es importante definir el concepto de derivada total, el cual se puede expresar como:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.1.6)$$

En cuanto al significado de esta derivada, simplemente muestra la variación de una propiedad tanto por el paso temporal ($\frac{\partial}{\partial t}$), como por la acción convectiva del fluido ($\vec{u} \cdot \vec{\nabla}$).

Ecuación de continuidad

Para la ecuación de continuidad, simplemente se debe de tener en cuenta que no hay términos fuente y que en este caso la variable conservativa es la densidad (ρ):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho d\Omega + \oint_S \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (2.1.7)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.1.8)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \rho = 0 \quad (2.1.9)$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.1.10)$$

Ecuación de cantidad de movimiento

En esta expresión, la variable conservativa es la cantidad de movimiento, por lo que $\phi = \rho \vec{u}$. En cuanto al flujo a través de las paredes (F), este viene definido por $\rho \vec{u} \otimes \vec{u}$, que es un tensor matricial con la siguiente forma para el caso 3D:

$$\begin{bmatrix} \rho u^2 & \rho uv & \rho uw \\ \rho vu & \rho v^2 & \rho vw \\ \rho uw & \rho vw & \rho w^2 \end{bmatrix} \quad (2.1.11)$$

Cada una de las filas corresponde con el cálculo de la cantidad de movimiento en una dirección diferente, más adelante se estudiará si este tensor se pudo simplificar de alguna forma. En este caso, los términos fuente superficiales y volumétricos sí que juegan un papel relevante. En un fluido en movimiento, se puede observar como las fuerzas superficiales que sufre vienen dadas por las deformaciones del mismo. Estas fuerzas se pueden expresar como un tensor de esfuerzos, multiplicado por la normal a la superficie del volumen:

$$F_s = \bar{\sigma} \cdot \vec{n} \quad (2.1.12)$$

Donde $\bar{\sigma}$ es el tensor de esfuerzos y \vec{n} la normal apuntando hacia afuera. Si se asume que el fluido es newtoniano, se tiene que el tensor se puede expresar como:

$$\bar{\sigma} = -P\bar{I} + \bar{\tau} \quad (2.1.13)$$

Siendo $\bar{\tau}$ el tensor de esfuerzos internos viscosos, el cual va a depender en cierta forma tanto de la deformación del fluido, como de la viscosidad dinámica (μ) del mismo:

$$\tau_{ij} = \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \Lambda (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) \delta_{ij} \right] \quad (2.1.14)$$

Como se puede deducir, este término muestra la fricción interna del fluido en contacto consigo mismo, siendo por lo tanto equivalente a una fuerza superficial. En el caso del término fuente del volumen, existen fuerzas que actúan sobre él por unidad de masa, como por ejemplo la gravedad, por lo tanto se puede expresar como:

$$Q_v = \rho \vec{b} \quad (2.1.15)$$

Donde \vec{b} es una fuerza volumétrica por unidad de masa. Sustituyendo todo este desarrollo en la ecuación 2.1.2, se obtiene que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{u} d\Omega + \oint_S (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega} \rho \vec{b} d\Omega + \oint_S \bar{\sigma} \cdot \vec{n} dS \quad (2.1.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{u} d\Omega + \oint_S (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega} \rho \vec{b} d\Omega + \oint_S \bar{\tau} \cdot \vec{n} dS - \oint_S P \cdot \vec{n} dS \quad (2.1.17)$$

Aplicando el teorema de Gauss a 2.1.17, se puede derivar que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \vec{u} d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) d\Omega = \int_{\Omega} \rho \vec{b} d\Omega + \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \bar{\tau} d\Omega - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot P d\Omega \quad (2.1.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P\bar{I} - \bar{\tau}) = \rho \vec{b} \quad (2.1.19)$$

Ecuación de la Energía

La variable conservativa en este caso es la energía total (e_0), representada por la energía interna específica más una componente cinética:

$$e_0 = e + \frac{|\vec{u}|^2}{2} \quad (2.1.20)$$

Para la deducción de esta ecuación, simplemente hay que tener en cuenta la primera ley de la termodinámica, la cual establece que los términos fuente que actúan en la variación de energía en un sistema vienen dados por las fuerzas que se ejercen sobre el mismo y el calor transmitido de forma externa a este dominio fluido.

Por lo que respecta al flujo energético que aparece en esta ecuación, se puede dividir básicamente en dos vertientes (como en todas las ecuaciones conservativas): convectiva y difusiva. El flujo convectivo se puede expresar como $\vec{F}_c = \rho\vec{u}(e + \frac{|\vec{u}|^2}{2})$, mientras que el difusivo está regulado por la denominada ley de Fourier: $\vec{F}_D = -k_D\vec{\nabla}T$. En cuanto al desarrollo de los términos fuente, se pueden distinguir los superficiales y los volumétricos de acuerdo con lo expuesto anteriormente.

En el caso volumétrico, están constituidos por el trabajo ejercido por las fuerzas volumétricas (\vec{w}) y el calor transmitido al sistema por vías distintas a la conducción q_H . Mientras, la parte superficial está relacionada con el trabajo ejercido para deformar el fluido, el cual se puede expresar como: $\vec{Q}_s = \vec{\sigma} \cdot \vec{u} = -P\vec{u} + \vec{\tau} \cdot \vec{u}$. Sustituyendo las fórmulas de estos dos últimos párrafos en la fórmula integral 2.1.2, se puede obtener que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho e_0 d\Omega + \oint_S \rho e_0 \cdot \vec{u} \cdot \vec{n} dS = \oint_S k_D \vec{\nabla}T \cdot \vec{n} dS + \int_{\Omega} (\rho\vec{w} \cdot \vec{u} + q_H) d\Omega + \oint_S (\vec{\sigma} \cdot \vec{u}) \cdot \vec{n} dS \quad (2.1.21)$$

La forma diferencial de la ecuación se convierte en:

$$\frac{\partial \rho e_0}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{u}e_0) = \vec{\nabla} \cdot (k_D\vec{\nabla}T) + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{u}) + W_f + q_H \quad (2.1.22)$$

Sustituyendo 2.1.13 en la expresión diferencial, y sabiendo que $h = e + \frac{P}{\rho}$, se puede obtener que:

$$\frac{\partial \rho e_0}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{u}h_0 - k\vec{\nabla}T - \vec{\tau} \cdot \vec{u}) = W_f + q_H \quad (2.1.23)$$

Sabiendo que la entalpía total es:

$$h_0 = e + \frac{P}{\rho} + \frac{|\vec{u}|^2}{2} = h + \frac{|u|^2}{2} = e_0 + \frac{P}{\rho} \quad (2.1.24)$$

Ecuación de cierre - ley de gas perfecto

Si se hace un repaso de las ecuaciones y las variables definidas hasta el momento, se puede ver como hay 5 ecuaciones (1 de continuidad, 3 de cantidad de movimiento y una de energía),

mientras que se mantienen 6 incógnitas distintas (ρ , ρu , ρv , ρw , ρe_0 y P). Por este motivo, se necesita una sexta ecuación que cierre la solución del sistema y que esta sea única, que en este caso es la ley de estado de gas perfecto:

$$P = \rho RT \quad (2.1.25)$$

A partir de aquí, se pueden definir una serie de relaciones sabiendo que el ratio de coeficientes de calor específico (γ) se define como $\frac{C_p}{C_v}$, que permiten poner fin al problema a pesar de haber añadido una nueva incógnita con la inclusión de la ley de estado (T). Así pues, la energía interna específica (e) y la entalpía específica (h) se pueden expresar como:

$$e = C_v T = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{P}{\rho} \quad (2.1.26)$$

$$h = C_p T = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{P}{\rho} \quad (2.1.27)$$

Las variables totales se pueden derivar de la entalpía de parada h_0 :

$$h_0 = e_0 + \frac{P}{\rho} = h + \frac{|\vec{u}|^2}{2} = C_p T_0 \quad (2.1.28)$$

Donde la temperatura total T_0 se define como:

$$T_0 = T + \frac{|\vec{u}|^2}{2C_p} = T \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \quad (2.1.29)$$

El número de Mach se puede introducir como:

$$M = \frac{|\vec{u}|}{c} \quad (2.1.30)$$

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S = \gamma \frac{P}{\rho} \quad (2.1.31)$$

Ecuaciones de Euler

Una vez se han definido las ecuaciones involucradas, cabe analizar qué simplificaciones se realizaron a la hora de enfocar el caso que se trataba de solventar en el presente trabajo. Se debe de recordar que el programa desarrollado tiene como principal aplicación el estudio preliminar en motores MCIA, por lo que se debe de comprender cuales son las particularidades de esta tecnología. En primer lugar, los esfuerzos viscosos de los términos difusivos de las ecuaciones ya mencionadas (2.1.19 y 2.1.23) se pueden simplificar para este tipo de aplicaciones, ya que la convección en estos flujos es muy superior a la relevancia de los términos difusivos siempre que se esté estudiando una región alejada de la pared, por lo que estos términos se pueden considerar como despreciables. Suponiendo además que no se produce ningún intercambio de calor ni de energía en el sistema, y asumiendo que en este caso las fuerzas volumétricas se pueden considerar

como despreciables, se obtiene una formulación de las ecuaciones completamente conservativa, donde las variables de interés ($\rho, \rho e_0$ y $\rho \vec{u}$) dependen únicamente de su variación temporal en el volumen de control, así como del flujo que atraviesa su superficie limitante. Las ecuaciones son en este caso hiperbólicas, facilitando sumamente su resolución. Considerando todas estas simplificaciones, se obtienen las ecuaciones de Euler, cuya forma es la siguiente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.1.32)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + P \vec{I}) = 0 \quad (2.1.33)$$

$$\frac{\partial \rho e_0}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} h_0) = 0 \quad (2.1.34)$$

Se puede observar pues que todas estas ecuaciones siguen el mismo tipo de estructura, donde la variación temporal de la variable conservativa es producida por el flujo que trasiega a través de la superficie del volumen fluido. Por lo tanto se pueden expresar todas como:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = F(W, t) \quad (2.1.35)$$

Siendo W el vector de variables conservativas y $F(W, t)$ el vector de flujos correspondiente, que en el caso cartesiano son:

$$W = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho u \\ \rho e_0 \end{bmatrix} \quad F(W, t) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \\ \frac{\partial \rho uv}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v^2 + P)}{\partial y} + \frac{\partial \rho vw}{\partial z} \\ \frac{\partial \rho uw}{\partial x} + \frac{\partial \rho vw}{\partial y} + \frac{\partial (\rho w^2 + P)}{\partial z} \\ \frac{\partial (\rho u^2 + P)}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial \rho wu}{\partial z} \\ \frac{\partial (\rho e_0 + P)u}{\partial x} + \frac{\partial (\rho e_0 + P)v}{\partial y} + \frac{\partial (\rho e_0 + P)w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.1.36)$$

Como se puede observar, hay una serie de términos cruzados en la cantidad de movimiento ($\rho uv, \rho uw, \rho vw$) que complican la resolución del problema, en el capítulo 3 se muestra como para el caso de estudio estos términos se pueden considerar como despreciables con tal de simplificar su resolución. En el caso de las coordenadas cilíndricas, la forma general de las ecuaciones (2.1.32, 2.1.33, 2.1.34) es exactamente la misma, hecho fundamental para el planteamiento del problema numérico en ese mismo capítulo. Otro asunto son las expresiones diferenciales de los flujos, ahí ya entran en juego las coordenadas del sistema (radial, azimutal y longitudinal).

2.2. Tipos de discretización espacial

En este apartado, se va a explicar los dos tipos de discretización espacial que se emplearon durante la elaboración de este proyecto. Para tratar de exponer mejor todos estos conceptos, se va a utilizar la ecuación de convección-difusión en 1D, discretizando el término convectivo con ambos métodos. Es importante recordar que la ecuación que se está comentando es la 2.2.1,

sabiendo que ϕ es la variable de interés a calcular:

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \varepsilon \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0 \quad (2.2.1)$$

Integrando a lo largo de un volumen fluido en 1D, limitado por los puntos $x_{i-1/2}$ y $x_{i+1/2}$, se obtiene que:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \varepsilon \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) dx = 0 \quad (2.2.2)$$

$$[u\phi]_{i-1/2}^{i+1/2} - \left[\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_{i-1/2}^{i+1/2} = 0 \quad (2.2.3)$$

En este caso, la discretización del término convectivo (situado a la izquierda de 2.2.3) permite comprender el planteamiento para extrapolarlo al caso 3D, paso necesario para tratar con las ecuaciones de Euler. Teniendo en cuenta de que la malla 1D empleada está centrada en las celdas, los valores en los límites de los volúmenes son desconocidos, por lo que es necesario utilizar algún tipo de discretización espacial que los aproxime. A continuación, se ha añadido un esquema de como estaría constituida la malla:

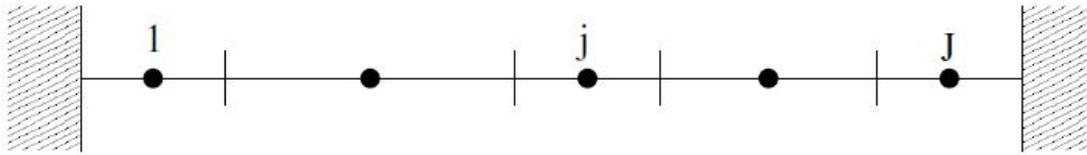


Figura 2.1: Malla 1D del problema de convección-difusión [1]

Upwind de primer orden

Es el sistema de discretización más simple, para hallar los valores deseados simplemente se trata de ver cual es el signo de la velocidad que atraviesa la celda en cuestión. Dependiendo de la dirección, se emplea un nodo u otro para aproximar el valor en el límite de la celda. Así pues, se puede deducir que este esquema es de primer orden en el espacio, pudiéndose implementar de forma muy sencilla, pero al mismo tiempo siendo el que mayor error de discretización espacial genera. Si la velocidad es positiva ($u > 0$), entonces $(u\phi)_{i+1/2}$ es:

$$(u\phi)_{i+1/2} = u_{i+1/2}\phi_i \quad (2.2.4)$$

Por contra, si esta velocidad viene a ser negativa ($u < 0$):

$$(u\phi)_{i+1/2} = u_{i+1/2}\phi_{i+1} \quad (2.2.5)$$

k-scheme

Por lo que respecta al k-scheme, es un tipo de esquema más complejo . Esta discretización realiza una interpolación entre distintos valores de la malla, requiriendo usualmente dos centroides aguas arriba y uno aguas abajo para poder obtener la aproximación deseada. De esta forma, cuando la velocidad es positiva ($u > 0$), el esquema es el siguiente, de acuerdo con [7]:

$$(u\phi)_{i+1/2} = u_{i+1/2} \left(\frac{\phi_i + \phi_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\phi_{i-1} + 2\phi_i - \phi_{i+1}) \right) \quad (2.2.6)$$

Cuando la velocidad es negativa ($u < 0$), el esquema es:

$$(u\phi)_{i+1/2} = u_{i+1/2} \left(\frac{\phi_i + \phi_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\phi_i + 2\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) \right) \quad (2.2.7)$$

Como se puede observar, en el esquema se utiliza un coeficiente denominado como k . Este parámetro permite emplear distintos esquemas de discretización cambiando simplemente su valor. Así pues, algunos esquemas que se pueden implementar son:

valor k	esquema
1	CDS
1/2	QUICK
-1	Second Order Upwind
1/3	CUS (cubic upwind)

Cuadro 2.1: Valores de k con su respectivo esquema [1]

2.3. Integradores temporales

A lo largo del proyecto, el concepto de estabilidad en el proceso de propagación de la solución en el tiempo ha jugado un papel fundamental tanto en la justificación de los resultados como en la elección de los distintos métodos de integración, por eso se ha considerado que era necesario recuperar algunos conceptos clave que facilitarían la comprensión de esto, tanto a nivel de los integradores temporales en si (implícitos vs explícitos), como de las restricciones del paso temporal impuestas (condición CFL).

En primer, es importante comentar el concepto de error temporal y su orden. Todos los integradores temporales propagan de forma inherente el error a través de los distintos instantes de tiempo, dependiendo de su orden este error temporal es mayor o menor. Dentro de los errores que se pueden tener en un método de resolución temporal de PDEs, destacan dos variantes: el error local de truncación en la n -ésima iteración y el error global de truncación. Si se supone ϕ_n como la solución numérica en cierto paso temporal n y $\phi(x_n)$ como la solución real, aproximada mediante un desarrollo de Taylor, se puede definir el error local como la diferencia para un determinado instante temporal de la solución analítica con respecto de la numérica. En el caso

del integrador de Euler, este error sería por ejemplo:

$$|e_n| = |\phi_n - \phi(x_n)| = \frac{1}{2}\Delta x^2 |\phi''(\epsilon)| \quad (2.3.1)$$

Por lo que respecta al error global de fórmula, expresa la diferencia entre la solución exacta y la obtenida por el esquema numérico después de un número determinado de pasos temporales :

$$E_n = \phi(x_n) - \phi_n \quad (2.3.2)$$

Así pues, tal y como se ha definido en este trabajo, un esquema de integración temporal de orden n significa que su error global se propaga en el tiempo de tal forma que es de $\mathcal{O}(\Delta t^n)$. Se puede deducir por lo tanto que cuanto mayor sea el orden temporal del integrador, menor es el error obtenido, pero mayor es el coste computacional. Sin embargo, el orden del error especificado junto al desarrollo de los integradores temporales expuestos en las próximas secciones hace referencia al orden del error local de estos métodos.

Una vez definidos ambos tipos de error, es pertinente definir un par de conceptos relacionados directamente con la estabilidad. En primer lugar, la idea de convergencia está relacionada directamente con la reducción paulatina del error en un punto determinado del dominio discretizado (x_i) para cierto instante total t a medida que el tamaño de la malla se va reduciendo. Esto significa que el error tiende a 0 después de llegar a un instante t en un punto del dominio cuando el tamaño de las celdas se aproxime a 0:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} e_{x_i}^t = 0 \quad (2.3.3)$$

El otro concepto es el de consistencia, el cual implica que el error local del método sea lo suficientemente pequeño, pero la consistencia no implica la convergencia del esquema numérico. Para asegurar esto necesitamos otro elemento, y aquí es donde entra la estabilidad.

Esta idea hace referencia a los sistemas en los que al introducir una perturbación en las variables de entrada (δ^0) se obtiene una perturbación resultante (δ^n) limitada, que no aumenta de forma descontrolada con el tiempo. De esta forma, se puede conocer con seguridad cuales son los límites en los que la respuesta del sistema se va a mover, independientemente de la perturbación inicial, y aunque se consideren un número de instantes temporales que tienda a infinito.

Cuando se hace referencia a la estabilidad, puede estar definida de dos formas distintas: cero-estabilidad o absolutamente estable. La primera de ellas se consigue cuando en un esquema numérico, al introducir un determinado tamaño de malla Δx , existe una función $C(t)$ que, multiplicada por una perturbación inicial aleatoria (δ^0), permite limitar esta respuesta:

$$|\delta^T|_{\Delta x} \leq C(t) |\delta^0|_{\Delta x} \quad (2.3.4)$$

Para demostrar si un sistema tiene este tipo de estabilidad simplemente hay que ver si para un

determinado instante de t , a medida que varía el tamaño de la malla, se puede limitar el error en función de la perturbación inicial y de $C(t)$, .

Por contra, un esquema es absolutamente estable si hay una constante C de tal forma que:

$$|\delta^n|_{\Delta_x} \leq C|\delta^0|_{\Delta_x} \quad (2.3.5)$$

En este caso, el tamaño de la malla sí que es constante, y para comprobar que un sistema tenga este tipo de estabilidad simplemente se ha de observar que, al analizar distintos instantes de tiempo, no se produce un repunte súbito del error de los resultados.

Una vez definidos estos conceptos, simplemente cabe enunciar el teorema de equivalencia de Lax, el cual dice que la convergencia de un esquema numérico implica su cero-estabilidad, mientras que su cero-estabilidad y la consistencia del mismo sí que implican su convergencia . Por lo tanto, como ya se había apuntado, un sistema debe ser estable y consistente para converger.

Dicho esto, es pertinente explicar que para los esquemas numéricos de integración temporal, se puede estudiar de forma mucho más detallada si son absolutamente estables tratando de averiguar el dominio en el plano complejo que contiene las posibles soluciones del sistema, tal y como se hace en [2]. Esto se puede aplicar también al caso que se está tratando de resolver, ya que si se revisa lo comentado en las primeras secciones de este capítulo, el problema se puede reducir a:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = F(W, t) \quad (2.3.6)$$

Donde W es el vector de variables de estado, y $F(W,t)$ es el vector de flujo. Ahora, se puede suponer que es un problema completamente lineal (que no lo es) y que este vector se puede expresar como una constante por las variables de estado en un cierto instante de tiempo, de tal forma que:

$$\frac{\partial W(t)}{\partial t} = \xi W(t) \quad (2.3.7)$$

$$W(0) = W_0 \quad (2.3.8)$$

Resolviendo la ecuación diferencial se tiene que:

$$W(t) = W_0 \exp^{\xi t} \quad (2.3.9)$$

Si a la condición inicial se le introduce una perturbación del tipo $W(0) = W_0 + \delta$, se puede ver que la solución obviamente contendrá esta perturbación también: $W(t) = (W_0 + \delta) \exp\{\xi t\}$. Por lo tanto se puede concluir que para este caso, si $\xi \leq 0$, las perturbaciones no tendrán una gran influencia en el resultado final y el sistema será estable, es decir, las soluciones que se sitúen en el plano complejo izquierdo conducirán a pequeñas variaciones en al respuesta. Sin embargo, cuando ξ se sitúa en el semiplano positivo, cualquier pequeña perturbación en la solución conduce

a una gran variación en la respuesta, convirtiendo al sistema en inestable.

Dependiendo de qué tipo de integrador temporal se emplee, el sistema puede ser también condicionalmente estable, es decir, que la respuesta solo se comporte de esta forma para pequeños pasos temporales (este es el caso del Euler explícito por ejemplo). Por último, existe también la posibilidad de que el integrador sea A-estable, propiedad que se consigue cuando la región de estabilidad absoluta de este método se sitúa por completo en la parte real negativa del plano complejo. Este último caso es el más interesante para este trabajo, ya que si todas las soluciones se sitúan en la región estable, el paso temporal se puede incrementar de forma importante. Una vez repasados estos conceptos preliminares, es relevante conocer los principales tipos de integradores temporales y qué relación guardan con ellos. Se pueden dividir básicamente en explícitos e implícitos.

Los integradores temporales explícitos son aquellos que se basan en las variables de estado del paso temporal anterior para poder hallar el siguiente ($F(W^n, t)$). Estos integradores requieren de un menor coste computacional, ya que la derivada temporal puede ser calculada de forma inmediata. Sin embargo, los integradores explícitos son estables para pasos temporales relativamente pequeños en comparación con sus homólogos implícitos, por lo que al final pueden acabar teniendo un coste computacional mayor que los mismos. Esto es debido a que, a pesar de que los implícitos tienen un coste por paso temporal mayor, su Δt se puede aumentar hasta tal punto que se vea compensado, ya que el tiempo total invertido en calcular por ejemplo 100 pasos temporales explícitos puede ser mayor que en hallar 10 pasos implícitos.

Por lo que respecta a los integradores implícitos, estos se caracterizan por el hecho de que requieren información del siguiente paso temporal para actualizar ese mismo instante ($F(W^{n+1}, t^{n+1})$). Por este motivo, el coste computacional de estos métodos puede llegar a ser bastante elevado, ya que requieren que el método numérico se pueda linealizar en forma de expansiones de Taylor para poder aislar el valor de este futuro instante temporal. Sin embargo, estos métodos numéricos son mucho más estables que los explícitos ya que permiten emplear pasos temporales mucho más elevados, como ya se ha apuntado (A-estables). De hecho, el teorema de Dahlquist de Segunda Barrera [8] dice que solamente aquellos integradores temporales implícitos menores de orden 2 pueden cumplir esta propiedad, excluyendo de esta posibilidad a cualquier integrador explícito o lineal multipaso.

Euler

Es un esquema de primer orden explícito, siendo por lo tanto el más sencillo. Al ser un esquema de primer orden, se puede obtener, de acuerdo con [9], que:

$$\frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t} = F(W^n, t^n) \quad (2.3.10)$$

$$W^{n+1} = W^n + \Delta t \cdot F(W^n, t^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (2.3.11)$$

A este esquema se le conoce también como método de la recta tangente, por el hecho de que básicamente lo que hace es formar una recta tangente al punto de la solución (W^n, t^n) . Una vez elaborada esta recta, encuentra el valor en t^{n+1} para W^{n+1} a partir de ella.

Runge-Kutta de 4 pasos explícito

Por lo que respecta a los métodos Runge-Kutta, son métodos lineales de orden superior multipaso. El hecho de que un integrador temporal sea multipaso significa que se deben realizar diversos cálculos para actualizar el siguiente paso temporal. De esta forma, este integrador calcula el siguiente paso temporal como un promedio de distintos valores de F en el rango $[W^n, W^{n+1}]$, de acuerdo con [9]:

$$k1 = \Delta t F(W^n, t^n) \quad (2.3.12)$$

$$k2 = \Delta t F(W^n + k1/2, t^n + \Delta t/2) \quad (2.3.13)$$

$$k3 = \Delta t F(W^n + k2/2, t^n + \Delta t/2) \quad (2.3.14)$$

$$k4 = \Delta t F(W^n + k3, t^n + \Delta t) \quad (2.3.15)$$

$$W^{n+1} = W^n + \frac{1}{6}(k1 + 2k2 + 2k3 + k4) + \mathcal{O}(\Delta t^5) \quad (2.3.16)$$

Como se puede observar, este tipo de esquema tiene un coste computacional superior al de Euler, pero al mismo tiempo también se espera que sea más estable. Dependiendo de cuanto se pueda aumentar el paso temporal para un caso particular, sale más rentable aplicar este tipo de esquema o no.

Euler implícito de primer orden

Fue el método implícito seleccionado en este proyecto para ser implementado en el solver desarrollado. Es un integrador temporal de primer orden por lo que conducirá probablemente a un mayor error temporal, pero al ser de grado menor que 2 se puede asegurar su A-estabilidad, permitiendo un aumento del paso temporal que tiende a ser extremadamente grande. Sin embargo, el integrador implementado en este caso, debido a las condiciones de contorno empleadas, era de carácter semi-implícito.

Para describir este integrador, se va a partir de la ecuación 2.3.6. Por lo que respecta a la notación, se ha usado el subíndice 0 para el estado temporal n mientras que el subíndice 1 se ha usado para designar aquellas que pertenecen al n+1, es decir, al siguiente paso temporal que se desea calcular.

$$\frac{W_1 - W_0}{\Delta t} = F(W_1, t_1) \quad (2.3.17)$$

$$W_1 - W_0 = \Delta t \cdot F(W_1, t_1) \quad (2.3.18)$$

Como se puede observar, se desea obtener el valor de W_1 , pero no se posee el valor de $F(W_1, t_1)$.

Es necesario hallar esta función entonces, cosa que se puede conseguir mediante una aproximación de Taylor centrada en el instante anterior:

$$F(W_1, t_1) = F(W_0, t_0) + \frac{\partial F}{\partial W}(W_0, t_0)(W_1 - W_0) + \frac{\partial F}{\partial t}(W_0, t_0)(t_1 - t_0) \quad (2.3.19)$$

Sustituyendo 2.3.19 en 2.3.18 se puede obtener que:

$$W_1 - W_0 = \Delta t \cdot (F(W_0, t_0) + \frac{\partial F}{\partial W}(W_0, t_0) \cdot (W_1 - W_0) + \frac{\partial F}{\partial t}(W_0, t_0) \cdot \Delta t) \quad (2.3.20)$$

En forma matricial, la expresión de $F(W, t)$ se puede simplificar como:

$$F(W, t) = A(W, t) + b(t) \quad (2.3.21)$$

Sustituyendo esta expresión en las correspondientes derivadas de 2.3.20 (tanto espaciales como temporales), se puede acabar obteniendo que:

$$W_1 - W_0 = \Delta t \cdot (F(W_0, t_0) + A'(W_0, t_0)(W_1 - W_0) + \dot{b}(t_0)\Delta t + \dot{A}(W_0, t_0)\Delta t) \quad (2.3.22)$$

$$[I - \Delta t A'(W_0, t_0)]W_1 = [I - \Delta t A'(W_0, t_0)]W_0 + \Delta t F(W_0, t_0) + \dot{b}(t_0)\Delta t^2 + \dot{A}(W_0, t_0)\Delta t^2 \quad (2.3.23)$$

$$W_1 = [I - \Delta t A'(W_0, t_0)]^{-1} [[I - \Delta t A'(W_0, t_0)]W_0 + \Delta t F(W_0, t_0) + \dot{b}(t_0)\Delta t^2 + \dot{A}(W_0, t_0)\Delta t^2] \quad (2.3.24)$$

Se desarrolló esta derivación por el hecho de que la formulación propuesta no permitía obtener de forma diferenciada la matriz del sistema, ya que los términos de las ecuaciones no eran completamente lineales. Por este motivo, se expresó en función de $F(W_0, t_0)$, resultando como únicas incógnitas del sistema la matriz jacobiana del mismo $A'(W_0, t_0)$ y la derivada del vector de términos independientes $\dot{b}(t)$, asumiendo que en este caso no había dependencia de $A(W, t)$ con respecto a t .

El cálculo de esta matriz puede resultar bastante tedioso, aunque al mismo tiempo es sistemático. La forma general de los términos de esta matriz era la siguiente, considerando cada uno de los

términos del vector de flujos ($F(W, t)$) en 2.1.36 como F_1, F_2, F_3, F_4, F_5 :

$$A'(W, t) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho_i} & \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho v S_{c_j}} & \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho w S_{c_k}} & \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho u S_{c_i}} & \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho e_i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{20}}{\partial \rho_i} & \frac{\partial F_{20}}{\partial \rho v S_{c_j}} & \frac{\partial F_{20}}{\partial \rho w S_{c_k}} & \frac{\partial F_{20}}{\partial \rho u S_{c_i}} & \frac{\partial F_{20}}{\partial \rho e_i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{30}}{\partial \rho_i} & \frac{\partial F_{30}}{\partial \rho v S_{c_j}} & \frac{\partial F_{30}}{\partial \rho w S_{c_k}} & \frac{\partial F_{30}}{\partial \rho u S_{c_i}} & \frac{\partial F_{30}}{\partial \rho e_i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{40}}{\partial \rho_i} & \frac{\partial F_{40}}{\partial \rho v S_{c_j}} & \frac{\partial F_{40}}{\partial \rho w S_{c_k}} & \frac{\partial F_{40}}{\partial \rho u S_{c_i}} & \frac{\partial F_{40}}{\partial \rho e_i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial F_{50}}{\partial \rho_i} & \frac{\partial F_{50}}{\partial \rho v S_{c_j}} & \frac{\partial F_{50}}{\partial \rho w S_{c_k}} & \frac{\partial F_{50}}{\partial \rho u S_{c_i}} & \frac{\partial F_{50}}{\partial \rho e_i} \end{bmatrix} \quad (2.3.25)$$

Por lo que respecta al segundo subíndice que acompaña a los flujos (F), este hace referencia al centroide o conector en particular donde se está resolviendo la ecuación, en referencia al esquema numérico por volúmenes fluidos presentado en el capítulo 3. Como se puede ver, cada una de las derivadas está expresada respecto de una variable de estado subrayada. Esta notación se ha empleado para destacar que cada uno de estos flujos se deriva respecto de una variable de estado contenida en una serie de centroides o conectores en particular. Este concepto queda más claro al poner un ejemplo: si se supone que el dominio de estudio está compuesto por 4 volúmenes y queremos obtener las derivadas del primer término del vector de flujos respecto de la densidad, sabiendo que la densidad se almacena en el centroide de cada uno de estos volúmenes, se puede deducir que:

$$\frac{\partial F_{10}}{\partial \rho_i} = \left[\frac{\partial F_{10}}{\partial \rho_1} \quad \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho_2} \quad \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho_3} \quad \frac{\partial F_{10}}{\partial \rho_4} \right] \quad (2.3.26)$$

2.4. Condición de estabilidad CFL

Esta condición fue originalmente enunciada por Courant, Friedrichs and Lewis en su artículo [10], el cual trata sobre la aplicación de diferencias finitas en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales. A lo largo de este estudio, se dieron cuenta de que en el proceso de resolución de PDEs un refinamiento de la malla no siempre conducía a una mejora de la solución obtenida, si no que algunas veces la empeoraba, sacando a relucir que existía una relación entre el tamaño de la malla y la estabilidad del sistema. A raíz de esto, se determinó la restricción que los esquemas de integración temporal deben cumplir, y se denominó condición CFL.

Para entender esto hay que considerar que el sistema de ecuaciones objeto del estudio es hiperbólico y que la solución se propaga en el tiempo de tal forma que puede ser capturada por el método de las características. Además, las funciones implicadas en el sistema de PDEs deben ser continuas y derivables. La condición CFL está relacionada con el dominio de dependencia de

la solución, para mostrar esta relación se puede recuperar la ecuación de advección 2.4.1 según [2] con la finalidad de servir como ejemplo, esta ecuación es:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.4.1)$$

Se pueden representar las soluciones obtenidas en el plano (x,t) , siendo $\phi(x,t)$ la solución en algún punto de este plano. Esta solución depende directamente de la condición inicial $\phi_0 = \phi(x,0)$, la cual se propaga en el tiempo de acuerdo con $\phi(x - u \cdot t)$. Por lo tanto se dice que el dominio de dependencia de (x,t) es el punto $x - u \cdot t$:

$$D(x,t) = \{x - u \cdot t\} \quad (2.4.2)$$

Esto quiere decir que si se modifica la solución en ϕ_0 , afectará a la solución en $\phi(x,t)$, pero si esta variación se produce fuera de este punto en particular, no afectará a la solución física en el punto de estudio. Este resultado solo se ve modificado por dos líneas características, suponiendo que la velocidad de propagación de la onda sea muy superior a la del fluido en si: una que se desplaza desde izquierda a derecha, y otra que lo hace a la inversa. Esto se debe a que solo hay dos líneas características que pasen por un determinado punto (x,t) para problemas de este tipo, teniendo en cuenta que para la ecuación de advección, la expresión de la compatibilidad determina que el parámetro estudiado se mantenga constante a lo largo de esta línea.

Esto no es habitual en una PDE, ya que se espera que una solución en un determinado punto del dominio espacio-temporal (x,t) dependa de diversos puntos a lo largo de todo el intervalo. Si se considera un sistema de ecuaciones lineales hiperbólicas como por ejemplo $\frac{\partial \phi}{\partial t} + A \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$, los autovalores de A dan la información de la velocidad de propagación, de tal forma que $\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_m$ pasan a influenciar en la solución mediante $x - \lambda_1 t, x - \lambda_2 t \dots x - \lambda_m t$.

Un esquema de diferencias finitas explota también esta idea. Así pues, en este caso se puede definir el dominio de la dependencia de la solución en el punto (x,t^n) como un conjunto de puntos en el instante t^{n-1} que tienen influencia sobre el punto de estudio. Si se aplica esta definición hasta el instante inicial, se obtiene que la solución en (x^n, t^n) depende de una cascada de puntos a lo largo de los distintos instantes temporales considerados. Esto se puede observar en la siguiente imagen:

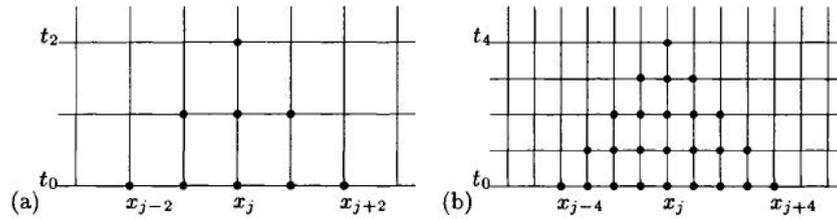


Figura 2.2: Esquema del dominio de dependencia de la solución (a), y al dividir por dos tanto paso temporal como tamaño de malla (b) [2]

Ahora, se puede realizar el mismo planteamiento disminuyendo de igual forma tanto la separación espacial (Δx) como el paso temporal (Δt) de los nodos considerados, por ejemplo, por un ratio de 2, como se puede ver en la anterior Figura 2.2. Si se analiza la dependencia en el mismo punto (x,t) , se puede observar como esta solución depende ahora del doble de puntos, que están situados dentro del mismo rango del plano $x-t$ que el mencionado anteriormente. El dominio de la dependencia queda regulado por $[x - \Delta x \frac{t}{\Delta t}, x + \Delta x \frac{t}{\Delta t}]$, donde $\Delta x \frac{t}{\Delta t}$ indica como se ha propagado la solución desde el punto de vista del esquema de diferencias finitas.

Para que el esquema converja, la línea característica real/física que pasa por (x,t) tiene que estar contenida en ese rango:

$$x - \Delta x \frac{t}{\Delta t} \leq x - u \cdot t \leq x + \Delta x \frac{t}{\Delta t} \quad (2.4.3)$$

Si no, la solución real en (x,t) dependerá de valores que estarán situados fuera del dominio computacional, por lo que los cambios en la realidad no se verán reflejados en el cálculo. Esto es lo que trata de definir la condición CFL, la cual defiende que el dominio numérico siempre debe contener el físico, y lo expresa con la condición matemática:

$$\left| \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x} \right| \leq 1 \quad (2.4.4)$$

Donde λ es el autovalor del problema, el cual viene dado por la suma de la máxima velocidad de propagación de la onda (a) más la velocidad del flujo (u), mientras que Δx es la mínima dimensión característica de las celdas implicadas. A partir de esto surge el número de Courant, como una herramienta para asegurar que esta desigualdad se cumple:

$$\lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} = CFL \quad (2.4.5)$$

Siendo $CFL \leq 1$. Es importante destacar que esta condición es necesaria pero no suficiente. En caso de darse, se requiere realizar un análisis de la consistencia y la estabilidad del sistema para poder asegurar la convergencia del mismo.

2.5. Limitadores de flujo

Para explicar el concepto de limitador de flujo hay que comprender en primer lugar en que consiste el concepto de monotonicidad. Así pues, se dice que un esquema es monotónico cuando para un determinado rango espacial este no posee ningún extremo interno. En otras palabras, si se expresa un esquema general lineal de la forma $f_j^{n+1} = \sum_k c_k f_{j+k}^n$, un esquema es monotónico cuando asumiendo que $f_{j+1}^n > f_j^n$ se obtiene que $f_{j+1}^{n+1} > f_j^{n+1}$.

Los esquemas lineales de primer orden tienen asegurado el hecho de ser monotónicos, calculando de esta forma soluciones suaves a lo largo del dominio, o también denominadas difusivas. Sin embargo, para los esquemas lineales de segundo orden o superior se demostró que, siendo $f_j^{n+1} = \sum_k c_k f_{j+k}^n$ la expresión general de un esquema numérico, estos no cumplían la desigualdad de Cauchy [3]. Por este motivo, no se puede asegurar la monotonicidad de los esquemas de segundo orden o superior y por lo tanto siempre se van a obtener oscilaciones espúreas introducidas por el método numérico.

Para resolver esto, se trató de buscar esquemas alternativos:

- Introducción de viscosidad numérica artificial allá donde se requiera
- Limitar los flujos en aquellas zonas donde el gradiente sea importante de tal forma que las oscilaciones sean evitadas (FCT,MDT,etc)

Estos métodos se pueden aplicar durante el cálculo de las variables de estado o después de cada iteración, como un postproceso que se le está aplicando a los resultados de las variables de estado. En este grupo se encuentran los FCT y MDT. Estos limitadores de flujo modifican la solución de tal forma que en aquellas zonas con grandes gradientes la solución se vuelve más difusiva. Al mismo tiempo, en aquellas zonas donde este gradiente es más moderado, se preserva el orden del esquema. A esto se le denominan esquemas de alta resolución.

MDT

Este método desarrollado en [11] consiste en modificar la ecuación de cantidad de movimiento, teniendo en cuenta que estas ecuaciones están desacopladas en las 3 direcciones del espacio como se explicará más adelante, de forma que se añade un término adicional que trata de emular a la difusión del sistema de forma completamente artificial. Este término reconstruye una viscosidad artificial a partir de la velocidad, que al mismo tiempo reconstruye el término difusivo al emplear el gradiente de la cantidad de movimiento almacenada a lo largo de los distintos nodos del dominio. De esta forma, cuando el gradiente de cantidad de movimiento es muy abrupto, la difusión actúa para tratar de suavizarla; si el gradiente es prácticamente nulo, la difusión introducida también lo será.

FCT

Este es un método de postproceso de los resultados expuesto en [12] que se divide en básicamente en tres partes: una primer parte de resolución de las ecuaciones de transporte para obtener el paso temporal $n+1$, la aplicación de la difusión a lo largo del dominio y la recuperación de la solución mediante el operador antidifusivo donde el gradiente obtenido esté por debajo del límite establecido por el operador, de esta forma se recupera la precisión del esquema de alto orden donde no existan grandes gradientes de las variables de estado, mientras que se deja la solución difusiva donde estas diferencias sean importantes.

En cuanto a la fase difusiva, simplemente consiste en emplear un operador lineal en aquellos puntos donde se almacene una variable de estado. Este operador consiste en:

$$D_i(W_i) = \theta(W_{i+1/2}) - \theta(W_{i-1/2}) \quad (2.5.1)$$

Es importante destacar que i determina el volumen donde se almacena la variable de estado mientras que $i+1/2$ es la interpolación que se produce a medio camino entre ambos volúmenes, es decir, el valor en la frontera en cuestión. Al mismo tiempo este valor de θ viene determinado por:

$$\theta(W_{i+1/2}) = \frac{\vartheta}{4} \cdot (W_{i+1} - W_i) \quad (2.5.2)$$

Donde ϑ es un coeficiente de difusión impuesto por el usuario, cuyo valor será como mínimo 0.5. Este valor resultó ser crucial, como se verá más tarde en el presente documento, para tratar de conseguir el máximo paso temporal posible sin perder precisión en cuanto a la solución aportada. De esta forma, la corrección de las variables de estado viene dada por:

$$\overline{W}_i^{n+1} = W_i^{n+1} + D_i(W_i^n) \quad (2.5.3)$$

Esta modificación del vector W consiste en aplicar difusión a la solución mediante amortiguamiento. Existen otras alternativas para realizar esta parte difusiva, como por ejemplo por suavizado, donde simplemente se aplica el operador difusivo al paso temporal $n+1$ ($D_i(W_i^{n+1})$). En el presente proyecto, se ha empleado el primero de ellos por recomendación de la bibliografía consultada [5].

Finalmente, se debe aplicar un operador antidifusivo con tal de recuperar la solución previa en aquellas zonas donde los gradientes no sean extremadamente grandes. Básicamente, este operador compensa la acción de la difusión aplicada en aquellas zonas donde el gradiente de la variable de estado en cuestión no sea más grande que un determinado límite. En este caso, el operador antidifusivo viene delimitado por la función A_i y actúa directamente sobre la solución difusiva:

$$A_i(W) = \Psi(W_{i+1/2}) - \Psi(W_{i-1/2}) \quad (2.5.4)$$

Esta función $\Psi(W)$, que trata de regular matemáticamente cuando la solución debe ser recupe-

rada a partir de los valores del gradiente, se puede definir según [5] como:

$$\Psi(W_{i+1/2}) = s \cdot \max \left[0, \min \left(\frac{5}{8}s\Delta W_{i-1/2}, \frac{1}{8}|\Delta W_{i+1/2}|, \frac{5}{8}s\Delta W_{i+3/2} \right) \right] \quad (2.5.5)$$

Donde $s = \text{signo}(\Delta W_{i+1/2})$, $\Delta W_{i-1/2} = W_i - W_{i-1}$, $\Delta W_{i+1/2} = W_{i+1} - W_i$ y $\Delta W_{i+3/2} = W_{i+2} - W_{i+1}$. Una vez definidos estos límites, cabe destacar que existen diferentes alternativas a la hora de emplear el operador antidifusivo, ya que se puede usar tanto en la solución del paso anterior sin modificar $A_i(W_i^n)$, como en el que se acaba de calcular sin modificar $A_i(W_i^{n+1})$, así como la nueva solución modificada $A_i(\bar{W}_i^{n+1})$.

En el caso de estar en contacto con uno de los extremos del dominio, se tiene que tener en cuenta que tanto $\Delta W_{i+3/2}$ como $\Delta W_{i-3/2}$ no pueden existir, ya que no existen valores almacenados en esas posiciones. Por este motivo, se ha modificado las funciones limitadoras de flujo con tal de reflejar este hecho [5]. En el caso del extremo derecho, el limitador pasa a ser:

$$\Psi(W_{i+1/2}) = s \cdot \max[0, \min(\frac{5}{8}s\Delta W_{i-1/2}, \frac{1}{8}|\Delta W_{i+1/2}|)] \quad (2.5.6)$$

Para el extremo izquierdo, el limitador es:

$$\Psi(W_{i-1/2}) = s \cdot \max[0, \min(\frac{1}{8}|\Delta W_{i-1/2}|, \frac{5}{8}s\Delta W_{i+1/2})] \quad (2.5.7)$$

2.6. Tipos de condiciones de contorno- condición de pared

En este trabajo, se iba a considerar la posibilidad de introducir diversos tipos de condiciones de contorno, como el extremo anecoico o la introducción de un pulso de presión. A causa de la falta de tiempo, solamente se ha llegado a aplicar la condición de pared, que básicamente se caracteriza por no tolerar que ningún tipo de flujo, ya sea de cantidad de movimiento o entálpico, circule a través de la pared ($\vec{u} = 0$). Por este motivo, se han impuesto una serie de valores de tipo Dirichlet a lo largo del contorno en contacto con el límite del dominio, que son idénticos con los valores iniciales de interés ($\rho, \rho\vec{u}S_c, T, P$). Para conocer exactamente como se introdujo esta condición en el esquema numérico es necesario acudir al Capítulo 3.

2.7. Resolución numérica de las ecuaciones de Euler en coordenadas cilíndricas - El problema de la singularidad

La resolución de las ecuaciones de Euler en coordenadas cilíndricas es un trabajo interesante dentro de la mecánica de fluidos, ya que puede permitir el análisis de problemas sumamente relevantes en la industria como puede ser el chorro que sale a través de la tobera de un aeroreactor.

Si se piensa por un instante en la formulación general de las ecuaciones de Euler en este tipo de

coordenadas, se puede ver como muchas veces aparece un término radial dividiendo en algunos sumandos de las ecuaciones de transporte, generando una singularidad en el origen del sistema de referencia. Por este motivo, no es posible calcular la solución de estas ecuaciones en la región más próxima a este origen, ya que algunos términos de las ecuaciones de transporte tenderán a infinito ahí. A continuación, se adjuntan las expresiones de las ecuaciones de Euler asumiendo que no hay fuerzas volumétricas para flujo compresible con la finalidad de que el lector pueda observar todos estos inconvenientes:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \rho u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} = 0 \quad (2.7.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} - \frac{u_\theta^2}{r} \right) = - \frac{\partial P}{\partial r} \quad (2.7.2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_x \frac{\partial u_\theta}{\partial x} + \frac{u_\theta u_r}{r} \right) = - \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} \quad (2.7.3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_x}{\partial r} + \frac{u_x}{r} \frac{\partial u_x}{\partial \theta} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x} \quad (2.7.4)$$

$$\frac{\partial \rho e_0}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r(\rho e_0 + P)u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial ((\rho e_0 + P)u_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial ((\rho e_0 + P)u_x)}{\partial x} = 0 \quad (2.7.5)$$

Como se puede observar, la coordenada radial aparece dividiendo en todas ellas, por lo que cuando r tiende a 0, muchos términos de las ecuaciones lo hacen a infinito, suponiendo un problema para el cálculo de la solución.

Este inconveniente ha sido objeto de estudio en múltiples publicaciones del campo, tratando de hallar alguna forma de lidiar con ella. Una práctica bastante común era tratar con este punto singular como si fuera una condición de contorno, variando la formulación de las ecuaciones con tal de tener en cuenta la presencia de este polo. El problema es que mediante este método aparecían una serie de problemas numéricos, como puede ser la generación de oscilaciones espúreas [13], que han alentado a buscar otras alternativas. En otros casos, se ha tratado de evitar la presencia de este tipo de polos redefiniendo la posición de los centroides y evitando situar ninguno de ellos en la singularidad [14].

Existen alternativas en las que el tratamiento de la singularidad en si está más relacionado con la formulación del esquema numérico propuesto. En [15], se trata esta singularidad empleando un esquema numérico mixto que mezcla tanto ecuaciones en volúmenes fluidos como en diferencias finitas relacionadas mediante criterios de equivalencia, los cuales unen los parámetros geométricos del planteamiento en VF (volúmenes, normales...) con las integrales de diferencias finitas. En último lugar en este repaso bibliográfico, también existen alternativas basadas puramente en diferencias finitas donde se utilizan esquemas numéricos de tipo WENO en la dirección radial para tratar de mejorar los resultados obtenidos [16]. Estos esquemas numéricos de alta resolución se caracterizan por preservar la precisión en aquellas zonas del dominio donde la solución es suave, mientras que allá donde se produce una gran discontinuidad trata de ofrecer una solución estable y sin oscilaciones.

En el presente trabajo se optó por una aproximación del problema más enfocada al tratamiento del esquema numérico, como se ha comentado en estos últimos ejemplos. El hecho es que, tal y como se comenta en [17], si se trata con la forma general de las ecuaciones de Euler (2.1.32, 2.1.33 y 2.1.34), el operador diferencial y la forma de las ecuaciones es exactamente idéntica en coordenadas cilíndricas respecto a lo obtenido en cartesianas, salvo por algunos términos fuente que aparecen. Por este motivo, se decidió afrontar el problema de la forma más simple posible en este proyecto, empleando las ecuaciones de Euler previamente mencionadas en su forma general. Para poder realizar esta aproximación, se asumió que tanto los términos fuente como los productos cruzados de las ecuaciones de cantidad de movimiento fueran considerados como nulos, además de ser conscientes de que el esquema no iba a ser completamente conservativo.

De esta forma, no era necesario lidiar con ninguna singularidad ya que no intervenía directamente en la formulación. Sin embargo, aparecieron otros problemas igualmente importantes, ya que se necesitaba lidiar en este caso con dos volúmenes distintos producto de la discretización del dominio fluido, así como la necesidad de definir el comportamiento del flujo en los volúmenes en contacto con la singularidad. Todos estos inconvenientes y algunos más han sido tratados en la sección de implementación del código en cilíndricas en el capítulo 3.

Capítulo 3

Implementación numérica

En este apartado se ha descrito de forma más detallada como se discretizaron las ecuaciones de Euler, tanto espacialmente como temporalmente, con tal de adaptarlas a una malla escalonada en 3D. Además, se trató de implementar las distintas condiciones de contorno en el esquema numérico desarrollado, haciendo uso de las denominadas celdas fantasma.

Finalmente, se usaron distintos tipos de limitadores de flujo con tal de ver si realmente estos producían alguna mejoría en la solución obtenida, adaptando su formulación a las particularidades del esquema 3D de malla escalonada. Finalmente, se ha desarrollado el método explicado en el capítulo 2 para las coordenadas cilíndricas, cambiando el planteamiento particular de las ecuaciones cartesianas.

3.1. Esquema numérico

Al igual que en cualquier cálculo realizado con un software de mecánica de fluidos computacional, uno de los primeros pasos a la hora de resolver el problema fue elegir que tipo de malla se iba a emplear teniendo en cuenta las particularidades de la aplicación en cuestión. En este caso, era necesario tener en cuenta que estaba enfocado a reflejar fenómenos tridimensionales en conductos, por lo que su malla iba a estar compuesta por elementos del mismo tipo (cubos, tetraedros, etc). También era importante saber si la malla iba a ser de tipo estructurado o no, ya que una malla estructurada permitía acelerar la convergencia del cálculo pero al mismo tiempo podía ser bastante difícil de conseguir en una geometría compleja. Por otra parte, una malla no estructurada era más sencilla de elaborar pero al mismo tiempo requería un mayor coste computacional.

Otro aspecto crucial era saber si la malla sería escalonada, o bien, colocada. Por lo que respecta a las mallas colocadas, al estar todas las variables almacenadas en los mismos lugares geométricos, se puede conseguir un ahorro de coste computacional del sistema. Sin embargo, la poca correlación existente en mallas regulares de este tipo entre la presión almacenada en la celda y

la velocidad, produce que en ocasiones la presión muestre oscilaciones espúreas a lo largo del dominio a pesar de haber resuelto el esquema de forma correcta ('checkerboarding solution'). En el caso de las mallas escalonadas, lo que sucede es que el coste computacional es mayor, ya que las variables escalares están almacenadas en el centroide de la celda, mientras que las vectoriales se encuentran en el centro de las caras de cada uno de los volúmenes fluidos. Por contra, este método posee una mayor estabilidad, ya que relaciona estrechamente la presión registrada en la celda, con la interpolada en los límites de la misma, existiendo un acoplamiento entre presión y velocidad que elimina estas oscilaciones espúreas en la solución de la presión.

Teniendo en cuenta las distintas ventajas e inconvenientes que tienen cada una de las elecciones, se decidió que este método fuera de malla escalonada en 3D, donde los volúmenes fueron inicialmente de forma ortoédrica. De esta forma, la discretización de las ecuaciones de Euler se simplificaba de forma importante, así como el cálculo de las áreas y volúmenes que intervenían en el problema. Una vez obtenido el modelo con esta configuración, se trató de implementar el mismo método en coordenadas cilíndricas con tal de reducir el error espacial que pudiera aparecer, al poder modelar exactamente la geometría de un conducto real. En la conversión a coordenadas cilíndricas, existían varias dificultades intrínsecas al desarrollo del modelo: dos tipos de volúmenes distintos, las áreas limítrofes de cada una de las caras no eran siempre las mismas... Todos estos pormenores se tuvieron en cuenta a la hora de desarrollar el modelo, y se han explicado a lo largo del presente informe.

Sin embargo, la propiedad más importante a destacar de este modelo es la forma en la que se guardaron las distintas variables de estado. En este caso, se decidió que la malla fuera de tipo escalonada, de tal forma que las variables escalares (densidad, presión, energía) se almacenaran por un lado, mientras que las variables vectoriales lo hicieran en otro. La particularidad de este método consistía en que estas variables escalares se almacenaban en los centroides de los volúmenes, mientras que la cantidad de movimiento pasaba a estar almacenada en la superficies de contacto, denominadas conectores. Estas superficies guardaban la cantidad de movimiento que las atravesaba en la dirección normal, pudiendo ser tanto positivas como negativas según la dirección del flujo respecto del sistema de referencia global considerado.

De esta forma, al no considerar los términos cruzados de las ecuaciones de la cantidad de movimiento (2.1.36), su discretización se simplificó enormemente, ya que se pasó de un enfoque en 3D a uno en 1D, empleando en este caso 3 ecuaciones 1D de la cantidad de movimiento, planteadas en las direcciones normales de cada uno de los conectores.

Por lo que respecta a la formulación numérica del método, se siguieron las indicaciones expuestas en [5], se consideraron en primer lugar tanto las ecuaciones de conservación de la masa como la de la energía, las cuales han sido presentadas como $\frac{\partial W}{\partial t} = F(w, t)$. En la formulación de la ecuación de conservación de la masa, partiendo de 2.1.8, se puede obtener integrando en el

volumen fluido (Ω_i) que:

$$\int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) \right) d\Omega_i = 0 \quad (3.1.1)$$

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \int_{S_c} (\rho_c \vec{u}_c \cdot \vec{n} dS_c) \quad (3.1.2)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \frac{1}{V_i} \sum_{c=1}^{N_c} (\rho_c u_c S_c) \quad (3.1.3)$$

Donde el subíndice i viene a indicar la variable almacenada en el centroide de la celda, mientras que el subíndice c hace referencia a las variables en los conectores, siendo N_c en el número de caras del volumen fluido considerado. Además, V_i viene a ser el valor del volumen de la celda en particular. Por lo que respecta a la ecuación de la energía, el desarrollo es prácticamente idéntico, teniendo en cuenta que la entalpía total se puede desgranar en términos de presión y energía total:

$$\rho h_0 = \rho e_0 + P \quad (3.1.4)$$

Así pues, la discretización resultante es:

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial(\rho e_0)}{\partial t} d\Omega_i = \int_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot (\rho h_0 \vec{u}) d\Omega_i \quad (3.1.5)$$

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial(\rho e_0)}{\partial t} d\Omega_i = \int_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} (\rho e_0 + P) d\Omega_i \quad (3.1.6)$$

$$\frac{\partial(\rho e_0)_i}{\partial t} = \frac{1}{V_i} \int_{S_c} ((\rho e_0)_c + P_c) \vec{u}_c \cdot \vec{n} dS_c \quad (3.1.7)$$

$$\frac{\partial(\rho e_0)_i}{\partial t} = \frac{1}{V_i} \sum_{c=1}^{N_c} ((\rho e_0)_c + P_c) u_c S_c \quad (3.1.8)$$

Cabe recordar que los valores de presión, energía y densidad en los conectores se obtienen básicamente al interpolar los valores almacenados en los centroides, ya sea por un método upwind de primer orden o un k-scheme de alto orden.

Por lo que respecta a la cantidad de movimiento, el gasto másico que fluye en dirección normal a un conector determinado está almacenado en la posición espacial de dicho conector. Por este motivo, al discretizar estas ecuaciones, se obtiene que es necesario hallar la cantidad de movimiento de la dirección en cuestión almacenada tanto en el volumen de la izquierda, como en el

de la derecha del conector, dando como resultado las siguientes expresiones:

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho u}{\partial t} d\Omega_i = - \int_{\Omega_i} (\nabla \rho u^2 + \nabla P) d\Omega_i \quad (3.1.9)$$

$$\int_{\Omega_i} \frac{\partial \rho u}{\partial t} d\Omega_i = - \int_{\Omega_i} \nabla [\rho u^2 + P\bar{I}] d\Omega_i \quad (3.1.10)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i S_c)}{\partial t} = - \frac{1}{\Delta L} \sum_{caras}^{N_{caras}} (\rho u_{caras}^2 + P_{caras}) S_{caras} \quad (3.1.11)$$

Cabe recordar que la aproximación es en 1D, por lo que las únicas caras que se ven afectadas del nuevo volumen fluido son aquellas paralelas a la cara común de los dos centroides originalmente considerados, indicando en este caso el subíndice i la variable almacenada en el conector. Además, la velocidad empleada es la proyección de la velocidad almacenada en el volumen en la dirección normal a la del conector (u_{L_N} y u_{R_N}), conduciendo a una situación como la que se puede observar en el siguiente esquema:

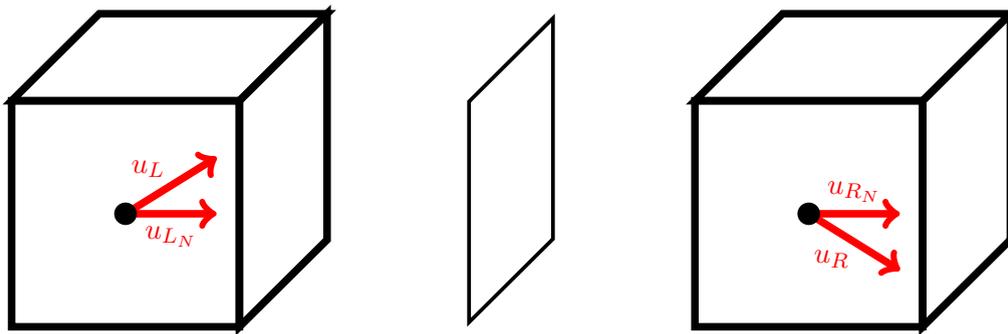


Figura 3.1: Proyección de las velocidades almacenadas en los centroides adyacentes al conector en cuestión.

De esta forma, teniendo en cuenta que solamente se consideran los términos de la velocidad no cruzados, la formulación acaba convirtiéndose en:

$$\frac{\partial(\rho u_i S_c)}{\partial t} = \frac{1}{\Delta L} ((\rho u_{L_N}^2 + P_L) - (\rho u_{R_N}^2 + P_R)) S_c \quad (3.1.12)$$

Es importante destacar que el resultado es el mismo que si se hubieran discretizado las ecuaciones siguiendo un esquema de diferencias finitas. En este caso, el enfoque inicial ha sido plantearlas en un volumen 3D que estuviera centrado en la posición donde están almacenadas las componentes de la velocidad. Como los conectores solamente almacenan una componente de esta magnitud, la aproximación se simplifica por si misma, al solo afectar los volúmenes a izquierda y a derecha.

Sin embargo, sigue siendo necesario reconstruir las componentes de la velocidad y abatirlas en la correspondiente dirección normal tal y como se apunta en [5], para lograr esto se realizó una reconstrucción lineal de la cantidad de movimiento de forma vectorial en los centroides,

empleando la cantidad de movimiento almacenada en cada uno de los conectores. Se asumió que la cantidad de movimiento almacenada en los conectores se repartía en los volúmenes adyacentes dependiendo del tamaño relativo de cada uno de ellos. En otras palabras, si uno de los volúmenes que une un conector es el doble de grande que el otro, también retendrá el doble de cantidad de movimiento que el otro. De esta forma, la expresión general para reconstruir la velocidad del volumen interno (V_i) en una dirección aleatoria x viene a ser:

$$\rho u_i^n V = \left(\frac{V_i}{V_{i+1} + V_i} \rho u_{i+1/2}^n S_c + \frac{V_i}{V_{i-1} + V_i} \rho u_{i-1/2}^n S_c \right) \Delta L_i \quad (3.1.13)$$

Donde V_i , V_{i+1} , V_{i-1} hacen referencia respectivamente al volumen que se está calculando (V_i), el que se sitúa una posición más alejada espacialmente (V_{i+1}) y una más próxima (V_{i-1}). Por lo que respecta al valor de los conectores, se realizó una interpolación ponderada de la información en contacto con el volumen, involucrando de igual forma la distancia entre los puntos de almacenamiento de la cantidad de movimiento (ΔL_i), es decir, la distancia entre caras.

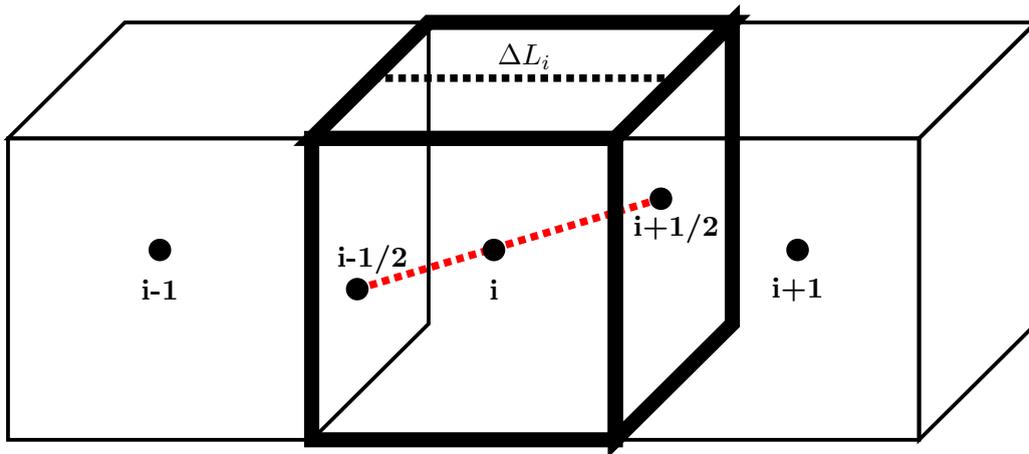


Figura 3.2: Imagen de la interpolación lineal en el volumen para obtener la cantidad de movimiento en el centroide.

Una vez definidas todas las derivadas temporales de las distintas variables conservativas (ρ , $\rho \vec{u} S$, ρe_0), es necesario recurrir a la ecuación de estado con tal de resolver el problema y poder propagar la presión al siguiente paso temporal. Recordando la expresión de la energía total (2.1.20) y la energía interna específica (2.1.26), se puede encontrar en primer lugar la temperatura para acabar hallando la presión en cuestión:

$$(\rho e_0)_i = \rho_i \left(C_v T_i + \frac{|\vec{u}_i|^2}{2} \right) \quad (3.1.14)$$

$$T_i^n = \frac{1}{C_v} \left(\frac{(\rho e_0)_i^n}{\rho_i^n} - \frac{|\vec{u}_i|^2}{2} \right) \quad (3.1.15)$$

$$P_i^n = \rho_i^n R T_i^n \quad (3.1.16)$$

Finalmente, hay que detallar también como se adaptó el criterio CFL para calcular el máximo paso temporal estable. Así pues, cabe recordar que en el cálculo del máximo paso temporal son necesarios una longitud característica y el conocimiento de los autovalores involucrados en el problema. Cabe destacar también que el número de Courant está comprendido normalmente entre los valores 0 y 1, estando habitualmente por encima de 0.9 [5]. A pesar de esto, este número permite regular el paso temporal y por lo tanto su valor depende en gran medida también del tipo de integración temporal que se está empleando, como se observará en posteriores secciones.

Por lo que respecta a la longitud característica, al estar tratando con volúmenes en 3D, se escogió un ratio entre el volumen de la celda y la máxima área de las caras que la constituyen. Para los autovalores, se trató de hallar la máxima velocidad de la onda que se puede dar en el dominio discretizado (c_{max}):

$$\Delta t = CFL \frac{\Delta x}{c_{max}} = CFL \left(\frac{V}{S_c} \right)_{min} \frac{1}{c_{max}} \quad (3.1.17)$$

$$c_{max} = \max(|u_i| + a_i) \quad (3.1.18)$$

$$a_i = \sqrt{\gamma RT_i} \quad (3.1.19)$$

Así pues, se puede observar como este criterio es extremadamente conservador, ya que trata de encontrar aquella región donde la relación tamaño de celda-velocidad del flujo sea la menor posible y emplear un paso temporal menor al dado por este ratio, modificándolo mediante el número de Courant. De esta forma, se asegura que en el instante t de cálculo la información ya haya llegado físicamente al punto donde se está intentando obtener las variables de estado computacionalmente, y que por lo tanto la solución obtenida sea una actualización razonable de la anterior.

3.2. Estructura del programa en cartesianas

Una vez descrita la integración de las ecuaciones en los volúmenes fluidos y las distintas simplificaciones asumidas, es hora de describir como se ordenó el almacenamiento de todas las variables conservativas. Se ha considerado importante describir la denominada ‘conectividad’, tanto de los volúmenes como de los conectores, por el hecho de que es una idea abstracta que implica la forma particular elegida en este caso para resolver el problema. De esta forma, se facilita y acelera el proceso de comprensión y adaptación del código en futuros trabajos por gente que no haya estado directamente implicada en su desarrollo original.

En primer lugar, cabe destacar que el sistema de referencia se escogió de forma completamente aleatoria: el eje Y corresponde al eje horizontal del área transversal de entrada, el eje Z como el eje vertical y el eje X como el eje longitudinal. Además, el origen del mismo se situó en la esquina inferior izquierda de la parte delantera del dominio de estudio, por lo que todas las coordenadas de los centroides implicados y demás eran positivos.

Una vez definido el sistema de coordenadas, ya se puede empezar a describir la conectividad de los conectores y los volúmenes, que no fue otra cosa que poner a cada conector y volumen un identificador distinto de tal forma que se pudiera saber, accediendo a estas matrices, con qué volúmenes y conectores estaban en contacto cada uno de ellos. Para realizar esta tarea, simplemente se decidió enumerar los volúmenes en un determinado orden, de forma que se empezaba con el que más cerca se encontraba del sistema de referencia como 0, luego se prosiguió contando por la misma fila a medida que la coordenada Y iba aumentando. Una vez finalizada, se pasó a la siguiente fila en dirección Z y se siguió contando de igual forma. Cuando ya no había más filas en Z , se continuó con la siguiente división en X y se siguió contando con el mismo sistema. Para poner un ejemplo gráfico, se ha decidido elaborar un esquema donde se muestra el proceso de numeración en un dominio fluido dividido en 4 unidades para la dirección horizontal, 5 para la dirección vertical y 2 de acuerdo con la profundidad.

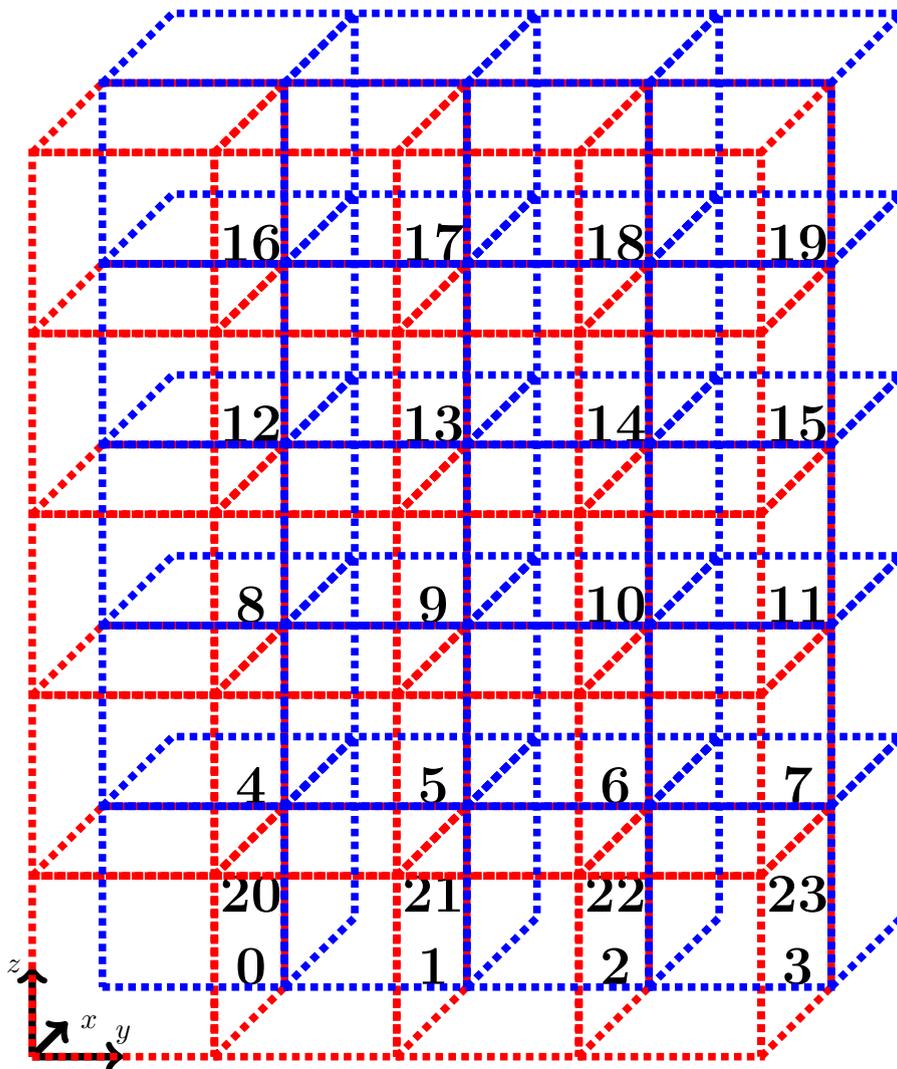


Figura 3.3: Sistema de numeración de los volúmenes en cartesianas y posicionamiento del S.R.

Por lo que respecta a los conectores, se agruparon para su numeración de forma totalmente independiente entre ellos dependiendo de su dirección normal, es decir, todos los que tenían por ejemplo la dirección Y se numeraban de forma consecutiva siguiendo el sistema descrito para los volúmenes, a la hora de hacer lo mismo con los de la dirección Z el conteo se volvió a reiniciar desde 0 independientemente de cuantos conectores habían en la dirección anterior, para la dirección X se hizo exactamente lo mismo. Aún así, cabe destacar que era necesario obtener un identificador global que permitiera almacenar todas las variables de forma conjunta para poder localizarlas a la hora de elaborar la matriz jacobiana necesaria para el cálculo mediante el integrador implícito. En este identificador global se almacenó en primer lugar la densidad en los centroides, la cantidad de movimiento en las direcciones Y, Z, X correspondientemente en segundo lugar, y finalmente la energía total. Es importante destacar también que los conectores numerados son solamente aquellos donde era necesario calcular la cantidad de movimiento que albergaban en ellos, es decir, los conectores en contacto con las condiciones de contorno se numeraron por separado siguiendo su propio sistema, pero no se incluyeron en el mismo registro que el resto de conectores. A continuación, se adjunta otro diagrama donde viene recogida esta numeración para los distintos tipos de conectores según la dirección normal:

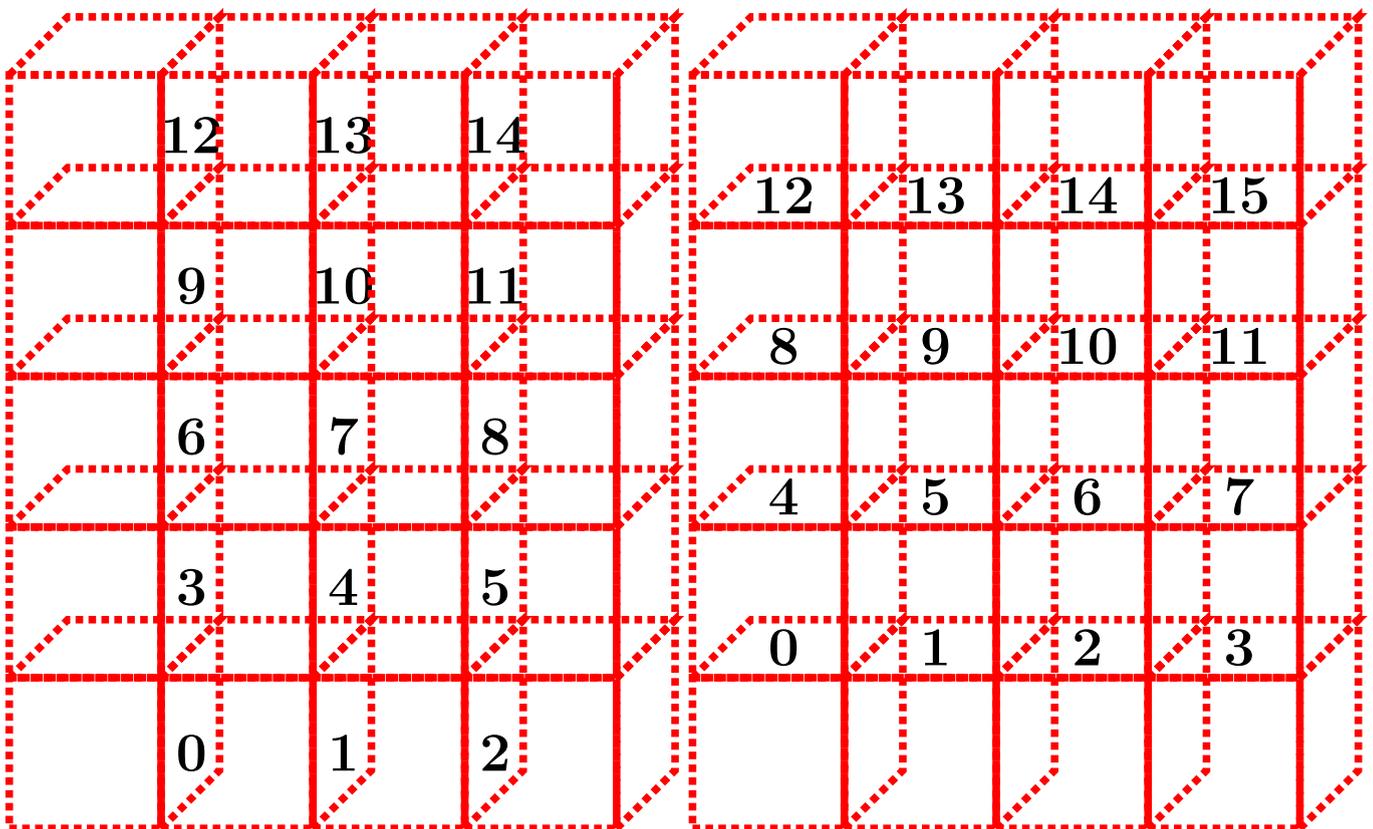


Figura 3.4: Numeración de los conectores en cartesianas en la dirección Y (izquierda) y en la dirección Z (derecha).

El caso de los conectores en X no se ha incluido por el hecho de que no había suficiente espacio, pero el sistema es exactamente el mismo. En último lugar por lo que respecta a la numeración de conectores, se ha mencionado que aquellos que estaban en contacto con una condición de contorno no se contaron de la misma forma que el resto de conectores, ni formaron parte del sistema de ecuaciones. En estos casos, todos los conectores que se encontraban en esta situación se les asignó un número de forma consecutiva, a diferencia de lo que había sucedido anteriormente. Los primeros conectores fueron los situados en el plano $X-Z$ de menor coordenada Y , para luego seguir con los de mayor coordenada. Una vez terminado con estos, se numeró los situados en el plano inferior $Y-X$ para seguir con los del superior, siguiendo con el mismo sistema en los del plano $Y-Z$. Esto se hizo con la finalidad de almacenar las coordenadas de todos estos centroides para ofrecer la posibilidad de introducir condiciones de contorno que no solamente dependan del tiempo, si no de la posición espacial que estén ocupando, además de poder almacenar los valores de las variables de interés en cada uno de estos conectores de forma ordenada.

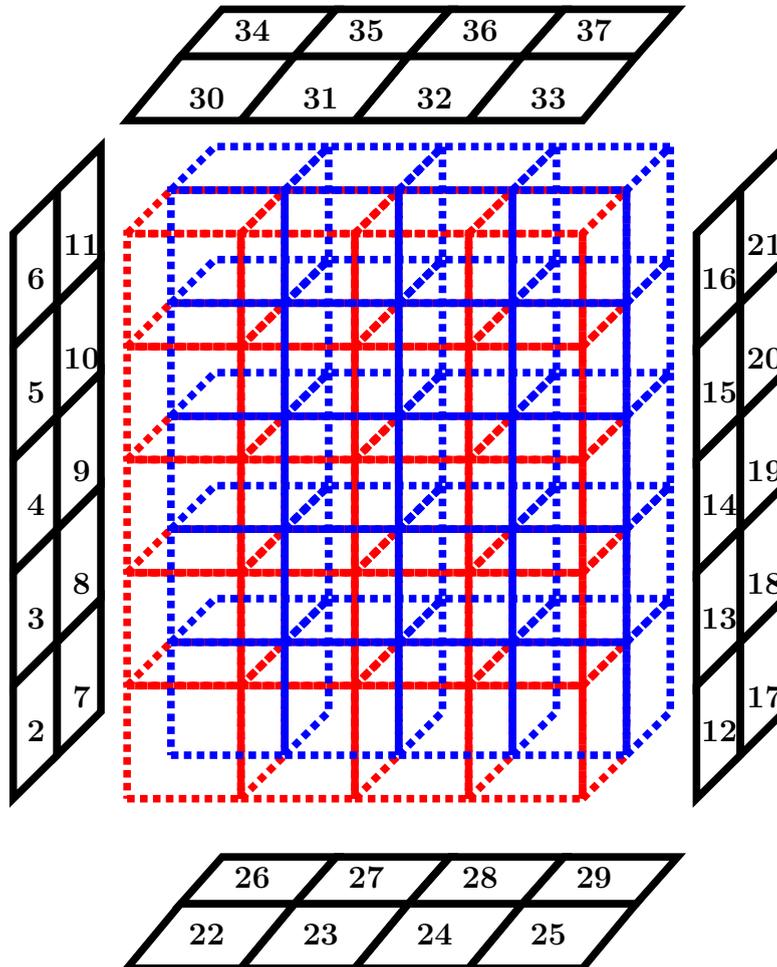


Figura 3.5: Numeración de los conectores en contacto con las condiciones de contorno en cartesianas.

Por último, es importante comentar el esquema básico del algoritmo que se empleó en el código, ya que esta es la información de mayor utilidad para futuros proyectos. A fin de evitar una sobrecarga de información en el mismo diagrama, se ha tratado de dividir su contenido en distintos esquemas: el de la función principal del programa, el de la función ‘actualiza’ y el de la función ‘cálculo nuevo estado’. En este caso, se ha considerado el primero de ellos:

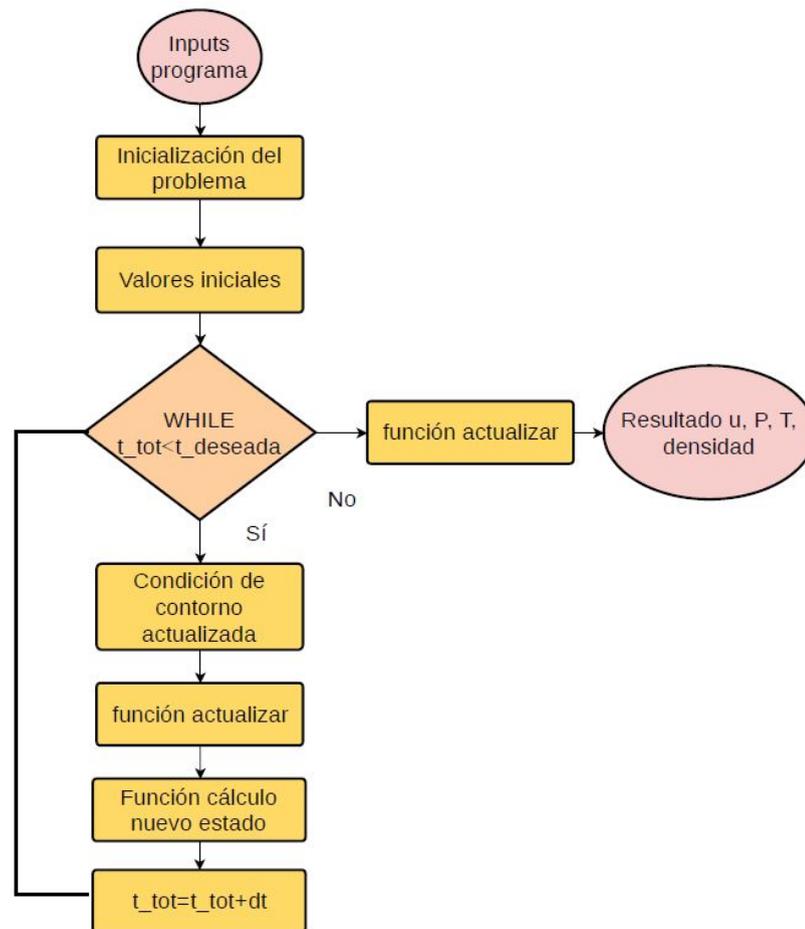


Figura 3.6: Esquema de la función principal del programa

En la función principal de cálculo se trata de hallar el vector de estados, los valores de la presión y la velocidad después de alcanzar un determinado instante temporal. Para conseguir esto, el procedimiento se implementó de forma secuencial de la siguiente forma:

- Inicialización del problema: en esta función se configuran todas las matrices auxiliares de cálculo y de conectividad necesarias para completar el algoritmo, de acuerdo con los parámetros geométricos de entrada (diámetro hidráulico, longitud, números de divisiones por eje...)
- Valores iniciales: se le asigna un valor inicial tanto a las variables de estado, como a la

presión y a la temperatura dependiendo de las funciones iniciales introducidas en el código.

- Condición de contorno actualizada: las condiciones de contorno se reevalúan en cada instante temporal para almacenar en los conectores en cuestión los valores adecuados.
- Función ‘actualiza’: esta función se encarga de hacer que el paso temporal que se acaba de calcular en la iteración anterior del bucle sea reconocido como la solución anterior, actualizando los valores de la velocidad en los centroides y de las variables de estado volumétricas en los conectores consecuentemente.
- Función ‘cálculo nuevo estado’: calcula el nuevo paso y mediante el empleo del esquema de integración temporal seleccionado, se propaga la solución en el tiempo calculando las derivadas temporales correspondientemente.

Finalmente, se suma el paso temporal al tiempo total que ya se había calculado, si al inicio de la siguiente iteración este tiempo se mantiene por debajo del tiempo deseado de cálculo, se vuelve a realizar una nueva iteración, si no, se sale del bucle while y se obtiene la solución del problema. Dentro de este bucle, existen dos funciones que merecen una explicación más detallada debido a su complejidad, estas son la función ‘actualiza’ y la función ‘cálculo nuevo estado’.

Por lo que respecta a la función ‘actualiza’, su algoritmo sería básicamente el siguiente:

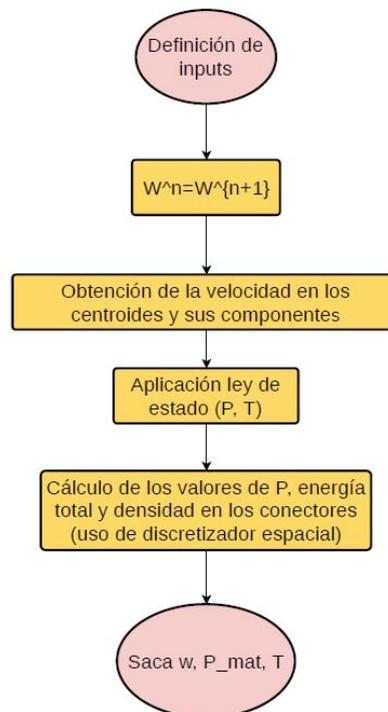


Figura 3.7: Esquema de la función ‘actualiza’

En esta función, se establece que el paso temporal nuevo calculado en la iteración del bucle

anterior pase a considerarse como la solución del paso n . Esto es importante ya que hay que recordar que en los integradores explícitos, la solución del siguiente paso temporal se calcula con los datos del anterior. En los integradores implícitos, esto es indiferente ya que no se hace uso de estos valores en los conectores, directamente se deja todo en función de las variables de estado situadas tanto en los centroides como en los conectores correspondientemente. El siguiente paso, es la obtención de la velocidad en los centroides utilizando la fórmula 3.1.13 para hallar cada una de las componentes de la velocidad, luego se divide cada una de ellas por la densidad del centroide y su volumen para finalmente hallar el módulo de la velocidad calculando la norma de estas nuevas componentes. A continuación se emplea la secuencia de ecuaciones 3.1.14, 3.1.15 y 3.1.16 para usar la ley de estado con el fin de hallar las presiones y las temperaturas en los distintos centroides. Una vez calculados todos estos parámetros, se obtiene como productos de la función el vector de estados del paso anterior y las nuevas temperaturas y presiones que se van a emplear.

Por último, en la función ‘cálculo nuevo estado’ se buscan los valores del nuevo vector de estados, es decir, se obtiene como respuesta de la función el siguiente paso temporal. El algoritmo empleado para esta subrutina es el siguiente:

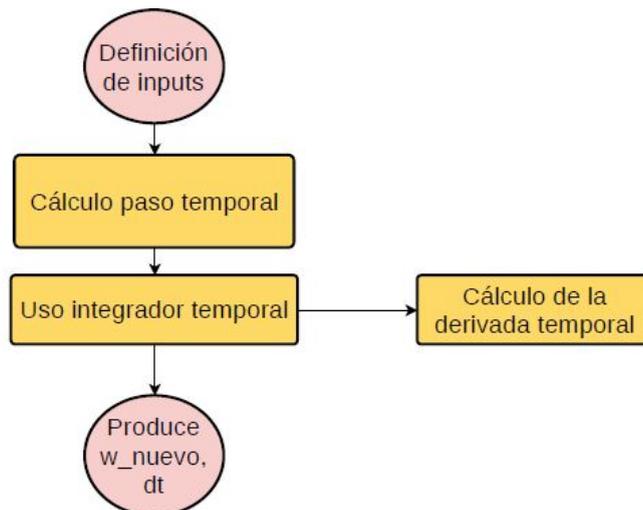


Figura 3.8: Esquema de la función ‘cálculo nuevo estado’

Para hacerlo, simplemente se definen en primer lugar los parámetros de la función, luego se calcula el siguiente paso temporal mediante 3.1.17, 3.1.18 y 3.1.19 empleando la temperatura y la velocidad calculadas en la función ‘actualiza’. Finalmente, se calcula el siguiente vector de variables de estado utilizando el integrador que se haya seleccionado en cada caso, estos integradores temporales llaman al mismo tiempo a otra función encargada de calcular las derivadas temporales según la variables de estado de entrada (provenientes del paso temporal anterior en el caso explícito) y el paso temporal. El cálculo de las derivadas temporales se consigue al emplear las discretizaciones de las ecuaciones vistas en 3.1.3, 3.1.12 y 3.1.8.

Por último, simplemente destacar que para saber más sobre el programa desarrollado, qué es lo que hacen cada una de las funciones o como están estructuradas las diferentes matrices usadas (su finalidad, lo que significa cada columna...) se puede acudir a los archivos de Python, donde cada una de las funciones está completamente detallada explicando cual es su objetivo.

3.3. Particularización de las condiciones de contorno

Como ya se ha comentado, se usaron las condiciones de control de tipo pared para el desarrollo del programa. En el caso del método de discretización upwind, el valor se impuso en los límites de la celda directamente al ser de tipo Dirichlet, facilitando su implementación en el esquema numérico.

El problema venía para el caso k-scheme ya que el proceso de aproximación del valor en los límites de la celda era un poco más complicado. Para facilitar la comprensión de la problemática que se está comentando, se puede imaginar un ejemplo en el que se esté calculando el volumen inferior de un dominio fluido, siendo la velocidad positiva en el conector superior perteneciente a esta celda para una determinada dirección. Según lo mostrado en anteriores secciones, es necesario hallar los valores de P_c , ρe_{0_c} y ρ_c para resolver el problema. En el conector inferior, no hay ningún inconveniente ya que estos valores vienen impuestos por la condición de contorno. No se puede decir lo mismo del conector superior, ya que si se recuerda la formulación del k-scheme (2.2.6) y se aplica para este volumen en particular, se obtiene que:

$$\phi_{3/2} = \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} + \frac{1-k}{4}(-\phi_0 + 2\phi_1 - \phi_2) \quad (3.3.1)$$

El valor de ϕ_0 hace referencia al centroide de una celda que excede los límites del volumen fluido. Para estos casos, se supuso que existía esta celda más allá y que solamente participaba en la aproximación del valor en el límite de la celda. Para hallar ϕ_0 , simplemente se utilizó la condición de contorno para relacionar la celda fantasma y la primera celda mediante un esquema espacial de tipo CDS, obteniendo la siguiente expresión numérica:

$$\phi_{1/2} = \frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \quad (3.3.2)$$

$$2\phi_{1/2} = \phi_0 + \phi_1 \quad (3.3.3)$$

$$\phi_0 = 2\phi_{1/2} - \phi_1 \quad (3.3.4)$$

Una vez obtenida esta fórmula, se puede emplear 3.3.1 para seguir con el procedimiento normal. Se decidió desarrollar esta aproximación del valor en la celda fantasma por el hecho de que este esquema lo que realmente hace es calcular una recta usando los dos puntos aguas arriba, para luego corregir su pendiente empleando el punto aguas abajo:

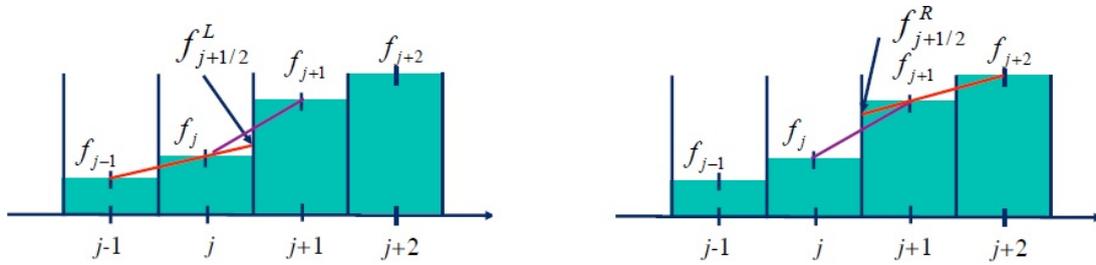


Figura 3.9: Construcción de las rectas para la aproximación del valor en un k-scheme dependiendo de si la velocidad es positiva (izquierda) o negativa (derecha) [3]

Por este motivo, se pensó que conociendo el valor en el límite de la celda, una aproximación lineal sería correcta para obtener este valor.

3.4. Limitadores de flujo

Por lo que respecta a los limitadores de flujo, en esta sección se ha tratado de mostrar como se implementaron tanto el MDT como el FCT, haciendo especial hincapié en aquellos puntos del programa que pudieran ser más complicados de deducir de forma abstracta sobre el papel.

MDT

Recordando lo que ya se dijo sobre este método [11], este trata de amortiguar las posibles oscilaciones que hayan aparecido en una solución en particular mediante un término difusivo que viene a simular los efectos de la difusión real en la ecuación de cantidad de movimiento. Así pues, la ecuación original de la cantidad de movimiento tendría una forma final como esta:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + \vec{D}) = -\nabla P \quad (3.4.1)$$

Siguiendo la discretización de la ecuación realizada para llegar a 3.1.12, esta resulta en :

$$\frac{(\rho u_i S_c)}{\partial t} = \frac{1}{\Delta L} (\rho u_{L_N}^2 + P_L - (\rho u_{R_N}^2 + P_R)) S_c + \frac{1}{\Delta L} (D_{L_N} - D_{R_N}) \quad (3.4.2)$$

Cabe destacar que tanto D_{L_N} como D_{R_N} son proyecciones del gradiente de cantidad de movimiento que se dan tanto en el volumen izquierdo como en el derecho respecto de un conector. De esta forma, estos gradientes se obtienen como:

$$D_{L,R} = \epsilon \nabla (\rho u S_c) \quad (3.4.3)$$

Para aproximar esta proyección de los gradientes simplemente se recurrió a un esquema de diferencias finitas, teniendo en cuenta que los signos del término difusivo ya indicaban cuando el flujo entraba al conector (+) y cuando salía (-). De esta forma los gradientes $\nabla(\rho u S_c)$, tanto

a izquierda como a derecha, se aproximaron como:

$$\nabla(\rho u S_c)_L = \frac{\rho u_{i-1} S_c - \rho u_i S_c}{\Delta L} \quad (3.4.4)$$

$$\nabla(\rho u S_c)_R = \frac{\rho u_i S_c - \rho u_{i+1} S_c}{\Delta L} \quad (3.4.5)$$

Se pudo apreciar como el término difusivo se volvió muy relevante cuando existían grandes gradientes de cantidad de movimiento entre los conectores, suavizando las oscilaciones que se pudieran producir. Así pues, ϵ viene a ser el equivalente a la viscosidad, que se calcula teniendo en cuenta el tamaño de la celda en particular, la velocidad del flujo que la trasiega y el paso temporal en cuestión:

$$\epsilon = \frac{|\vec{u}|}{2} (\Delta L - |\vec{u}| \Delta t) \quad (3.4.6)$$

FCT

Este método consistía en postprocesar las soluciones obtenidas en un determinado paso temporal, realizando una primera etapa de difusión encargada de suavizar la solución obtenida a lo largo del dominio, seguida finalmente de una etapa de recuperación de la solución no difusiva en aquellas regiones donde el gradiente de cantidad de movimiento no era tan elevado.

Por lo tanto, era necesario deducir como aplicar este método al esquema 3D que se había desarrollado. De acuerdo con la información provista en la bibliografía, las oscilaciones observadas en la densidad y la temperatura provienen de los flujos de cantidad de movimiento o entálpicos, los cuales dependen de forma directa de las ecuaciones de la cantidad de movimiento. Por este motivo, se decidió aplicar este método simplemente a las ecuaciones de cantidad de movimiento con tal de suprimir las oscilaciones de todas las variables del vector de estados simultáneamente [5]. En la fase difusiva, se empleó la difusión mediante amortiguamiento (Ecuación 2.5.3), adaptando el esquema de tal forma que los subíndices i hicieran referencia en este caso a los conectores donde estaba almacenada la cantidad de movimiento, mientras que $i \pm 1/2$ designaban las proyecciones en la dirección deseada de la cantidad de movimiento reconstruida en los volúmenes. Así pues, las ecuaciones adaptadas a este método son:

$$(\rho \bar{u} S_c)_i^{n+1} = (\rho u S_c)_i^{n+1} + D_i (\rho u S_c)_i^n \quad (3.4.7)$$

$$D_i (\rho u S_c)_i^n = \theta (\rho u S_c)_{i+1/2}^n - \theta (\rho u S_c)_{i-1/2}^n \quad (3.4.8)$$

$$\theta (\rho u S_c)_{i+1/2}^n = [(\rho u S_c)_{i+1}^n - (\rho u S_c)_i^n] \frac{\vartheta}{4} \quad (3.4.9)$$

$$\theta (\rho u S_c)_{i-1/2}^n = [(\rho u S_c)_i^n - (\rho u S_c)_{i-1}^n] \frac{\vartheta}{4} \quad (3.4.10)$$

Por lo que respecta a la fase antidifusiva, el desarrollo es similar al expuesto anteriormente. Cabe recordar pues las fórmulas básicas que se iban a emplear en el método antidifusivo, usando la

aproximación ‘phoenical’:

$$(\bar{\rho u S_c})_i^{n+1} = (\bar{\rho u S_c})_i^{n+1} + A_i(W_i^{n+1}) \quad (3.4.11)$$

$$A_i((\rho u S_c)_i^{n+1}) = \Psi((\rho u S_c)_{i+1/2}^{n+1}) - \Psi((\rho u S_c)_{i-1/2}^{n+1}) \quad (3.4.12)$$

De esta forma el cálculo de las funciones antidifusivas, tanto en la posición $i + 1/2$ como en la $i - 1/2$, se reduce a las siguientes expresiones:

$$\Psi((\rho u S_c)_{i+1/2}) = s^+ \cdot \max[0, \min(\frac{5}{8}s^+ \Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}, \frac{1}{8}|\Delta(\rho u S_c)_{i+1/2}|, \frac{5}{8}s^+ \Delta(\rho u S_c)_{i+3/2})] \quad (3.4.13)$$

$$\Psi((\rho u S_c)_{i-1/2}) = s^- \cdot \max[0, \min(\frac{5}{8}s^- \Delta(\rho u S_c)_{i-3/2}, \frac{1}{8}|\Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}|, \frac{5}{8}s^- \Delta(\rho u S_c)_{i+1/2})] \quad (3.4.14)$$

Siendo estas variables:

$$\Delta(\rho u S_c)_{i-3/2} = (\rho u S_c)_{i-1} - (\rho u S_c)_{i-2} \quad (3.4.15)$$

$$\Delta(\rho u S_c)_{i-1/2} = (\rho u S_c)_i - (\rho u S_c)_{i-1} \quad (3.4.16)$$

$$\Delta(\rho u S_c)_{i+1/2} = (\rho u S_c)_{i+1} - (\rho u S_c)_i \quad (3.4.17)$$

$$\Delta(\rho u S_c)_{i+3/2} = (\rho u S_c)_{i+2} - (\rho u S_c)_{i+1} \quad (3.4.18)$$

$$s^+ = \text{signo}(\Delta(\rho u S_c)_{i+1/2}) \quad (3.4.19)$$

$$s^- = \text{signo}(\Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}) \quad (3.4.20)$$

Las ecuaciones mostradas anteriormente para la función antidifusiva solamente servían en aquellos conectores que estaban en regiones interiores, si se situaban en alguno de los dos extremos su formulación debía cambiar por el hecho de que no existía un conector que estuviera dos posiciones más alejado o cercano que el i , ya que excedería el dominio. Así pues, en caso de encontrarse en el extremo izquierdo la formulación pasaba a ser:

$$\Psi((\rho u S_c)_{i-1/2}) = s^- \max[0, \min(\frac{1}{8}|\Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}|, \frac{5}{8}s \Delta(\rho u S_c)_{i+1/2})] \quad (3.4.21)$$

$$\Psi((\rho u S_c)_{i+1/2}) = s^+ \max[0, \min(\frac{5}{8}s^+ \Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}, \frac{1}{8}|\Delta(\rho u S_c)_{i+1/2}|, \frac{5}{8}s^+ \Delta(\rho u S_c)_{i+3/2})] \quad (3.4.22)$$

Teniendo en cuenta de que $\Delta(\rho u S_c)_{i-1/2} = W_i - W_{cdc}$ para este caso. En el extremo derecho la

situación que se produce es análoga, siendo por lo tanto las fórmulas:

$$\Psi((\rho u S_c)_{i+1/2}) = s^+ \max[0, \min(\frac{5}{8}s^+ \Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}, \frac{1}{8}|\Delta(\rho u S_c)_{i+1/2}|)] \quad (3.4.23)$$

$$\Psi((\rho u S_c)_{i-1/2}) = s^- \max[0, \min(\frac{5}{8}s^- \Delta(\rho u S_c)_{i-3/2}, \frac{1}{8}|\Delta(\rho u S_c)_{i-1/2}|, \frac{5}{8}s^- \Delta(\rho u S_c)_{i+1/2})] \quad (3.4.24)$$

3.5. Integrador implícito

Formulación de las derivadas para los volúmenes internos

Por lo que respecta a la implementación de este integrador temporal, simplemente se debía recordar que era necesario calcular la matriz jacobiana del sistema, ya que el esquema de flujos expuesto anteriormente no tenía ninguna variación temporal (a no ser que las condiciones de contorno cambien con el tiempo, en cuyo caso $\dot{b}(t)$ no será 0 y se añadiría a la expresión del término de la derecha de la Ecuación 2.3.24). Así pues, se empezó a calcular cada una de las derivadas requeridas empezando por la ecuación de continuidad, debido a su sencillez. En este caso, se consideró un volumen interno (sin estar en contacto con una condición de contorno) para poder reflejar el caso más general, desarrollando la expresión de este flujo se pudo deducir que:

$$F_{1,i} = \frac{1}{V_i} (\rho u_{i-1/2} S_c - \rho u_{i+1/2} S_c + \rho v_{j-1/2} S_c - \rho v_{j+1/2} S_c + \rho w_{k-1/2} S_c - \rho w_{k+1/2} S_c) \quad (3.5.1)$$

Así pues, se obtiene que las correspondientes derivadas son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{1,i}}{\partial \rho u_{i-1/2} S_c} &= \frac{1}{V_i} & \frac{\partial F_{1,i}}{\partial \rho u_{i+1/2} S_c} &= -\frac{1}{V_i} \\ \frac{\partial F_{1,i}}{\partial \rho v_{j-1/2} S_c} &= \frac{1}{V_i} & \frac{\partial F_{1,i}}{\partial \rho v_{j+1/2} S_c} &= -\frac{1}{V_i} \\ \frac{\partial F_{1,i}}{\partial \rho w_{k-1/2} S_c} &= \frac{1}{V_i} & \frac{\partial F_{1,i}}{\partial \rho w_{k+1/2} S_c} &= -\frac{1}{V_i} \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Se consideró la idea de suponer que existía una dependencia con respecto a la densidad en los volúmenes, pero se concluyó que en este caso no tendría mucho sentido, ya que no había una dependencia directa en el proceso de derivación entre la cantidad de movimiento de los conectores y la densidad de los centroides, al ser una de las variables que formaba parte por si misma del vector de estados, por lo que se descartó suponiendo estos términos como 0. En caso de que alguno de estos centroides estuviera en contacto con una condición de contorno, esta pasaba a formar parte de la matriz de términos independientes $b(t)$ y se eliminaba la correspondiente derivada de la matriz jacobiana $A'(W,t)$.

En las ecuaciones de cantidad de movimiento, se siguió respetando la independencia de las 3

direcciones entre ellas, por lo que si se lograba hallar los valores de las derivadas para la cantidad de movimiento en el eje X , estas serían homólogas para los ejes Y y Z . Cabe recordar que el cálculo de la cantidad de movimiento, si la malla era uniforme, se basaba en:

$$F_{4_i} = ((\rho u_N^2 + P)_L - (\rho u_N^2 + P)_R) \frac{S_c}{\Delta L} \quad (3.5.3)$$

$$\rho \vec{u} V = \frac{1}{2}(\rho v_j S_c + \rho v_{j+1} S_c) \Delta L_y + \frac{1}{2}(\rho w_k S_c + \rho w_{k+1} S_c) \Delta L_z + \frac{1}{2}(\rho u_i S_c + \rho u_{i-1} S_c) \Delta L_x \quad (3.5.4)$$

$$T = \frac{1}{C_v} \left(\frac{\rho e_0}{\rho} - \frac{|u|^2}{2} \right) \quad (3.5.5)$$

$$P = \rho R \frac{1}{C_v} \left(\frac{\rho e_0}{\rho} - \frac{|u|^2}{2} \right) \quad (3.5.6)$$

Es importante destacar que para estas ecuaciones, la nomenclatura se ha cambiado ligeramente, ya que i, j, k han pasado a designar los conectores en las direcciones X, Y, Z . Al mismo tiempo, L y R pasan a designar la variable del centroide en cuestión a izquierda (menor coordenada) y a derecha del conector (mayor coordenada). Suponiendo un conector interno, cuyos volúmenes adyacentes no delimiten con una condición de contorno en ninguno de sus respectivos conectores, se puede sustituir Ecuación 3.5.4 y Ecuación 3.5.6 en Ecuación 3.5.3 para obtener:

$$\begin{aligned} (\rho u_N^2 + P)_L &= \frac{(\rho u_{N_L} V_L)^2}{\rho_L V^2} + \rho_L R T_L = \\ &= \frac{(\frac{1}{2}(\rho u_{i-1} S_c + \rho u_i S_c) \Delta L_{x_L})^2}{\rho_L V_L^2} + \rho_L \frac{R}{C_v} \left(\frac{(\rho e_0)_L}{\rho_L} - \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\rho u_L V}{\rho_L V_L} \right)^2 + \left(\frac{\rho v_L V}{\rho_L V_L} \right)^2 + \left(\frac{\rho w_L V}{\rho_L V_L} \right)^2 \right) \right) \\ &= \frac{(\frac{1}{2}(\rho u_{i-1} S_c + \rho u_i S_c) \Delta L_{x_L})^2}{\rho_L V_L^2} + \rho_L \frac{R}{C_v} \left(\frac{(\rho e_0)_L}{\rho_L} - \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\frac{1}{2}(\rho u_{i-1} S_c + \rho u_i S_c) \Delta L_{x_L}}{\rho_L V_L} \right)^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left(\frac{\frac{1}{2}(\rho w_{k+1} S_c + \rho w_k S_c) \Delta L_{z_L}}{\rho_L V_L} \right)^2 + \left(\frac{\frac{1}{2}(\rho v_{j+1} S_c + \rho v_j S_c) \Delta L_{y_L}}{\rho_L V_L} \right)^2 \right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\rho u_N^2 + P)_R &= \frac{(\rho u_{N_R} V)^2}{\rho_R V_R^2} + \rho_R R T_R = \\ &= \frac{(\frac{1}{2}(\rho u_{i+1} S_c + \rho u_i S_c) \Delta L_{x_R})^2}{\rho_R V_R^2} + \rho_R \frac{R}{C_v} \left(\frac{(\rho e_0)_R}{\rho_R} - \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\rho u_R V}{\rho_R V_R} \right)^2 + \left(\frac{\rho v_R V}{\rho_R V_R} \right)^2 + \left(\frac{\rho w_R V}{\rho_R V_R} \right)^2 \right) \right) \\ &= \frac{(\frac{1}{2}(\rho u_{i+1} S_c + \rho u_i S_c) \Delta L_{x_R})^2}{\rho_R V_R^2} + \rho_R \frac{R}{C_v} \left(\frac{(\rho e_0)_R}{\rho_R} - \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\frac{1}{2}(\rho u_{i+1} S_c + \rho u_i S_c) \Delta L_{x_R}}{\rho_R V_R} \right)^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left(\frac{\frac{1}{2}(\rho w_{k+2} S_c + \rho w_{k+3} S_c) \Delta L_{z_R}}{\rho_R V_R} \right)^2 + \left(\frac{\frac{1}{2}(\rho v_{i+2} S_c + \rho v_{i+3} S_c) \Delta L_{y_R}}{\rho_R V_R} \right)^2 \right) \right) \end{aligned}$$

Sustituyendo las dos últimas expresiones en Ecuación 3.5.3, se pueden acabar obteniendo las derivadas de estos términos:

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho u_{i-1} S_c} = \frac{\Delta L_{xL}^2 (2C_v - R)(\rho u_{i-1} S_c + \rho u_i S_c)}{4C_v \rho_L V_L^2} \quad (3.5.7)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho u_i S_c} = - \frac{(2C_v - R)(\Delta L_{xL}^2 \rho_R V_R^2 (\rho u_i S_c + \rho u_{i-1} S_c) - \Delta L_{xR} \rho_L V_L^2 (\rho u_i S_c + \rho u_{i+1} S_c))}{4C_v \rho_L \rho_R V_L^2 V_R^2} \quad (3.5.8)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho u_{i+1} S_c} = - \frac{\Delta L_{xR}^2 (2C_v - R)(\rho u_i S_c + \rho u_{i+1} S_c)}{4C_v \rho_R V_R^2} \quad (3.5.9)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho w_k S_c} = - \frac{\Delta L_{zL}^2 R(\rho w_k S_c + \rho w_{k+1} S_c)}{4C_v \rho_L V_L^2} \quad (3.5.10)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho w_{k+1} S_c} = - \frac{\Delta L_{zL}^2 R(\rho w_k S_c + \rho w_{k+1} S_c)}{4C_v \rho_L V_L^2} \quad (3.5.11)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho w_{k+2} S_c} = \frac{\Delta L_{zR}^2 R(\rho w_{k+2} S_c + \rho w_{k+3} S_c)}{4C_v \rho_R V_R^2} \quad (3.5.12)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho w_{k+3} S_c} = \frac{\Delta L_{zR}^2 R(\rho w_{k+2} S_c + \rho w_{k+3} S_c)}{4C_v \rho_R V_R^2} \quad (3.5.13)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho v_j S_c} = - \frac{\Delta L_{yL}^2 R(\rho v_j S_c + \rho v_{j+1} S_c)}{4C_v \rho_L V_L^2} \quad (3.5.14)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho v_{j+1} S_c} = - \frac{\Delta L_{yL}^2 R(\rho v_j S_c + \rho v_{j+1} S_c)}{4C_v \rho_L V_L^2} \quad (3.5.15)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho v_{j+2} S_c} = \frac{\Delta L_{yR}^2 R(\rho v_{j+2} S_c + \rho v_{j+3} S_c)}{4C_v \rho_R V_R^2} \quad (3.5.16)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial \rho v_{j+3} S_c} = \frac{\Delta L_{yR}^2 R(\rho v_{j+2} S_c + \rho v_{j+3} S_c)}{4C_v \rho_R V_R^2} \quad (3.5.17)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial (\rho e_0)_L} = \frac{R}{C_v} \quad (3.5.18)$$

$$\frac{\partial F_{4i}}{\partial (\rho e_0)_R} = \frac{-R}{C_v} \quad (3.5.19)$$

$$\frac{F_{4i}}{\partial \rho_L} = \frac{\Delta L_{yL}^2 R(\rho v_j S_c + \rho v_{j+1} S_c)^2 - 2C_v \Delta L_{xL}^2 (\rho u_i S_c + \rho u_{i-1} S_c)^2}{8C_v \rho_L^2 V_L^2} + \frac{R(\Delta L_{xL}^2 (\rho u_i S_c + \rho u_{i-1} S_c)^2 + \Delta L_{zL}^2 (\rho w_k S_c + \rho w_{k+1} S_c)^2)}{8C_v \rho_L^2 V_L^2} \quad (3.5.20)$$

$$\frac{F_{4i}}{\partial \rho_R} = - \frac{\Delta L_{yR}^2 R(\rho v_{j+2} S_c + \rho v_{j+3} S_c)^2 - 2C_v \Delta L_{xR}^2 (\rho u_i S_c + \rho u_{i+1} S_c)^2}{8C_v \rho_R^2 V_R^2} - \frac{R(\Delta L_{xR}^2 (\rho u_i S_c + \rho u_{i-1} S_c)^2 + \Delta L_{zR}^2 (\rho w_{k+2} S_c + \rho w_{k+3} S_c)^2)}{8C_v \rho_R^2 V_R^2} \quad (3.5.21)$$

Es importante destacar que todas estas derivadas van multiplicadas por un factor de $\frac{S_c}{\Delta L}$ que

depende de la dirección principal en la que se está calculando, el cual no se ha incluido para evitar repeticiones innecesarias. En el caso anterior, se estaba calculando en la dirección X como dirección principal, por lo que el área a emplear es la de los conectores en perpendicular a esta dirección y el ΔL es la distancia entre los centroides en esa misma dirección. En el esquema que se muestra más abajo, se puede observar a qué conectores o volúmenes hacía referencia cada uno de los subíndices, de tal forma que se pueda comprender mejor el proceso. Se dedujo pues que las derivadas eran equivalentes si se tomaban las direcciones Y y Z como eje principal de cálculo, simplemente se tenía que sustituir allá donde apareciera la cantidad de movimiento en X por la de la dirección que se estuviera calculando y viceversa. Con esto, ya se habían definido todas las derivadas correspondientes a los flujos $F_{2_i}, F_{3_i}, F_{4_i}$. Por lo que respecta a las condiciones de contorno, en caso de llegar a alguna, simplemente se consideró no incluir la derivada correspondiente a ese término, aunque en el resto de derivadas sí que se debía emplear ese valor.

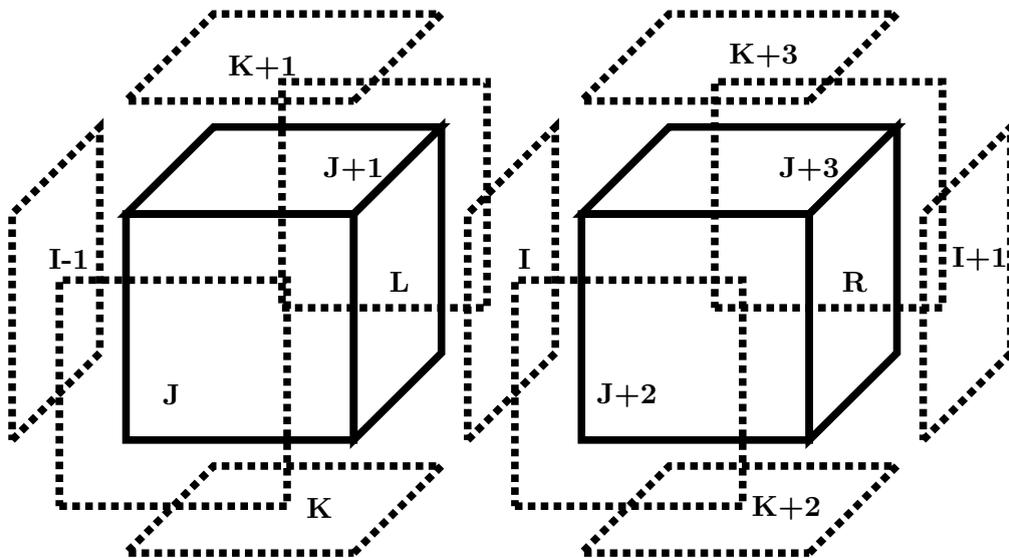


Figura 3.10: Significado de los índices para el cálculo de las derivadas en las ecuaciones de cantidad de movimiento.

Por último, se hallaron las derivadas relacionadas con la ecuación de la energía (F_{5_i}). Para hacerlo, se desarrolló la expresión del flujo relacionada con esta variable del vector de estados para un centroide interno donde todos los términos involucrados fueran diferentes a 0, recuperando

además la nomenclatura original de volumen (i, j, k) y conector $(i \pm 1/2, j \pm 1/2, k \pm 1/2)$:

$$F_{5_i} = \frac{1}{V_i} \left(\sum_{c=1}^{N_c} (P_c u_c S_c + \rho e_c u_c S_c) \right) = \quad (3.5.22)$$

$$\frac{1}{V_i} (-P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c + P_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c - P_{j+1/2} v_{j+1/2} S_c) \quad (3.5.23)$$

$$+ \frac{1}{V_i} (P_{j-1/2} v_{j-1/2} S_c - P_{k+1/2} w_{k+1/2} S_c + P_{k-1/2} w_{k-1/2} S_c) \quad (3.5.24)$$

$$+ \frac{1}{V_i} (-(\rho e)_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c + (\rho e)_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c - (\rho e)_{j+1/2} v_{j+1/2} S_c) \quad (3.5.25)$$

$$+ \frac{1}{V_i} ((\rho e)_{j-1/2} v_{j-1/2} S_c - (\rho e)_{k+1/2} w_{k+1/2} S_c + (\rho e)_{k-1/2} w_{k-1/2} S_c) \quad (3.5.26)$$

De acuerdo a lo expuesto anteriormente, las ecuaciones de la cantidad de movimiento eran independientes entre ellas, por lo que los términos que regulan el flujo entálpico también lo eran. Esto quiere decir que, si se conocían las derivadas de los términos relacionados con una dirección $(P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c, P_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c, (\rho e)_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c, (\rho e)_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c)$, se podían obtener las del resto. Llegados a este punto, era necesario desarrollar estas expresiones, ya que para hallar los valores de la presión y de la energía específica en los conectores, había que aproximarlos mediante algún esquema de discretización (k-scheme) que permitiera obtener todo en función de las variables del vector de estados (W):

$$P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c = P_{i+1/2} \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\rho_{i+1/2}} = \left[\frac{P_i + P_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-P_{i-1} + 2P_i - P_{i+1}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.27)$$

$$P_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c = P_{i-1/2} \frac{\rho u_{i-1/2} S_c}{\rho_{i-1/2}} = \left[\frac{P_{i-1} + P_i}{2} + \frac{1-k}{4} (-P_{i-2} + 2P_{i-1} - P_i) \right] \frac{\rho u_{i-1/2} S_c}{\frac{\rho_{i-1} + \rho_i}{2} + \frac{1-k}{4} (-\rho_{i-2} + 2\rho_{i-1} - \rho_i)} \quad (3.5.28)$$

$$(\rho e)_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c = \left[\frac{(\rho e)_{i-1} + (\rho e)_i}{2} + \frac{1-k}{4} (-(\rho e)_{i-2} + 2(\rho e)_{i-1} - (\rho e)_i) \right] \frac{\rho u_{i-1/2} S_c}{\frac{\rho_{i-1} + \rho_i}{2} + \frac{1-k}{4} (-\rho_{i-2} + 2\rho_{i-1} - \rho_i)} \quad (3.5.29)$$

$$(\rho e)_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c = \left[\frac{(\rho e)_i + (\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-(\rho e)_{i-1} + 2(\rho e)_i - (\rho e)_{i+1}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.30)$$

Observando estas últimas expresiones, se concluyó que era necesario considerar tres volúmenes distintos para cada uno de los términos de presión o energía. Los volúmenes escogidos dependían, tanto de la posición del conector calculado, como de la dirección de la velocidad. Según estos dos

parámetros, la expresión de las derivadas se podía ver modificada, añadiendo una complejidad extra al proceso de implementación. En los siguientes gráficos 3.11 y 3.12, se pueden observar las posibilidades existentes para el cálculo de los términos en el conector superior de una celda para un eje determinado. Los conectores marcados en rojo hacen referencia a donde se está calculando la variable desconocida, mientras que aquellas regiones marcadas en azul hacen referencia a las que exceden los dominios o simplemente están en contacto con las condiciones de contorno (en el caso de los conectores):

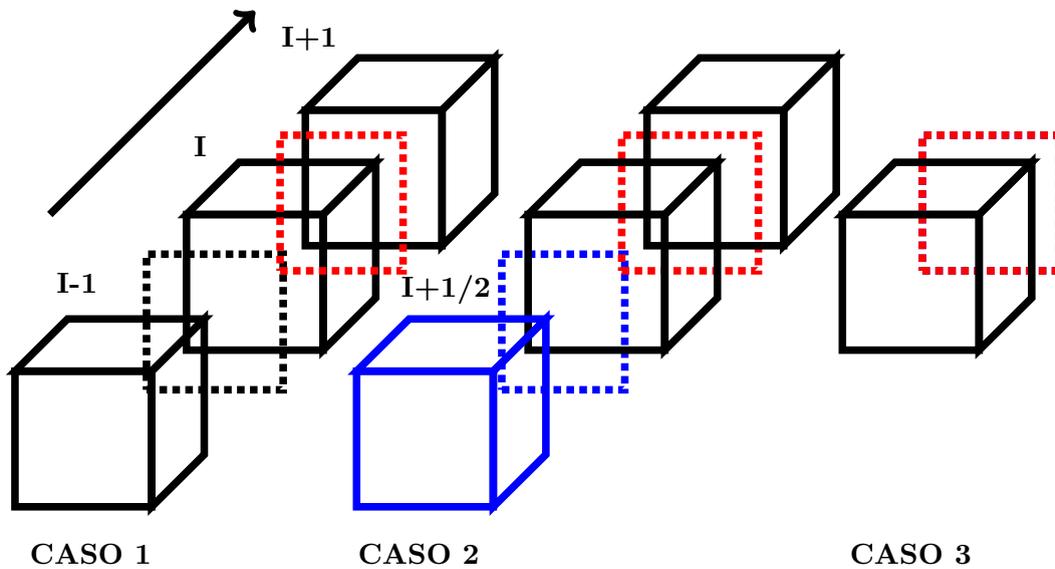


Figura 3.11: Conectores y volúmenes implicados en la aproximación de una variable de interés en el conector superior de una celda para un flujo positivo ($\rho u S_c \geq 0$)

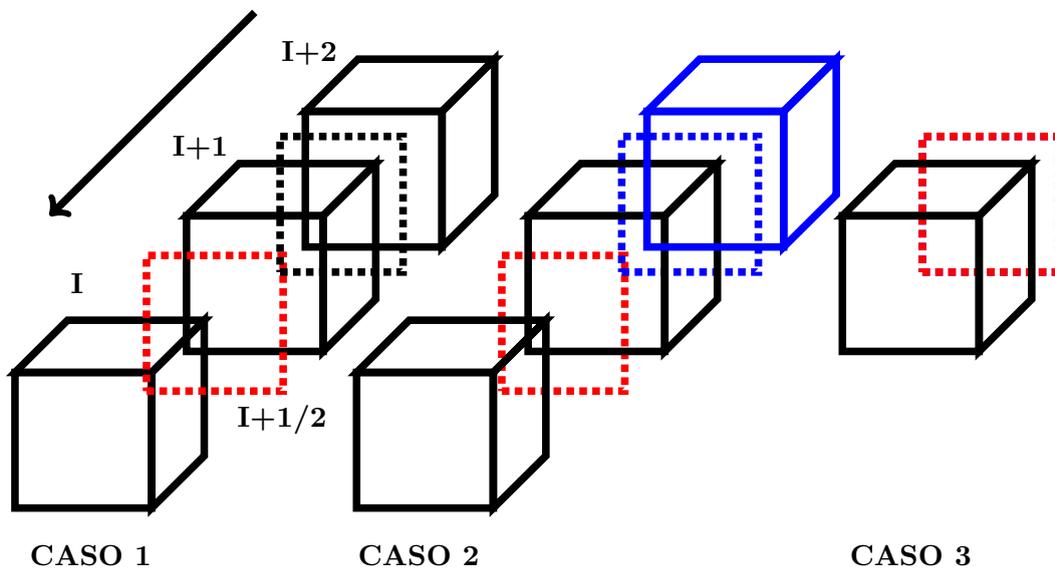


Figura 3.12: Conectores y volúmenes implicados en la aproximación de una variable de interés en el conector superior de una celda para un flujo negativo ($\rho u S_c < 0$)

Era necesario desarrollar en mayor medida las ecuaciones 3.5.27 y 3.5.28, ya que la presión no formaba parte del vector W . De esta forma, se dedujo que las expresiones de las derivadas iban a ser realmente complejas y se debía de estudiar detenidamente como implementarlas en el software que se estaba desarrollando. El conjunto de ecuaciones resultante para calcular las derivadas relacionadas con la presión en la ecuación de la energía era:

$$P_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c = P_{i+1/2}\frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\rho_{i+1/2}} = \left[\frac{P_i + P_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-P_{i-1} + 2P_i - P_{i+1}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.31)$$

$$P_i = \frac{R}{C_v} \left((\rho e_0)_i - \frac{\rho_i}{2} \left(\left(\frac{1/2(\rho u_{i+1/2}S_c + \rho u_{i-1/2}S_c)\Delta L_{x_i}}{\rho_i V_i} \right)^2 \right) \right) - \frac{R\rho_i}{2C_v} \left(\left(\frac{1/2(\rho v_{i,j-1/2}S_c + \rho v_{i,j+1/2}S_c)\Delta L_{y_i}}{\rho_i V_i} \right)^2 + \left(\frac{1/2(\rho w_{i,k+1/2}S_c + \rho w_{i,k-1/2}S_c)\Delta L_{z_i}}{\rho_i V_i} \right)^2 \right) \quad (3.5.32)$$

$$P_{i-1} = \frac{R}{C_v} \left((\rho e_0)_{i-1} - \frac{\rho_{i-1}}{2} \left(\left(\frac{1/2(\rho u_{i-3/2}S_c + \rho u_{i-1/2}S_c)\Delta L_{x_{i-1}}}{\rho_{i-1} V_{i-1}} \right)^2 \right) \right) - \frac{R\rho_{i-1}}{C_v 2} \left(\left(\frac{1/2(\rho v_{i-1,j+1/2}S_c + \rho v_{i-1,j-1/2}S_c)\Delta L_{y_{i-1}}}{\rho_{i-1} V_{i-1}} \right)^2 + \left(\frac{1/2(\rho w_{i-1,k+1/2}S_c + \rho w_{i-1,k-1/2}S_c)\Delta L_{z_{i-1}}}{\rho_{i-1} V_{i-1}} \right)^2 \right) \quad (3.5.33)$$

$$P_{i+1} = \frac{R}{C_v} \left((\rho e_0)_{i+1} - \frac{\rho_{i+1}}{2} \left(\left(\frac{1/2(\rho u_{i+1/2}S_c + \rho u_{i+3/2}S_c)\Delta L_{x_{i+1}}}{\rho_{i+1} V_{i+1}} \right)^2 \right) \right) - \frac{R\rho_{i+1}}{C_v 2} \left(\left(\frac{1/2(\rho v_{i+1,j+1/2}S_c + \rho v_{i+1,j-1/2}S_c)\Delta L_{y_{i+1}}}{\rho_{i+1} V_{i+1}} \right)^2 + \left(\frac{1/2(\rho w_{i+1,k+1/2}S_c + \rho w_{i+1,k-1/2}S_c)\Delta L_{z_{i+1}}}{\rho_{i+1} V_{i+1}} \right)^2 \right) \quad (3.5.34)$$

Las derivadas se pueden encontrar en el Mathematica anexo del proyecto, en la sección de los desarrollos, caso $P_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c$ cuando $\rho u S_c \geq 0$. No se han añadido en esta parte por el hecho de que algunas de ellas son realmente tediosas y darían una extensión innecesaria al mismo.

Una vez obtenidas las expresiones para $P_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c$, se hallaron las de $P_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c$ simplemente sustituyendo cada una de las variables por su equivalente. A continuación, se añadió una tabla donde se indican estas correlaciones entre ambos casos para los nodos internos:

$\mathbf{P}_{i+1/2}\mathbf{u}_{i+1/2}\mathbf{S}_c$	$\mathbf{P}_{i-1/2}\mathbf{u}_{i-1/2}\mathbf{S}_c$
ρ_i	ρ_{i-1}
ρ_{i+1}	ρ_i
ρ_{i-1}	ρ_{i-2}
$\rho u_{i+3/2}\mathbf{S}_c$	$\rho u_{i+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho u_{i+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho u_{i-1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho u_{i-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho u_{i-3/2}\mathbf{S}_c$
$\rho u_{i-3/2}\mathbf{S}_c$	$\rho u_{i-5/2}\mathbf{S}_c$
$(\rho e)_{i+1}$	$(\rho e)_i$
$(\rho e)_i$	$(\rho e)_{i-1}$
$(\rho e)_{i-1}$	$(\rho e)_{i-2}$
$\rho v_{i+1,j+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho v_{i,j+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho v_{i+1,j-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho v_{i,j-1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho v_{i,j+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho v_{i-1,j+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho v_{i,j-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho v_{i-1,j-1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho v_{i-1,j+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho v_{i-2,j+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho v_{i-1,j-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho v_{i-2,j-1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho w_{i+1,k+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho w_{i,k+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho w_{i+1,k-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho w_{i,k-1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho w_{i,k+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho w_{i-1,k+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho w_{i,k-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho w_{i-1,k-1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho w_{i-1,k+1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho w_{i-2,k+1/2}\mathbf{S}_c$
$\rho w_{i-1,k-1/2}\mathbf{S}_c$	$\rho w_{i-2,k-1/2}\mathbf{S}_c$

Cuadro 3.1: Equivalencia de las variables entre el desarrollo de $P_{i+1/2}u_{i+1/2}\mathbf{S}_c$ y el de $P_{i-1/2}u_{i-1/2}\mathbf{S}_c$

Además, se tuvo en cuenta que si la cantidad de movimiento almacenada en el conector era negativa, los volúmenes empleados para la obtención de las variables del vector de estados variaban también. Esto es por el hecho de que este esquema se basa en interpolar dos valores que se encuentren aguas arriba del punto que se quiera hallar y uno aguas abajo, al cambiar la dirección del flujo, también cambiarán los puntos empleados. Por lo tanto, las ecuaciones

utilizadas cuando la cantidad de movimiento era negativa ($\rho u S_c < 0$) fueron:

$$P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c = P_{i+1/2} \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\rho_{i+1/2}} = \left[\frac{P_i + P_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-P_i + 2P_{i+1} - P_{i+2}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-\rho_i + 2\rho_{i+1} - \rho_{i+2})} \quad (3.5.35)$$

$$P_i = \frac{R}{C_v} \left((\rho e_0)_i - \frac{\rho_i}{2} \left(\left(\frac{1/2(\rho u_{i+1/2} S + \rho u_{i-1/2} S) \Delta L_{x_i}}{\rho_i V_i} \right)^2 \right) \right) - \frac{R \rho_i}{2 C_v} \left(\left(\frac{1/2(\rho v_{i,j+1/2} S + \rho v_{i,j-1/2} S) \Delta L_{y_j}}{\rho_i V_i} \right)^2 + \left(\frac{1/2(\rho w_{i,k+1/2} S + \rho w_{i,k-1/2} S) \Delta L_{z_k}}{\rho_i V_i} \right)^2 \right) \quad (3.5.36)$$

$$P_{i+1} = \frac{R}{C_v} \left((\rho e_0)_{i+1} - \frac{\rho_{i+1}}{2} \left(\left(\frac{1/2(\rho u_{i+1/2} S + \rho u_{i+3/2} S) \Delta L_{x_{i+1}}}{\rho_{i+1} V_{i+1}} \right)^2 + \right) \right) - \frac{R \rho_{i+1}}{2 C_v} \left(\left(\frac{1/2(\rho v_{i+1,j+1/2} S + \rho v_{i+1,j-1/2} S) \Delta L_{y_{j+1}}}{\rho_{i+1} V_{i+1}} \right)^2 + \left(\frac{1/2(\rho w_{i+1,k+1/2} S + \rho w_{i+1,k-1/2} S) \Delta L_{z_{k+1}}}{\rho_{i+1} V_{i+1}} \right)^2 \right) \quad (3.5.37)$$

$$P_{i+2} = \frac{R}{C_v} \left((\rho e_0)_{i+2} - \frac{\rho_{i+2}}{2} \left(\left(\frac{1/2(\rho u_{i+5/2} S + \rho u_{i+3/2} S) \Delta L_{x_{i+2}}}{\rho_{i+2} V_{i+2}} \right)^2 \right) \right) - \frac{R \rho_{i+2}}{2 C_v} \left(\left(\frac{1/2(\rho v_{i+2,j+1/2} S + \rho v_{i+2,j-1/2} S) \Delta L_{y_{j+2}}}{\rho_{i+2} V_{i+2}} \right)^2 + \left(\frac{1/2(\rho w_{i+2,k+1/2} S + \rho w_{i+2,k-1/2} S) \Delta L_{z_{k+2}}}{\rho_{i+2} V_{i+2}} \right)^2 \right) \quad (3.5.38)$$

Como se ha comentado anteriormente, las derivadas obtenidas eran bastante complejas y por lo tanto se pueden encontrar en el Mathematica, las expresiones desarrolladas en particular para este caso se encuentran en el apartado $P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c$ de la sección $\rho u S_c < 0$. Con tal de obtener las derivadas de $P_{i-1/2} u_{i-1/2} S_c$, simplemente se emplearon las mismas expresiones que para el conector superior, identificando correspondientemente las variables:

$\mathbf{P}_{i+1/2}\mathbf{u}_{i+1/2}\mathbf{S}_c$	$\mathbf{P}_{i-1/2}\mathbf{u}_{i-1/2}\mathbf{S}_c$
ρ_i	ρ_{i-1}
ρ_{i+1}	ρ_i
ρ_{i+2}	ρ_{i+1}
$\rho u_{i-1/2} S_c$	$\rho u_{i-3/2} S_c$
$\rho u_{i+1/2} S_c$	$\rho u_{i-1/2} S_c$
$\rho u_{i+3/2} S_c$	$\rho u_{i+1/2} S_c$
$\rho u_{i+5/2} S_c$	$\rho u_{i+3/2} S_c$
$(\rho e)_i$	$(\rho e)_{i-1}$
$(\rho e)_{i+1}$	$(\rho e)_i$
$(\rho e)_{i+2}$	$(\rho e)_{i+1}$
$\rho v_{i,j-1/2} S_c$	$\rho v_{i-1,j-1/2} S_c$
$\rho v_{i,j+1/2} S_c$	$\rho v_{i-1,j+1/2} S_c$
$\rho v_{i+1,j-1/2} S_c$	$\rho v_{i,j-1/2} S_c$
$\rho v_{i+1,j+1/2} S_c$	$\rho v_{i,j+1/2} S_c$
$\rho v_{i+2,j-1/2} S_c$	$\rho v_{i+1,j-1/2} S_c$
$\rho v_{i+2,j+1/2} S_c$	$\rho v_{i+1,j+1/2} S_c$
$\rho w_{i,k-1/2} S_c$	$\rho w_{i-1,k-1/2} S_c$
$\rho w_{i,k+1/2} S_c$	$\rho w_{i-1,k+1/2} S_c$
$\rho w_{i+1,k-1/2} S_c$	$\rho w_{i,k-1/2} S_c$
$\rho w_{i+1,k+1/2} S_c$	$\rho w_{i,k+1/2} S_c$
$\rho w_{i+2,k-1/2} S_c$	$\rho w_{i+1,k-1/2} S_c$
$\rho w_{i+2,k+1/2} S_c$	$\rho w_{i+1,k+1/2} S_c$

Cuadro 3.2: Equivalencia de las variables entre el desarrollo de $P_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c$ y el de $P_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c$

Por lo que respecta a la Ecuación 3.5.29 y la Ecuación 3.5.30, las expresiones eran mucho más simples de derivar, ya que todas las variables involucradas formaban parte del vector en cuestión (W). De esta forma, las derivadas obtenidas para la Ecuación 3.5.30 fueron:

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho e)_i} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1-k}{2}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.39)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho e)_{i+1}} = \left(\frac{1}{2} + \frac{-1+k}{4}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.40)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho e)_{i-1}} = \frac{-1+k}{4} \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.41)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho_{i-1}} = -\frac{-1+k}{4} \frac{\rho u_{i+1/2}S_c \left(\frac{(\rho e)_i + (\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_{i-1} + 2(\rho e)_i - (\rho e)_{i+1})\right)}{\left(\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})\right)^2} \quad (3.5.42)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho_i} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{1-k}{2}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c \left(\frac{(\rho e)_i + (\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_{i-1} + 2(\rho e)_i - (\rho e)_{i+1})\right)}{\left(\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})\right)^2} \quad (3.5.43)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho_{i+1}} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{-1+k}{4}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c \left(\frac{(\rho e)_i + (\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_{i-1} + 2(\rho e)_i - (\rho e)_{i+1})\right)}{\left(\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})\right)^2} \quad (3.5.44)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho_{i+1/2}S_c} = \frac{\frac{(\rho e)_i + (\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_{i-1} + 2(\rho e)_i - (\rho e)_{i+1})}{\left(\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})\right)} \quad (3.5.45)$$

Una vez deducidas las expresiones de las derivadas parciales de $(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c$, se pudo derivar directamente las expresiones para $(\rho e)_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c$. En este caso, simplemente se substituyó las variables obtenidas en todas las expresiones por las que se encontraban en una posición anterior, por ejemplo, $(\rho e)_i$ pasaría a ser $(\rho e)_{i-1}$, y así sucesivamente.

Si la cantidad de movimiento almacenada en el conector era negativa, simplemente había que tener en cuenta el cambio de centroides empleados en la interpolación, siendo las nuevas expresiones relacionadas con la energía interna las siguientes:

$$(\rho e)_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c = \left[\frac{(\rho e)_{i-1} + (\rho e)_i}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_{i-1} + 2(\rho e)_i - (\rho e)_{i+1}) \right] \frac{\rho u_{i-1/2}S_c}{\frac{\rho_{i-1} + \rho_i}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_{i-1} + 2\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.46)$$

$$(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c = \left[\frac{(\rho e)_i + (\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_i + 2(\rho e)_{i+1} - (\rho e)_{i+2}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i + 2\rho_{i+1} - \rho_{i+2})} \quad (3.5.47)$$

Por lo tanto, se obtuvo que las derivadas eran:

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho e)_i} = \left(\frac{1}{2} + \frac{-1+k}{4}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})} \quad (3.5.48)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho e)_{i+1}} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1-k}{2}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})} \quad (3.5.49)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho e)_{i+2}} = \frac{-1+k}{4} \frac{\rho u_{i+1/2}S_c}{\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})} \quad (3.5.50)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial(\rho)_i} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{-1+k}{4}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c \left(\frac{(\rho e)_i+(\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_i+2(\rho e)_{i+1}-(\rho e)_{i+2})\right)}{\left(\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})\right)^2} \quad (3.5.51)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho_{i+1}} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{1-k}{2}\right) \frac{\rho u_{i+1/2}S_c \left(\frac{(\rho e)_i+(\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_i+2(\rho e)_{i+1}-(\rho e)_{i+2})\right)}{\left(\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})\right)^2} \quad (3.5.52)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho_{i+2}} = -\frac{-1+k}{4} \frac{\rho u_{i+1/2}S_c \left(\frac{(\rho e)_i+(\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_i+2(\rho e)_{i+1}-(\rho e)_{i+2})\right)}{\left(\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})\right)^2} \quad (3.5.53)$$

$$\frac{\partial(\rho e)_{i+1/2}u_{i+1/2}S_c}{\partial\rho u_{i+1/2}S_c} = \frac{\frac{(\rho e)_i+(\rho e)_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-(\rho e)_i+2(\rho e)_{i+1}-(\rho e)_{i+2})}{\frac{\rho_i+\rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4}(-\rho_i+2\rho_{i+1}-\rho_{i+2})} \quad (3.5.54)$$

Como ya se ha explicado anteriormente, las derivadas parciales de $(\rho e)_{i-1/2}u_{i-1/2}S_c$ se dedujeron por inferencia directa. Para hallar estas expresiones, simplemente se sustituyeron estas variables por las que estaban en una posición anterior.

Así pues, quedan definidas de forma general todas las derivadas relativas a cada uno de los flujos $(F_{1_i}, F_{2_i}, F_{3_i}, F_{4_i}, F_{5_i})$ con respecto de las diferentes variables de estado $(\rho_i, \rho v_j S_c, \rho w_k S_c, \rho u_i S_c, \rho e_i)$.

Particularización de las derivadas en los volúmenes con c.d.c.

La obtención de estas expresiones se modificó dependiendo de qué ecuación era la que se estaba tratando cuando las celdas estaban en contacto con una condición de contorno en particular.

Como ya se ha comentado, se tuvo en cuenta que estos conectores tomaban valores constantes cuando entraban en contacto con una condición de contorno, cosa que afectaba a la discretización de la ecuación de cantidad de movimiento 3.5.20 y continuidad 3.5.1. Esto permitió no tenerlos en cuenta a la hora de calcular las derivadas, por lo que el procedimiento quedaba claramente simplificado en estos casos. Por lo que respecta a la ecuación de la energía (3.5.22), los términos relacionados con la energía interna también seguían el mismo razonamiento, descartando las derivadas de aquellos volúmenes que se encontraran más allá del dominio fluido considerado, así como los conectores pertenecientes a estas celdas.

En lo relativo a los términos de presión de la ecuación de la energía, el planteamiento fue un poco distinto en estos casos. Se tuvo en cuenta que las condiciones de contorno especificadas contemplaban la presión, por lo que la formulación de estos términos sí que variaba sensiblemente dependiendo del caso que se estuviera considerando. En el segundo de los casos de la Figura 3.11, el que considera un flujo positivo ($\rho u_{i+1/2} S_c > 0$) y el conector superior del volumen en relación a la coordenada que ocupa, se dedujo que en la celda adyacente a la condición de contorno inferior la formulación del término de presión en esa celda se iba a ver cambiada. El desarrollo de 3.5.27 pasó a ser en este caso:

$$P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c = P_{i+1/2} \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\rho_{i+1/2}} = \left[\frac{P_i + P_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-2P_{i-1/2} + 3P_i - P_{i+1}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-2\rho_{i-1/2} + 3\rho_i - \rho_{i+1})} \quad (3.5.55)$$

Esto se debe a la aproximación por CDS que se hizo del valor introducido en la condición de contorno, como ya se ha expuesto en secciones anteriores (Ecuación 3.3.4). De esta forma, en la ecuación 3.5.33 no se tuvo en cuenta este volumen en particular y todas las derivadas provenientes de sus términos quedaron anuladas. Si se consideraba el conector inferior de los volúmenes, en la misma dirección del flujo, sucedía una cosa semejante, pero en este caso el cambio de formulación repercutía en el segundo volumen, ya que el conector superior que afectaba a la derivación en el primer volumen se consideraba ahora como el inferior del segundo. Siguiendo el procedimiento mencionado anteriormente, solo había que restarle una posición a los conectores de la Ecuación 3.5.55, menos en el caso del término de presión/densidad que involucra a la condición de contorno ($P_{i-1/2}$ o $\rho_{i-1/2}$).

Por lo que respecta al caso en el que el flujo pasaba a ser negativo, el razonamiento a seguir fue idéntico al anteriormente expuesto, teniendo en cuenta que en este caso los centroides empleados en la interpolación tomaban dos valores localizados en coordenadas superiores a la del conector donde se quería interpolar el valor. En este caso, el volumen afectado era el penúltimo (segundo con mayor coordenada en la dirección que está calculando) y la Ecuación 3.5.35 pasaba a ser:

$$P_{i+1/2} u_{i+1/2} S_c = P_{i+1/2} \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\rho_{i+1/2}} = \left[\frac{P_i + P_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-P_i + 3P_{i+1} - 2P_{i+3/2}) \right] \frac{\rho u_{i+1/2} S_c}{\frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} + \frac{1-k}{4} (-\rho_i + 3\rho_{i+1} - 2\rho_{i+3/2})} \quad (3.5.56)$$

Como ya se ha comentado, el valor de la presión en el conector que se encontraba en la condición de contorno era una constante, por lo que todas las derivadas relacionadas con el término P_{i+2} desaparecían.

Cabe destacar también que los conectores posicionados en perpendicular con las direcciones de cálculo secundarias, es decir, aquellos conectores que, siguiendo la expansión matemática de un

término de la presión y/o de la energía total, no coincidían con la orientación de la misma (un conector $\rho v_{i,j+1/2} S_c$ en el desarrollo de $P u_{i+1/2} S_c$), podían estar en contacto con una condición de contorno en cualquier momento dependiendo de la configuración de celdas del dominio. Un ejemplo sería si se considerara una configuración de 1 celda en la dirección Y , 1 en la Z y 4 en la dirección X : para la obtención de las derivadas de la energía en los conectores perpendiculares a X , la cantidad de movimiento tanto en los conectores de Y como en Z que aparecen en los desarrollos vendrá dada por las condiciones de contorno. Por este motivo, es necesario siempre comprobar estos conectores en las direcciones secundarias, descartando sus derivadas si están en contacto con el límite del dominio. Esto es también aplicable a las ecuaciones de cantidad movimiento.

3.6. Implementación del código en coordenadas cilíndricas

En esta sección, se va a tratar de explicar aquellas diferencias que existen tanto en el planteamiento del esquema numérico en cilíndricas como en su implementación. Cabe destacar en primer lugar que se asumió que la malla fuera regular con el fin de facilitar la elaboración del programa al máximo posible.

En primer lugar, la discretización del dominio cambió profundamente debido al nuevo sistema de coordenadas, esto genera un cambio también en el proceso de numeración y en la ‘conectividad’ de los volúmenes y los conectores. En este caso, el S.R. tiene una coordenada radial positiva que se aleja del origen de este sistema, una coordenada azimutal en sentido antihorario que parte desde el diámetro central y una coordenada longitudinal, su origen se encuentra situado en el centro de la cara frontal del mismo. El nuevo sistema se puede observar en la siguiente representación:

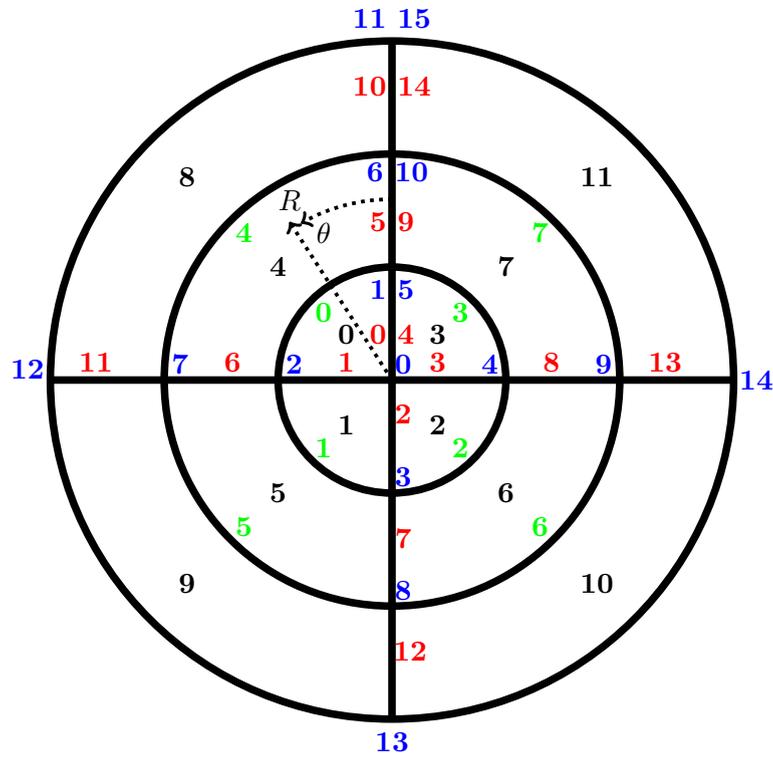


Figura 3.13: Esquema de la discretización del cilindro, donde la numeración en negro corresponde a los volúmenes, la roja a los conectores azimutales, la verde a los conectores radiales y la azul a los nodos de los volúmenes.

Como se puede ver en este caso, los volúmenes se empezaron a numerar desde la celda izquierda del diámetro central en sentido antihorario. Una vez alcanzado el último volumen, se pasaba a la siguiente fila en dirección radial, siguiendo el mismo sistema de numeración. Una vez terminadas de numerar todas estas filas, se procedió a seguir con el mismo sistema en la siguiente división longitudinal. Por lo que respecta a la numeración de los conectores, se tuvo en cuenta que el conector de la derecha del primer volumen en un determinado radio es el mismo que el conector de la izquierda en la última coordenada azimutal, para facilitar su posterior implementación se les asignó dos números diferentes en cada uno de los casos. En el resto de conectores, se empezaron a numerar siguiendo el mismo sistema que con los volúmenes, no contando aquellos en contacto con una condición de contorno, ya que se incluyeron en una numeración exclusiva para estos casos. Además, simplemente destacar que se les asignó un identificador también a los nodos de los volúmenes con la finalidad de poder asociarlos a sus coordenadas y así calcular los centroides de una forma más rápida (haciendo la media de todos los puntos que constituyen un determinado volumen, excluyendo aquellos que se encontraran contenidos en la singularidad para el cálculo de la coordenada radial y azimutal). En cuanto a las condiciones de contorno, se emplearon con los conectores de la pared lateral del cilindro los primeros identificadores para luego pasar a los del área transversal frontal, finalmente se numeraron también los del área

trasera.

Por lo que respecta a la reconstrucción de la velocidad en los centroides, esta se basaba en una interpolación lineal de la cantidad de movimiento entre los conectores en una determinada dirección. El problema vino por el hecho de que esta separación dejaba de ser lineal en la dirección azimutal y la aproximación podía perder validez en estas circunstancias. Sin embargo, se consideró mantenerla en esta ocasión, usando como distancia entre conectores ΔL el arco de radio que pasa por el centro de las caras limítrofes en esta dirección. Es importante recordar que en la fórmula 3.1.13 se hace referencia al reparto de la cantidad de movimiento dependiendo del volumen relativo del centroide en cuestión respecto del adyacente para un conector determinado, en el caso de la dirección radial los volúmenes no son siempre constantes, por lo que este ratio entra en juego. Además, en aquellos volúmenes adyacentes a la singularidad se consideró que, al no haber conector inferior, no entraba ningún flujo por esta parte tampoco, por lo que solamente se usó la cantidad de movimiento del conector superior para aproximar la velocidad en el centroide. En las otras direcciones, el ratio previamente mencionado se mantuvo en 0.5 porque los volúmenes eran iguales. Es importante destacar que se empleó el mismo ratio de volumen relativo en ambos conectores cuando este entraba en contacto con una condición de contorno en la dirección radial, suponiendo que existía un volumen más allá que lo cumplía. De todas formas, esta consideración fue tomada a modo de prueba, por lo que en futuros trabajos se puede cambiar si así se desea.

En cuanto a las técnicas empleadas para aproximar los valores en aquellos puntos donde era necesario conocerlos (upwind o k-scheme), se tuvieron en cuenta las diferencias en su formulación que existen a la hora de implementar estos esquemas en cilíndricas. Por lo que respecta al esquema tipo upwind, se siguió empleando el dato almacenado en el volumen anterior para aproximar la variable de interés (ρ , P , $\rho e_{0,c}$) cuando la cantidad de movimiento almacenada en el conector era positiva, mientras que si la cantidad de movimiento era negativa se empleaba el valor almacenado en el volumen superior de la correspondiente dirección. Para el caso azimutal, si la cantidad de movimiento almacenada en el conector era positiva, se empleaba el valor en el volumen de la derecha del conector, mientras que en el caso inverso se usaba el centroide izquierdo.

El problema era más complejo en el caso del k-scheme, sobretudo por culpa de la dirección radial. Esto se debe a que eran necesarios tres puntos para poder aproximar la solución, dos aguas arriba de la localización del conector y uno aguas abajo, lo cual podía ser problemático en aquellos volúmenes en contacto con la singularidad ya mencionada. Era necesario emplear un volumen que se encontrara más allá del origen, para poder aproximar estas variables de interés si el conector en la dirección radial donde se estaba calculando la aproximación almacenaba una cantidad de movimiento positiva, tal y como se puede ver en la Figura 3.14. Por este motivo, se decidió emplear el volumen adyacente a la singularidad que se encontraba diametralmente opuesto al conector en cuestión como valor inferior (ϕ_{i-1}).

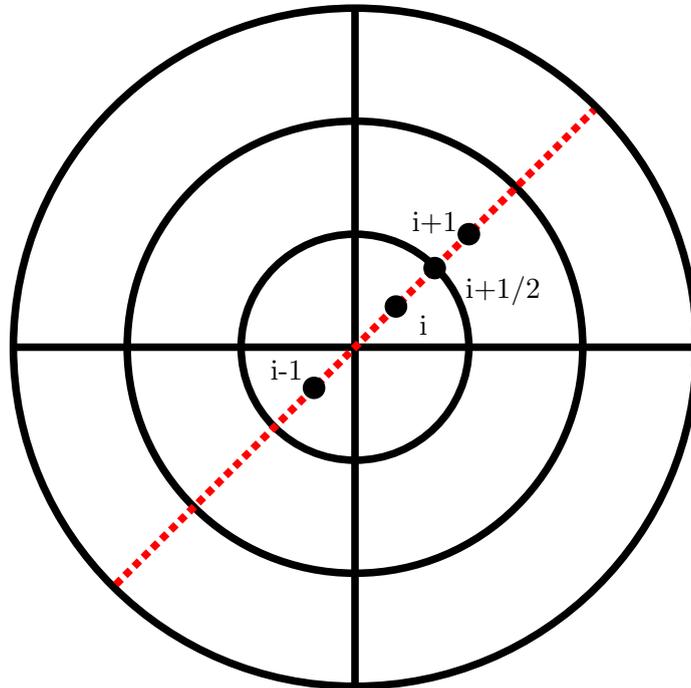


Figura 3.14: Interpolación del k-scheme para un conector radial contenido en un volumen adyacente a la singularidad, para $\rho u_r S_c \geq 0$.

Por lo que respecta a los otros dos ejes, tanto en la dirección azimutal como longitudinal, simplemente se emplearon dos centroides aguas arriba y uno aguas abajo teniendo en cuenta el signo de la cantidad de movimiento almacenada en el conector y la posición de los ejes en el sistema de referencia. En el esquema presentado a continuación se muestra conceptualmente qué volúmenes se emplearon para aproximar los valores en un conector azimutal siguiendo las fórmulas 2.2.6 y 2.2.7. Se ha obviado la dirección longitudinal porque en este eje la interpolación se realizaba de la misma forma que en el caso cartesiano :

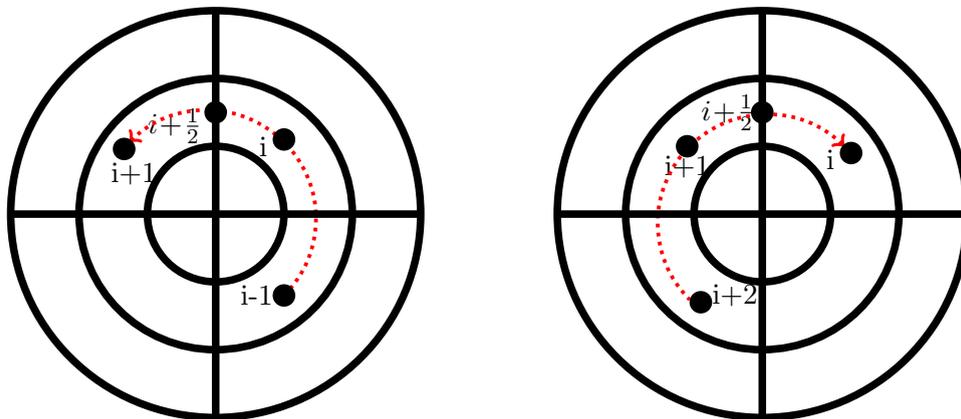


Figura 3.15: Interpolación del k-scheme para un conector azimutal contenido en un volumen adyacente a la singularidad, para $\rho u_\theta S_c \geq 0$ (izquierda) y $\rho u_\theta S_c \leq 0$ (derecha).

Finalmente, solamente queda comentar las diferencias que existen en la formulación discretizada de las ecuaciones de Euler (3.1.12, 3.1.8 y 3.1.3). En la ecuación de la conservación de la masa 3.1.3, la única diferencia consistió en el hecho de que en los volúmenes adjuntos a la singularidad no se concibió que el flujo saliera por ese punto, es decir, únicamente participaban en el cálculo los dos conectores normales a la dirección X y θ , así como el conector superior en la dirección radial. Lo mismo sucedió con el flujo entálpico en la ecuación de la energía. De esta forma, se asumió que todo el flujo que entrara de forma radial a estas celdas se distribuyera a través de los conectores normales a la dirección azimutal, evitando así implicar la singularidad en la formulación del problema. Por lo que respecta a la ecuación de cantidad de movimiento, simplemente destacar que el área S_c que se empleó era la del conector, debido a que realmente la aproximación que se hizo era una adaptación de VF para que la formulación resultara como en diferencias finitas (si fuera completamente en volúmenes finitos las áreas no serían esas, ya que corresponderían a las interpoladas en los centroides de los volúmenes adyacentes al conector). Además, en la dirección azimutal se tuvo en cuenta que la dimensión era curvada, por lo que la separación de los centroides empleada era la resultante del arco de circunferencia que separaba los dos centroides vinculados por el conector:

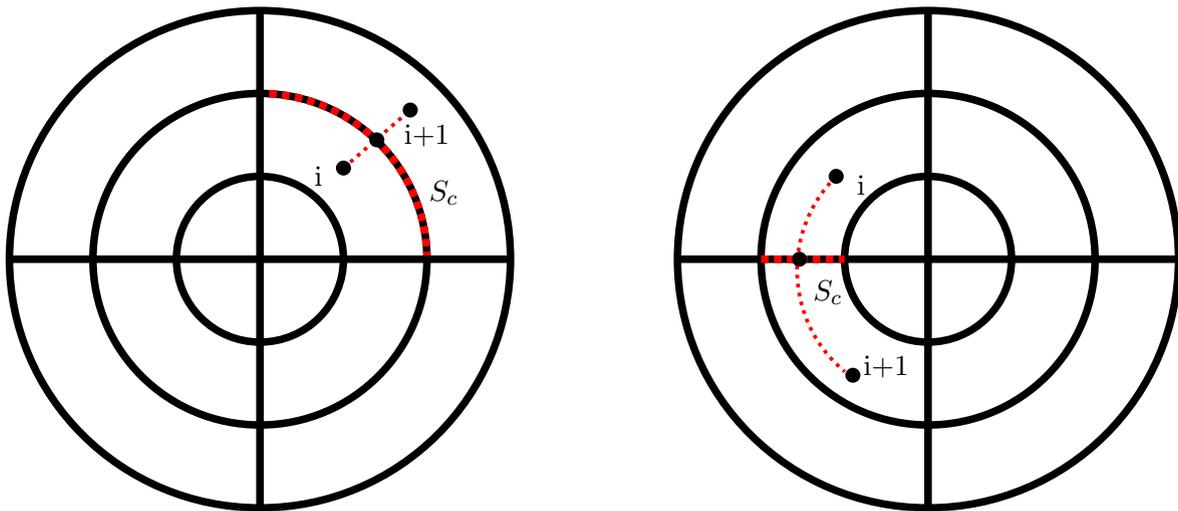


Figura 3.16: Esquema del cálculo de cantidad de movimiento en la dirección radial (izquierda) y en la eje azimutal (derecha).

Capítulo 4

Validación y resultados numéricos

En este capítulo se explica como se ha validado el código obtenido para los distintos modelos desarrollados. En primer lugar, se ha empleado el modelo cuasi-3D de las ecuaciones de Euler, tanto en coordenadas cartesianas como cilíndricas, aplicado a un problema de onda de choque dentro de un tubo basado en los experimentos numéricos realizados por Sod en su artículo [18].

Por lo que respecta a la validación del modelo en cilíndricas en las direcciones azimutales y radiales, se ha empleado una simulación realizada con un software comercial CFD por el tutor del proyecto de un tubo con un flujo radial, de tal forma que esta coordenada entrara en juego.

4.1. Onda de choque en un tubo

Este es un problema clásico empleado en mecánica de fluidos computacional con tal de medir la robustez y validar cualquier tipo de código de flujo compresible. Esta prueba consiste básicamente en un tubo de una determinada dimensión el cual se encuentra dividido a mitad por un diafragma, con unas condiciones iniciales de presión, densidad y velocidad diferentes en cada uno de los lados.

A partir de un determinado instante de tiempo, este diafragma se rompe y las zonas con distintas características de presión, temperatura y densidad entran en contacto súbitamente. A raíz de esto, se generan efectos de compresibilidad a lo largo del tubo que se pueden dividir básicamente en 5 secciones, mostradas a continuación:

Donde err_i es la desviación entre la solución analítica y la numérica para una determinada posición discretizada, mientras que N_X es el número total de divisiones en la dirección principal de cálculo.

Valores iniciales y condiciones de contorno aplicadas

Por lo que respecta a los valores iniciales de las variables de estado, se emplearon en este caso los valores detallados en el primer experimento numérico realizado por Sod [19]. A la izquierda del diafragma, se impuso una presión de $10^5 Pa$, una densidad de $1 kg/m^3$ y una velocidad de $0 m/s$. A la derecha, una presión de $10^4 Pa$, una densidad de $0.125 kg/m^3$ y una velocidad de $0 m/s$.

Por lo que respecta a las condiciones de contorno, se impuso que fueran condiciones de pared en todos los extremos del conducto. De esta forma, el experimento fue en un tubo completamente cerrado, donde no había transporte ni de masa ni de energía a través de las paredes, imponiendo unas condiciones de presión y densidad diferentes inicialmente a cada mitad del mismo. Se puede observar como el salto de presiones que se puso a prueba es de 10, mucho mayor que cualquier salto de presiones que se pueda hallar dentro de la cámara de combustión de un MCIA común. Esto se hizo así porque permitía validar la solidez del método en unas condiciones mucho peores que las normales de operación.

Finalmente, las condiciones geométricas de la simulación consistieron en un cubo de 1 m de lado, donde se usaron 2 divisiones en las direcciones Y e Z , mientras que en la dirección X se han probado 100, 250 y 500 divisiones con la finalidad de tratar de comprender si había alguna variación en las tendencias. El gas se supuso que era ideal ($R=287 \frac{J}{kgk}$, $C_v=717.5 \frac{J}{kgk}$). La simulación se detuvo transcurridos 0.61 ms.

Resultados

Por lo que respecta a los resultados, se realizaron una serie de experimentos donde se pusieron a prueba distintos métodos de integración numérica (Runge-Kutta explícito de 4 pasos, Euler o Euler implícito), así como los distintos métodos de discretización espacial (k-scheme, upwind de primer orden). También se mostró la necesidad de aplicar algún tipo de difusión al método, analizando también los resultados obtenidos en estos casos. Los valores empleados para justificar las tendencias observadas han sido los de 250, aunque se ha ido comentando algunos aspectos que se han considerado interesantes tanto del caso de 100 divisiones como en el de 500.

Rk4 vs Euler - sin difusión - Upwind de primer orden

En primer lugar, se partió de un Euler explícito con una discretización espacial de tipo upwind de primer orden. Esto se hizo así debido a que esta configuración era de las más simples a nivel algorítmico. Además, al usar un esquema de discretización upwind se esperaba que la solución fuera difusiva, aunque el esquema numérico del método era de segundo orden por definición [5]. De esta forma, las variables de estado resultantes podían tener oscilaciones espúreas importantes,

que sumadas a la inestabilidad de un esquema de primer orden temporal explícito (como el Euler) conducían a que los resultados fueran un poco imprevisibles. Esto se puede observar en los resultados obtenidos:

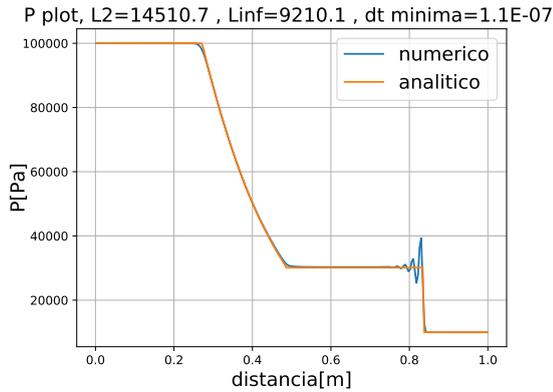


Figura 4.2: Perfil de P a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$

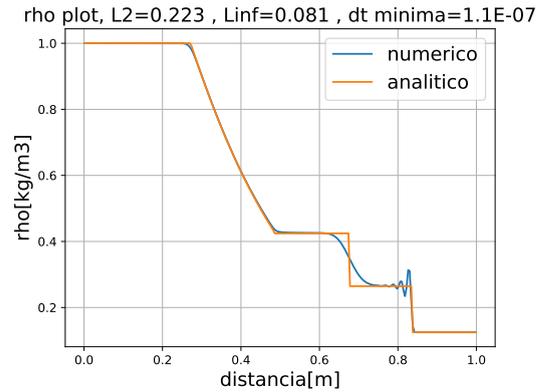


Figura 4.3: Perfil de ρ a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$

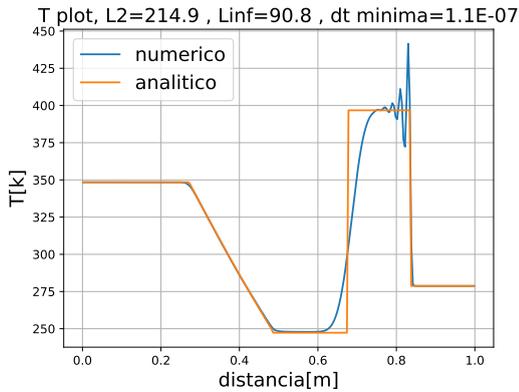


Figura 4.4: Perfil de T a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$

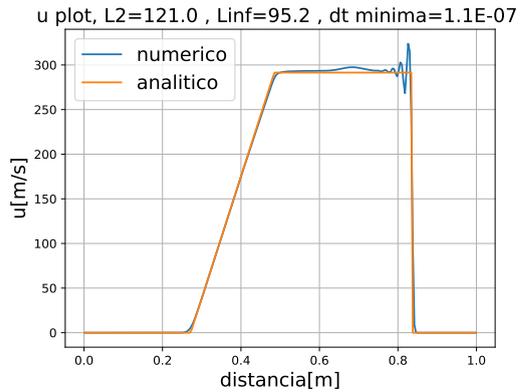


Figura 4.5: Perfil de u a lo largo del conducto (Euler-upwind) con $N_X = 250$

Las figuras mostradas se obtuvieron con un CFL de 0.02. El paso temporal es consecuentemente bastante pequeño, pero aún así se puede ver como la solución presenta oscilaciones espúreas cerca de las discontinuidades, concluyendo que este esquema numérico de por sí no es muy estable, como ya se había adelantado. Además, se puede apreciar la existencia de una discontinuidad de densidad y temperatura a ambos lados de la superficie de contacto (Figura 4.3 y Figura 4.4), donde el método numérico tiene más problemas para seguir el salto de la variable de estado y este salto se realiza en una región espacial más ancha (no infinitesimalmente pequeña). La precisión a la hora de captar esta discontinuidad está íntimamente relacionada con el número de celdas que hayan en la zona de la discontinuidad (cuanto mayor sea el número de celdas, mayor es la resolución espacial y más fielmente se podrá reflejar esta discontinuidad) y con el esquema

de discretización espacial que se emplee.

A continuación, se ha tratado de estudiar si existía alguna diferencia al usar el mismo tipo de discretización espacial (upwind de primer orden) con un integrador temporal multipaso (Runge-Kutta de cuarto orden). En el Anexo (Figura 6.1, Figura 6.2, Figura 6.3, Figura 6.4) se puede observar como para un Courant idéntico al utilizado en Euler (0.02), la solución no ofrece una gran mejora en cuanto a las oscilaciones obtenidas. Además, tampoco ofrece una ventaja diferencial con lo que respecta al error en ninguna de las variables de interés (salvo la presión ligeramente), tal y como se puede ver en la Tabla 4.1. Esto se puede justificar sabiendo que el paso temporal es tan pequeño que es irrelevante que el orden del error sea $\mathcal{O}(\Delta t)$ en el caso de Euler o $\mathcal{O}(\Delta t^4)$ en el caso del Runge-Kutta de cuarto orden, la diferencia obtenida es extremadamente pequeña debido a la magnitud de este Δt .

<i>CFL</i>	<i>Int temporal</i>	Δt_{min}	L_P^2	L_P^∞	L_ρ^2	L_ρ^∞	L_u^2	L_u^∞	L_T^2	L_T^∞	$t_{real(s)}$
0.02	Euler	1.10E-07	14510.7	9210.1	0.223	0.081	121	95.2	214.9	90.8	1121
0.02	Runge - Kutta	1.10E-07	13398.9	8493.6	0.22	0.08	123.4	100.2	214	90.7	3478
0.1	Runge - Kutta	5.40E-07	13326.6	8590.1	0.22	0.08	125.2	103.2	214.4	90.8	636
0.3	Runge - Kutta	1.60E-06	13092.2	9042.2	0.219	0.081	140.4	124.8	217.6	91.4	213
0.6	Runge - Kutta	3.20E-06	13372	9124.7	0.22	0.082	160.5	147.8	222.2	92	108
1	Runge - Kutta	5.40E-06	15048.5	8948.7	0.224	0.083	200.5	187.6	233.3	93.3	62
1.1	Runge - Kutta	5.90E-06	16745.3	11319.3	0.229	0.084	225.5	209.5	241.2	101.1	57
1.2	Runge - Kutta	6.50E-06	12854.7	8571	0.219	0.082	155.1	140.3	221.1	92.2	52

Cuadro 4.1: Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 250$ sin ningún tipo de limitador

Sin embargo, sí que se se ha podido apreciar que el esquema multipaso es bastante más estable, permitiendo aumentar de forma notable el paso temporal antes de apreciar un empeoramiento evidente de la solución. En este caso, se puede ver como en CFL=1.2 empiezan a aparecer oscilaciones espúreas adicionales, tanto en Figura 4.7 como en Figura 4.6, que sugieren la inestabilidad del resultado de las variables del vector de estados.

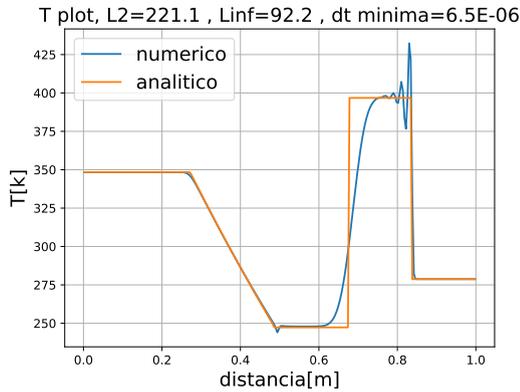


Figura 4.6: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.2-Rk4-upwind) con $N_X = 250$

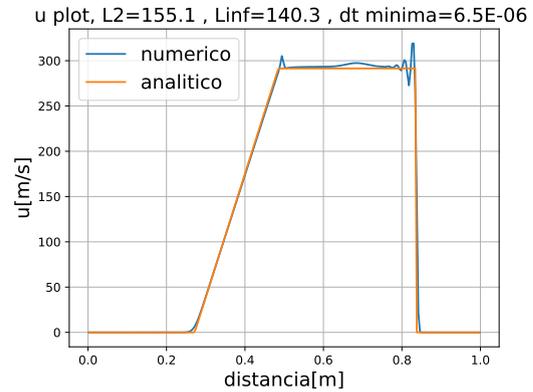


Figura 4.7: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=1.2-Rk4-upwind) con $N_X = 250$

Además, se puede observar en Tabla 4.1 como el error se va manteniendo más o menos constante, oscilando alrededor de los valores del paso anterior, hasta que el paso temporal se vuelve más grande (CFL=0.6). A partir de este punto el error de las variables ya empieza a ser más sensible al paso temporal, principalmente para las variables de velocidad y temperatura. Esto en un principio puede no tener sentido, ya que se supone que a medida que aumenta el paso temporal el error que se propaga en cada una de estas iteraciones es mayor. Esto se puede deber seguramente a que en los primeros casos el paso temporal es tan pequeño ($10^{-7} \sim 10^{-8}$) que el problema es extremadamente rígido. El inconveniente de este tipo de problemas es que normalmente es necesario emplear un integrador implícito, por lo que si se emplea un integrador explícito con un paso temporal tan pequeño, el error de truncación local actúa como un perturbador del sistema que incluye pequeñas variaciones alrededor de la solución ideal numérica. Esto lo que quiere decir es que la solución no se va a ver prácticamente afectada por la variación de Δt . Al aumentar el paso temporal, el orden del error temporal vuelve a ser relevante y por lo tanto se puede ver como ahora el error sí que empieza a aumentar (en la mayoría de los casos) a medida que el paso temporal aumenta.

Esta teoría se sustenta además en el hecho de que en el estudio con 250 divisiones, el aumento del error debido al paso temporal no se da de forma relevante hasta alcanzar $1 \cdot 10^{-6} s$. Observando los resultados obtenidos para 500 y 100 divisiones, se puede observar como el error de la solución también empieza a tomar una cierta relevancia una vez se ha alcanzado este paso temporal mediante el correspondiente número de Courant para cada uno de estos casos. A continuación, se añaden los resultados de los experimentos numéricos hechos con Runge-Kutta para esta configuración de problema, tanto en el caso de $N_X = 100$ como $N_X = 500$.

CFL	Δt_{min}	L_P^2	L_P^∞	L_ρ^2	L_ρ^∞	L_u^2	L_u^∞	L_T^2	L_T^∞	$t_{real}(s)$
0.02	2.70E-07	19488.8	14809.7	0.208	0.105	161.8	147.8	175	79	502
0.1	1.30E-06	19306.9	14594.2	0.207	0.103	158.8	144.5	174.5	79.2	100
0.3	4.00E-06	18108.4	12981.1	0.202	0.094	139.9	122.3	171.5	80.2	33
0.6	8.10E-06	16924	11001.6	0.197	0.082	124.7	99.9	169.3	81.3	17
1	1.40E-05	14647.3	8388.2	0.188	0.073	125.7	99.4	171.1	84.5	10
1.1	1.50E-05	14465.1	8567.7	0.187	0.074	132.7	110.5	172.8	85.1	10
1.2	1.60E-05	17062.3	11676.5	0.199	0.086	133.6	110	169.3	81.5	9

Cuadro 4.2: Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 100$ sin ningún tipo de limitador, empleando un integrador Rk4

CFL	Δt_{min}	L_P^2	L_P^∞	L_ρ^2	L_ρ^∞	L_u^2	L_u^∞	L_T^2	L_T^∞
0.1	2.70E-07	16475.9	11382.6	0.263	0.084	126.1	104.4	247.5	89.3
0.3	8.10E-07	15943.7	10490.5	0.261	0.079	121	95.2	247.2	89.2
0.6	1.60E-06	16686.4	11729	0.264	0.086	128.7	108.4	247.7	89.2
1	2.70E-06	13076.7	8531.6	0.254	0.081	133.4	113.9	250.7	91.1
1.1	3.00E-06	15812.5	10824.2	0.261	0.081	124.6	100.9	247.1	89.6
1.2	3.20E-06	16177.3	11557.3	0.262	0.085	130.6	109.4	247.5	89.5

Cuadro 4.3: Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 500$ sin ningún tipo de limitador, empleando un integrador temporal Rk4

Observando estos resultados, se puede ver como el coste computacional (traducido como tiempo real de cálculo) aumenta del orden de N_X^2 , donde N_X es el número de volúmenes empleados para discretizar el dominio en la dirección de cálculo del fenómeno. Esto se puede comprobar fácilmente viendo como el ratio de tiempos de cálculo entre Tabla 4.1 y Tabla 4.2 es aproximadamente igual a 6.25, lo cual coincide con el ratio $(\frac{250}{100})^2$. Se ha indicado esta relación mediante este ejemplo en particular pero es importante destacar que se da en cualquier tipo de cálculo computacional.

Se puede deducir pues que lo apuntado en párrafos anteriores se mantiene a pesar de las variaciones del número de volúmenes: el error de la solución empieza a descender una vez alcanzado un CFL de 0.3 en 4.2, mientras que en 4.3 este error tiende a permanecer más o menos constante, pero solo empieza a oscilar una vez alcanzado el valor de CFL de 0.6. Probablemente, esta discrepancia de tendencias en las tres configuraciones se deba al escaso número de volúmenes en el caso de $N_X = 100$, por lo que simplemente el número de nodos empleados puede que no fuera suficiente para captar la tendencia real del esquema numérico y refleje soluciones poco realistas. Por lo que respecta al caso con 500 divisiones (Tabla 4.3) en la dirección principal del fenómeno, se puede observar como los errores oscilan pero no tienen variaciones en su magnitud igual de importantes que las comentadas en los anteriores casos. Esto se puede deber simplemente al hecho de que al aumentar el número de celdas, el paso temporal disminuye todavía un poco más, por lo que el problema se vuelve todavía más rígido, no propagando el error temporal y

registrando únicamente estas perturbaciones.

Otra posible explicación es que como el problema es inestable, los errores no tienden a seguir los mismos patrones en el tiempo a pesar del refinamiento que pueda sufrir la malla. No se puede asegurar la monotonicidad del problema, como ya se ha comentado, por lo que no se puede asegurar que si $\phi_{i+1} > \phi_i$ en un paso temporal n , esto siga siendo así en un paso temporal $n+1$. Esto lo que querría decir es que no es muy útil tratar de aumentar el número de elementos para conseguir una independencia de los resultados ya que debido al esquema esta no se va a hallar nunca (no es convergente).

K-scheme sin limitador de flujo

En este caso se empleó un k-scheme, con k igual a 0.5 (QUICK), probando distintos tipos de integradores temporales sin aplicar difusión de ningún tipo .

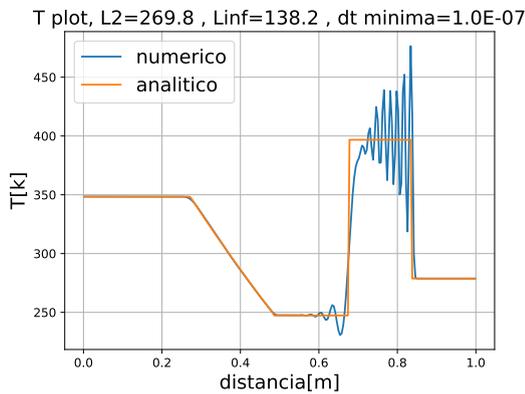


Figura 4.8: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-k-scheme) con $N_X = 250$

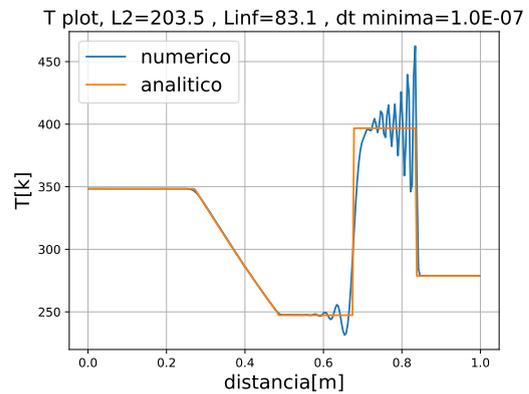


Figura 4.9: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$

Como se puede observar, el teorema de Godunov se cumple en estos casos. Este teorema dice que cualquier método lineal de discretización espacial de orden igual o mayor a 2 conduce a una solución dispersiva, apareciendo una serie de oscilaciones debido al método numérico. En este caso, al haber usado un esquema de discretización de alto orden lineal, se puede apreciar como las oscilaciones se han vuelto bastante importantes. Esto evidenció la necesidad de introducir algún tipo de limitador de flujo que tratase de eliminar estas sobreoscilaciones existentes.

Además, se puede observar como lo apuntado en la sección anterior sobre la inestabilidad y el error también se cumple en este caso, pudiéndose ver claramente debido al tamaño de las oscilaciones. Un aumento del número de volúmenes únicamente conduce a una mayor resolución a la hora de captar estas variaciones y por lo tanto posiblemente a un aumento del error. Esto resulta evidente si se observa los mismos gráficos obtenidos para el caso $N_X = 100$ en la dirección de cálculo:

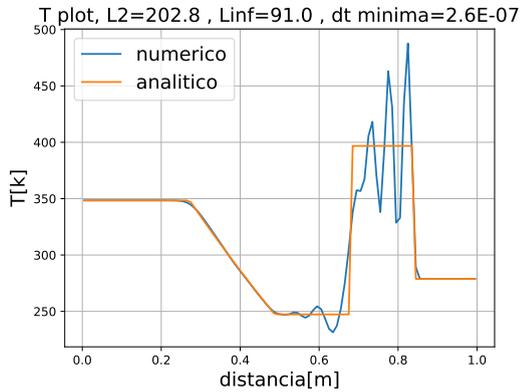


Figura 4.10: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-k-scheme) con $N_X = 100$

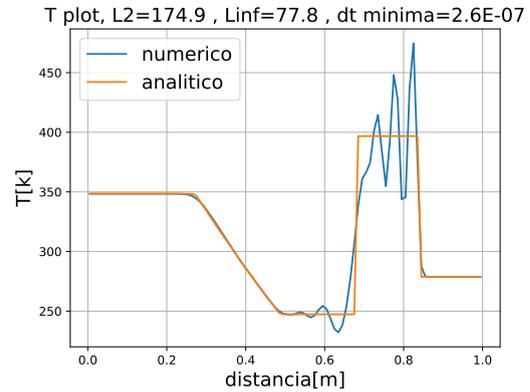


Figura 4.11: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-k-scheme) con $N_X = 100$

El error es mucho mayor en Figura 4.9 y en Figura 4.8 que en Figura 4.10 y Figura 4.11 por el simple hecho de que hay una mayor cantidad de puntos discretizados en ese caso y por lo tanto el error ha de ser mayor por fuerza, ya que el esquema numérico no tiende a ser exactamente igual que el analítico.

Euler vs Runge-Kutta 4 pasos con MDT

Para esta parte, se seleccionó 2 valores de CFL diferentes (0.1 y 0.2), sabiendo que a la ecuación de cantidad de movimiento se le había añadido un término de difusión artificial (MDT). Todos los experimentos se relizaron usando una discretización espacial de tipo k-scheme ($k=0.5$)

CFL	int temp	Δt_{min}	L_P^2	L_P^∞	L_ρ^2	L_ρ^∞	L_u^2	L_u^∞	L_T^2	L_T^∞	$t_{real}(s)$
0.1	Euler	5.60E-07	11311.5	8303.6	0.166	0.075	220.8	208.8	168.2	93.2	338
0.2	Euler	1.10E-06	14663.7	8548.6	0.168	0.077	239.6	228.2	176.5	96	170
0.1	Rk4	5.60E-07	12327.7	9797.2	0.176	0.075	229.2	210.4	172.1	91.8	932
0.2	Rk4	1.10E-06	13079	10603.1	0.177	0.081	238.7	217.7	174	92.2	786

Cuadro 4.4: Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 250$ con MDT, empleando un integrador temporal Rk4.

Por lo que respecta a los errores, se puede ver en la Tabla 4.4 como estos son muy parecidos para ambos integradores temporales, no apreciando ninguna ventaja significativa entre ellos. Se puede apreciar una cierta mejoría del error de la presión para Rk4, pero el resto de variables empeoran con este integrador. En ambos casos, se aprecia como la solución ha mejorado ostensiblemente respecto de la que se había obtenido sin ningún limitador de flujo, eliminando en gran medida estas sobreoscilaciones (menos en el caso de la temperatura, que sigue habiendo un pico mínimo) y mejorando los valores del error para la temperatura y la densidad principalmente (Tabla 4.4 y Tabla 4.1). Sin embargo, el error acumulado de la presión y la velocidad empeora.

A continuación, se muestra los gráficos de uno de los experimentos realizados (CFL=0.2-Rk4-k-scheme-MDT) para mostrar como estas sobreoscilaciones han decrecido enormemente, en todos los casos se han obtenido resultados similares. Aunque es destacable comentar que los casos con Runge-Kutta siguen mostrándose más estables, como se puede ver si se comparan estos gráficos con los obtenidos con Euler para el mismo CFL (Figura 6.5, Figura 6.6, Figura 6.7, Figura 6.8):

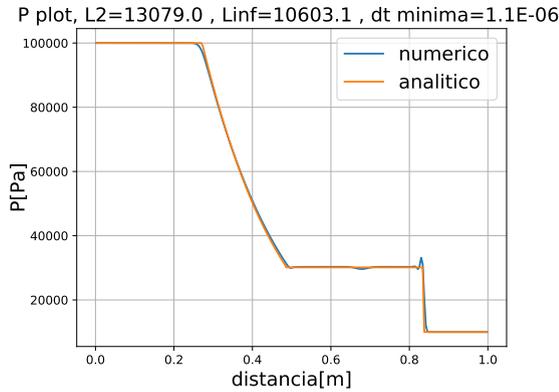


Figura 4.12: Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$

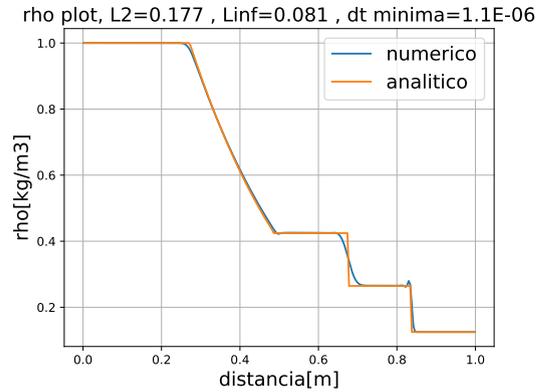


Figura 4.13: Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$

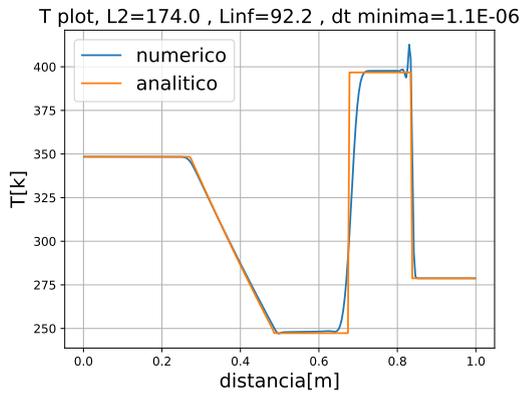


Figura 4.14: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$

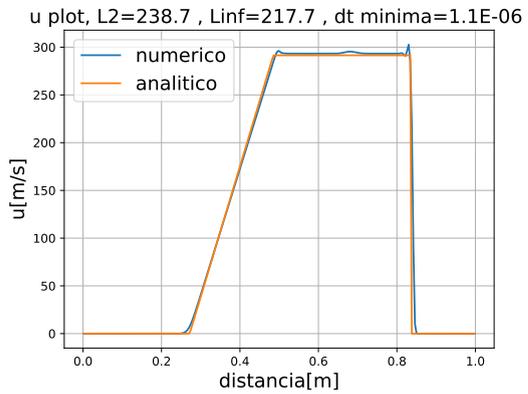


Figura 4.15: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.2-Rk4-k-scheme) con $N_X = 250$

Upwind vs k-scheme aplicando MDT

Para este experimento, se empleó un integrador temporal Runge-Kutta de 4 pasos. Esto se hizo por el hecho de que este esquema no garantiza automáticamente que un aumento del paso temporal produzca un incremento del error de la solución hasta que las sobreoscilaciones sean muy grandes. Por este motivo, al ser un integrador temporal más estable, el aumento del paso temporal permitía compensar el coste computacional mayor de este método y el cálculo podía acabar siendo finalmente más rápido que empleando un euler explícito.

El objetivo primario de esta tanda de experimentos era comprobar que después de aplicar un término de difusión adicional que eliminara las sobreoscilaciones, los resultados del k-scheme mejoraban a los del upwind en cuanto a los valores de L^2 y reducción del rango espacial que se necesitaba para captar el salto generado en la zona de la discontinuidad tanto para la densidad como para la temperatura. Además, se trató de ver hasta que punto se podía aumentar el CFL sin que las sobreoscilaciones aumentaran de forma importante. Los resultados obtenidos se pueden apreciar en la siguiente tabla, los cuales pertenecen al caso de 500 divisiones:

CFL	$disc\ espacial$	Δt_{min}	L_P^2	L_P^∞	L_ρ^2	L_ρ^∞	L_u^2	L_u^∞	L_T^2	L_T^∞
0.1	k-scheme	2.80E-07	9366.1	4728.3	0.187	0.075	160	147.9	182.2	89
0.2	k-scheme	5.60E-07	9359.8	5029.1	0.186	0.074	164.4	153	181.1	89.1
0.5	k-scheme	1.40E-06	9697.6	5982.9	0.182	0.073	178.3	167.7	178.2	89
0.6	k-scheme	1.70E-06	9522.3	4794.2	0.179	0.074	160.2	149.9	174.1	87.8
0.1	upwind	2.90E-07	10256.2	5663.7	0.265	0.078	155.1	134.6	256.2	89.1
0.2	upwind	5.70E-07	10227.6	5451.3	0.265	0.078	161.4	143.1	256.8	89.3
0.5	upwind	1.40E-06	10367.3	6664.2	0.263	0.078	142	117.1	252.5	88.8
0.6	upwind	1.70E-06	10341.2	6165.6	0.262	0.077	169.2	153.2	256.7	89.7

Cuadro 4.5: Errores, tiempo de computación (t) y paso temporal mínimo para $N_X = 500$ con MDT, empleando un integrador temporal Rk4

A juzgar por estos datos, el k-scheme ha mejorado los resultados obtenidos por el esquema tipo upwind en el error acumulativo L^2 para la mayoría de variables, pero no para la velocidad. Esto se debe a que este método de difusión no es capaz de hacer completamente TVD el esquema numérico, por lo que en el caso del k-scheme aparece un pequeño pico que es el que produce un aumento del error con respecto del caso de upwind, pero si se exceptúa esta región (relacionada con la efectividad a la hora de quitar las sobreoscilaciones), el esquema sigue siendo más preciso que en el caso upwind, ya que existe una zona intermedia donde se puede observar como la solución se curva, mientras que el esquema de alto orden es capaz de reflejarla prácticamente plana. A pesar de esto, se puede apreciar como el descenso del error se da fundamentalmente en aquellas variables donde existe una gran salto en la variable de estudio, como por ejemplo la región de discontinuidad. Este nuevo esquema de discretización espacial permite captar de forma más fidedigna este tipo de discontinuidades para un determinado número de volúmenes, como se puede observar a continuación:

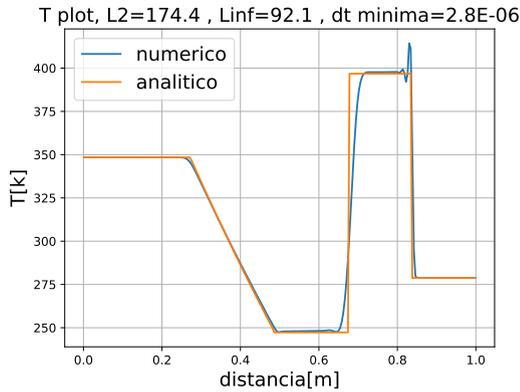


Figura 4.16: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 250$

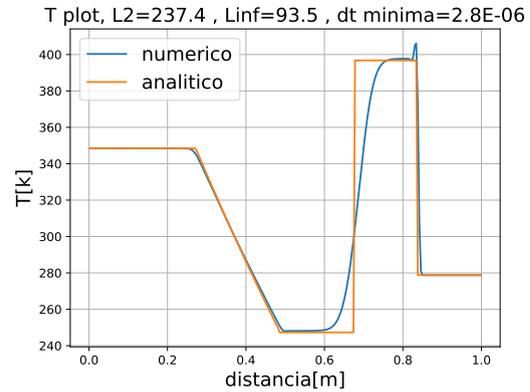


Figura 4.17: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-upwind-MDT) para $N_X = 250$

En el k-scheme el área que queda comprendida entre la curva numérica y la analítica es menor que en el caso del upwind, siendo esta última más difusiva. De esta forma, se puede considerar que efectivamente el k-scheme mejora los resultados obtenidos al aplicar algún limitador de flujo que suprima las oscilaciones, como era de esperar. Además, al ser un esquema de alto orden su tendencia a tener sobreoscilaciones es mayor que en el caso upwind, de ahí que el pico sea un poco más puntiagudo en este caso, como ya se había comentado.

Además, se observó que el valor límite de CFL para que estas sobreoscilaciones no fueran importantes cuando se emplea un método numérico con k-scheme ($k=0.5$), Runge-Kutta de 4 pasos explícito y añadiendo un término difusivo a la ecuación de conservación del movimiento (MDT), es de 1. Este valor se dedujo por el hecho de que, al usar pasos temporales mayores, se producían sobreoscilaciones importantes que prácticamente acababan con las ventajas de aplicar un MDT, los gráficos para CFL=1 se encuentran en el apéndice (Figura 6.9, Figura 6.10, Figura 6.11 y Figura 6.12).

Es importante destacar que la precisión a la hora de reflejar estas discontinuidades en el esquema numérico desarrollado se puede alcanzar de dos formas distintas: subiendo el orden del esquema de discretización o aumentando el número de volúmenes [5]. Por este motivo, se trató de mostrar este hecho realizando un experimento numérico en el que eligiendo un integrador temporal determinado (Rk4) y un discretizador espacial (k-scheme) para un paso temporal (CFL=0.6) se intentaba ver si existía alguna diferencia al aumentar el número de elementos (100,250,500) para la variable con un mayor salto de magnitud en la zona de discontinuidad, es decir, la temperatura:

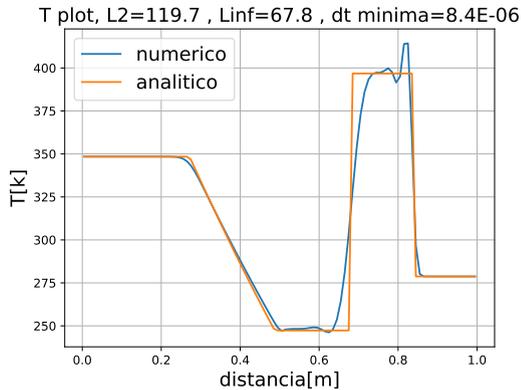


Figura 4.18: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.6-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 100$

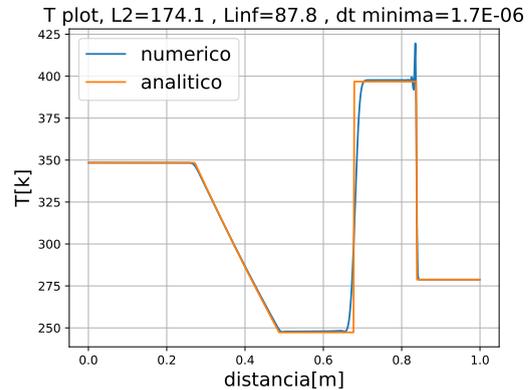


Figura 4.19: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.6-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 500$

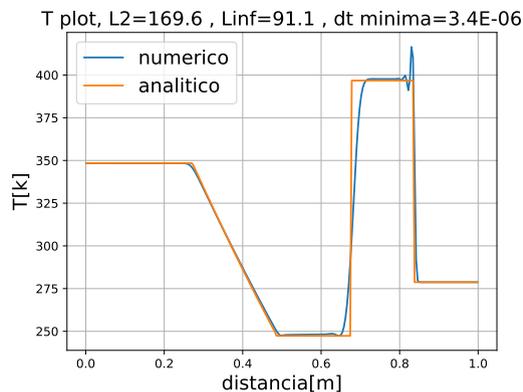


Figura 4.20: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.6-Rk4-ksch-MDT) para $N_X = 250$

Una cosa que puede llamar la atención es que a simple vista se puede ver que efectivamente, cuanto mayor es el número de volúmenes en la dirección de cálculo, mejor se capta la discontinuidad. Sin embargo, se puede ver como el error aumenta a pesar de esto cuanto mayor es el número de volúmenes. Esta aparente contradicción resulta por el hecho de que el esquema numérico no tiende a reducir el error para un determinado instante a medida que se reduce el tamaño de la malla, es decir, el esquema numérico no converge a la solución analítica. Además, estos experimentos numéricos son la prueba de que a pesar de emplear limitadores de flujo, la solución sigue sin ser completamente monotónica.

Estudio paramétrico del CFL vs ϑ mediante el método FCT

Uno de los objetivos del trabajo era poder realizar un estudio paramétrico aplicando el método FCT en el esquema numérico, con tal de poder ver la influencia de la difusión en el paso temporal máximo, así como la precisión de la solución obtenida. Con esto se trataba de obtener el máximo

paso temporal posible que minimizara las oscilaciones, y al mismo tiempo redujera el error acumulado (L_2) al máximo posible.

Para realizar este estudio se escogió el integrador temporal Runge-Kutta, al ser el que permitía emplear pasos temporales mayores (no se tenía el integrador implícito en aquel momento), y una discretización espacial de tipo k-scheme, al obtenerse un menor error con este esquema. Se probaron de forma cruzada tanto distintos pasos temporales, regulados por el número de Courant (0.5,0.7,0.9,1.1,1.3,1.4), como coeficientes de difusión (0.1,0.2,0.5,0.7,0.9).

ϑ	CFL	Δt_{min}	L_P^2	L_P^∞	L_ρ^2	L_ρ^∞	L_u^2	L_u^∞	L_T^2	L_T^∞	$t_{real}(s)$
0.1	0.3	1.70E-06	29142.4	10790.2	0.296	0.088	343.5	227.1	204	89.3	266
0.1	0.5	2.90E-06	22192.8	11010.2	0.237	0.088	294.3	225.8	182.7	90.5	159
0.1	0.7	4.00E-06	20190.9	12318.1	0.214	0.094	283	228.6	179.6	91.9	115
0.1	0.9	5.00E-06	21987.3	15697.8	0.213	0.112	309.3	250	192.4	99.1	-
0.1	1.3	7.20E-06	24062.2	18859.2	0.213	0.126	323.3	265.4	206.8	122.3	151
0.2	0.5	2.90E-06	24218	10862	0.255	0.087	304.3	225.2	187.1	89.2	168
0.2	0.7	4.00E-06	22312.4	13420.3	0.231	0.102	309.4	238.7	187.1	92.3	285
0.2	0.9	5.10E-06	22438.8	15528	0.221	0.112	317.2	251.5	192.4	96.4	142
0.2	1.3	7.20E-06	25989.6	20061.3	0.226	0.133	342.2	275.8	216.1	127.7	67
0.5	0.5	2.90E-06	30327.1	11643.2	0.305	0.094	359.5	234.2	205.9	88.8	162
0.5	0.7	4.00E-06	24415.2	10392.1	0.257	0.084	294.6	219.8	184.9	87.7	116
0.5	0.9	5.20E-06	22575.1	12700.8	0.237	0.098	302.9	234.2	184.9	90.9	171
0.5	1.1	6.30E-06	22227.6	14697.1	0.227	0.108	308.7	244.6	188.4	92.8	-
0.5	1.3	7.40E-06	26491.6	19369.4	0.241	0.133	358.3	276.3	214.9	117.6	66
0.5	1.4	7.50E-06	24879	18618.2	0.229	0.127	337.8	271.4	209.2	116.5	59
0.7	0.5	2.90E-06	33592.7	11656.2	0.333	0.094	386.8	235.4	215.9	88.6	162
0.7	0.7	4.00E-06	27379.4	10876.8	0.282	0.088	321.6	225.2	194.5	87.8	115
0.7	0.9	5.20E-06	25150.2	13085.1	0.258	0.101	327.9	239.5	192.7	90.7	94
0.7	1.1	6.30E-06	25484.4	15960.5	0.251	0.117	348.3	256.8	201.2	94.5	76
0.7	1.3	7.40E-06	21657.6	14393.7	0.223	0.106	296	240.3	186.2	92.6	62
0.7	1.4	7.40E-06	18836	11144.7	0.207	0.085	248.6	214	173.7	91.2	59
0.9	0.5	2.90E-06	36583.8	11611.8	0.358	0.094	411.4	235.8	225	88.3	162
0.9	0.7	4.00E-06	29998.6	11066.4	0.303	0.09	344.6	228	202.9	87.8	116
0.9	0.9	5.20E-06	27268.5	12982	0.276	0.101	345.8	240.5	199.1	90.5	103
0.9	1.1	6.30E-06	27165.1	15664.5	0.266	0.117	365.3	255.3	206.1	94	72
0.9	1.3	7.40E-06	24130.7	15269.7	0.241	0.113	326.1	250.2	195.2	93.6	60
0.9	1.4	7.40E-06	20939.9	12641.5	0.223	0.096	272.9	226	181.1	91.8	60

Cuadro 4.6: Tabla del estudio paramétrico de ϑ contra CFL para $N_X = 250$

Por lo que respecta a las observaciones generales del Tabla 4.6, se puede observar como a medida que aumenta el coeficiente de difusión, el error obtenido para un mismo paso temporal aumenta también. Esto está en consonancia con el hecho de que el esquema es bastante difusivo de por sí en cuanto a la captación de las discontinuidades (al añadir el FCT), por lo que al aumentar el coeficiente difusivo el error aumenta todavía más. Sin embargo, para el caso particular de 250,

se puede ver también como existe un punto de inflexión en cuanto al paso temporal a partir del cual el error vuelve a aumentar. Este punto de inflexión parece además que aumente a medida que el coeficiente de difusión ϑ lo hace también, ya que para un coeficiente de difusión de 0.1 se da para un CFL de 0.7, en 0.2 empieza en 0.9, en 0.5 en 1.1, en 0.7 en 0.9 y finalmente para ϑ igual a 0.9 no se da.

Para entender esto simplemente hay que observar lo que sucede por ejemplo en la solución de la temperatura a medida que se aumenta el paso temporal para un coeficiente de difusión de 0.7, cuyas imágenes se pueden encontrar en el Anexo (Figura 6.17, Figura 6.18 y Figura 6.19). En la imagen de Figura 6.17, se puede ver como la solución del perfil de temperatura es extremadamente difusiva, ya que el coeficiente de difusión es muy grande y el paso temporal bastante pequeño, esto conlleva a que no haya ningún pico en la solución interna. Sin embargo, el error es el más grande de las tres imágenes asociadas ya que la pendiente de la zona de rarefacción es demasiado suave, además de que no es capaz de reflejar las discontinuidades en la solución de una forma más aproximada a la realidad debido a esta difusión. Cuando se incrementa el paso (Figura 6.18), se puede ver como el error temporal empieza a compensar parte de esta difusión y por lo tanto la pendiente de la zona de rarefacción empieza a semejarse a la analítica. Sin embargo, se ha observado que para el caso de $N_X = 250$, el perfil de T vuelve a sufrir oscilaciones espúreas una vez que el aumento del paso temporal resulta ser abusivo (Figura 6.19). El Δt a partir del cual el esquema vuelve a ser profundamente dispersivo es lo que se ha denominado como punto de inflexión, el cual no siempre aparece ya que para las configuraciones de 500 y 100 celdas los resultados obtenidos únicamente descienden a medida que se aumenta el paso temporal.

Así pues, se observa que el FCT es un método tremendamente efectivo para retirar las sobreoscilaciones, pero al mismo tiempo añade tanta difusión que la solución es mucho más suave que la obtenida en el método MDT. Esto se puede deber a que este corrector de flujo es un sistema de postproceso, mediante el cual se añade difusión en las zonas con un elevado gradiente, recuperándose la solución y precisión originales en aquellas zonas donde no existe tal discontinuidad. Esta suavidad en la solución se puede distinguir fácilmente en la zona de rarefacción, donde la pendiente es mucho más plana que en la solución analítica, atenuando también la variación que se origina en la zona sin perturbar de la izquierda y esta onda con respecto al método MDT. A pesar de que en la zona de la superficie de contacto no se observan diferencias relevantes entre ambos métodos, en el caso del salto producido por la onda de choque esto se sigue viendo.

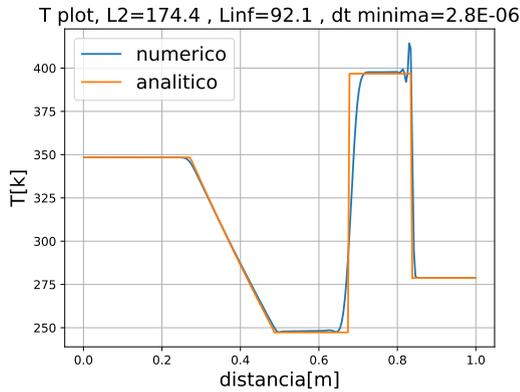


Figura 4.21: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-k-scheme-MDT) para $N_X=250$

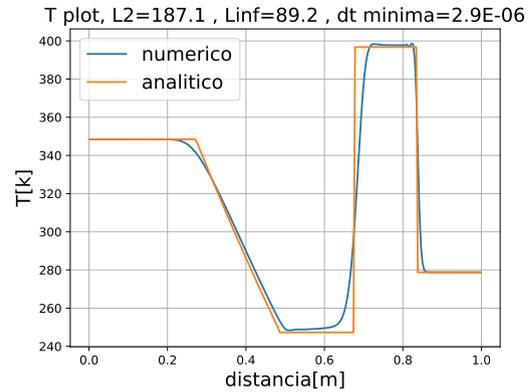


Figura 4.22: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-k-scheme-FCT($\vartheta=0.2$)) para $N_X=250$

Para finalizar con este análisis, simplemente sería remarcable comentar que en los casos con un coeficiente de difusión pequeño (0.1 y 0.2), el máximo número de Courant antes de tener problemas de sobreoscilaciones era 0.7, a partir de estos valores el cresteo característico de las soluciones inestables se volvía a producir. Tampoco se podía sobrepasar el valor de 1.3 en estos experimentos debido a que la difusión aplicada no era suficiente para incrementar el paso temporal. Para valores de difusión mayores de 0.5, se dedujo que el máximo CFL que se podía obtener antes de tener problemas con las iteraciones (oscilaciones tan grandes que los números eran negativos para algunas) era de 1.4. Se pudo ver que este valor no se podía aumentar a pesar de subir el coeficiente de difusión (ϑ), por lo que al incrementar este coeficiente, el error se incrementaba también en la mayoría de casos por las razones explicadas anteriormente. De esta forma, se llegó a la conclusión de que los valores que permitían obtener el menor error posible, junto al mayor paso temporal, eran un coeficiente de difusión de 0.7 y un CFL de 1.4. Estos resultados se pueden observar en el Anexo (Figura 6.13, Figura 6.14, Figura 6.15 y Figura 6.16).

Sin embargo, el esquema numérico no es convergente, tal y como se ha comentado en repetidas ocasiones, por lo que este fue el resultado de la optimización para $N_X = 250$ y no se podía asegurar que fuera a ser así para cualquier malla. Por este motivo, se repitió este mismo estudio tanto con 100 volúmenes como con 500 y se dedujo en esas dos ocasiones que el coeficiente de difusión óptimo era de 0.5, mientras que el paso temporal se rebajaba a 1.3. Este resultado tampoco permitía deducir que estos fueran los valores óptimos para cualquier configuración de problema que emplee el esquema de difusión FCT, pero sí se puede afirmar que, para un rango de volúmenes habitual en este tipo de programas (de 400 a 2000 celdas), el valor óptimo del número de Courant por lo que respecta a la minimización del error y a la obtención de las menores oscilaciones posibles, se va a situar entorno a $1.3 \sim 1.4$, mientras que el coeficiente de difusión estará entre $0.5 \sim 0.7$.

Resultados integrador implícito

Finalmente por lo que respecta al caso cartesiano, se trató de analizar hasta que punto se podía aumentar el paso temporal de un integrador implícito sin afectar irremediamente a la solución. Para lograr este objetivo, se creyó que la mejor forma era realizar un estudio en el que se aumentara el paso temporal del caso que mejores resultados había aportado (usando k-scheme como discretizador, Runge-Kutta como integrador temporal y MDT) hasta el punto en el que el error ya fuera insostenible.

Sin embargo, no fue posible obtener resultados concluyentes en este análisis ya que después de un determinado número de pasos temporales, una serie de celdas que constituían una de las áreas transversales en la dirección principal de transmisión del movimiento se quedaba sin energía, por lo que su temperatura se volvía negativa y el cálculo no podía seguir. Aun así, cabe destacar que empleando la configuración básica de Euler-upwind-CFL=0.02, se pudo ver que la primera iteración temporal daba más o menos los mismos resultados que las obtenidas al hacer dos pasos explícitos.

Esto se debió fundamentalmente al hecho de que en el cálculo explícito, los efectos de la cantidad de movimiento calculada en el paso n , no se veían reflejados en las variables escalares del dominio hasta el paso temporal $n+1$, donde ya pasaban a formar parte de las ecuaciones de Euler. Por lo tanto, se puede decir que existía una especie de retardo entre la cantidad de movimiento calculada en un determinado instante temporal y el resto de variables, hecho que se debe de tener en cuenta al sacar las variables de la función ‘integra’ (es necesario actualizar la velocidad en los centroides y la presión una vez más para que las variables escalares verdaderamente correspondan con lo calculado en el último instante). En el cálculo implícito esto no ocurrió, ya que todo se calcula al mismo tiempo, por lo que no existía ningún tipo de retardo entre las variables calculadas.

Se ha repasado en numerosas ocasiones tanto el planteamiento como la implementación del programa y se ha llegado a la conclusión de que el error debe estar en alguna parte del código relacionada con el cálculo implícito, es bastante difícil encontrar cualquier tipo de equivocación minúscula que pueda haber y que desbarata por completo el código debido a la complejidad del mismo, por lo que se ha dejado como sugerencia para futuros trabajos tratar de encontrar este error.

4.2. Validación problema en coordenadas cilíndricas

Uno de los objetivos del proyecto era desarrollar un código en coordenadas cilíndricas que pudiera reflejar de forma más o menos fidedigna los fenómenos fluidodinámicos tridimensionales que se pudieran dar en conductos reales contenidos dentro de un motor o en un ciclo combinado. Una vez explicada e implementada una solución numérica para estas necesidades, era necesario validar sus resultados para comprobar lo fiables que eran. Para hacerlo, se han empleado dos experimentos numéricos:

- Experimento 1: el caso de validación empleado anteriormente (onda de choque dentro de un tubo)
- Experimento 2: caso de validación en un tubo cilíndrico mediante la comparación de los resultados obtenidos con los de un software de CFD comercial.

El primer experimento se ha empleado con tal de poder validar el comportamiento 1D del código en cilíndricas, para ver si el esquema numérico conducía a alguna diferencia con respecto a los resultados en coordenadas cartesianas, cosa que a priori no sería lo esperable. El segundo experimento es el que se ha empleado para poder validar la dirección radial y por lo tanto es el que tiene un mayor interés.

Experimento de tubo de choque

En este caso, se volvió a comprobar que los resultados obtenidos para el caso cartesiano 1D correspondían con los calculados mediante el código en cilíndricas. Para probarlo, se repitieron los gráficos de presión, temperatura, velocidad y densidad para la configuración con 100 divisiones en la dirección longitudinal. En todos los casos analizados, los resultados obtenidos fueron exactamente los mismos en ambas configuraciones, esto se puede observar si se comparan por ejemplo los gráficos en cilíndricas de la Figura 6.20, la Figura 6.21, la Figura 6.22 y la Figura 6.23 con los correspondientes en cartesianas (Figura 4.2, Figura 4.3, Figura 4.4 y Figura 4.5)

Este era el resultado esperable, ya que al ser un fenómeno de onda plana, solamente se transmitía en una única dirección. De esta forma, su resultado no guarda ninguna relación con respecto a los volúmenes o las áreas transversales a la dirección de propagación, si no que únicamente depende del ΔL entre los centroides en la dirección de cálculo, así como las condiciones de contorno y los valores iniciales. Este hecho puede ser demostrado matemáticamente teniendo en cuenta el esquema numérico empleado para resolver el problema.

Valores iniciales y definición del caso radial- Experimento 2

En este experimento numérico realizado mediante un software comercial por el tutor del proyecto, se definió un tubo de 1 m de largo con 0.1 m de diámetro. El aire se asumió que seguía la ley de los gases ideales. Por lo que respecta a los valores iniciales, se estableció que la temperatura fuera de 300 K, una presión en la zona externa del cilindro de 100 kPa. Se dice que en la zona externa del cilindro, por el hecho de que existía una región interior en el centro de diámetro 0.05 m y longitud 0.1 m donde la presión era 150 kPa. De esta forma, se produjo una diferencia de presión en la dirección radial que activaba la influencia de esta coordenada en los resultados de la ecuación.

A continuación, se adjunta una imagen del contorno de presiones del primer paso temporal del caso evaluado para que se pueda entender mejor la descripción dada anteriormente. Es una imagen transversal de todo el tubo en dirección longitudinal:

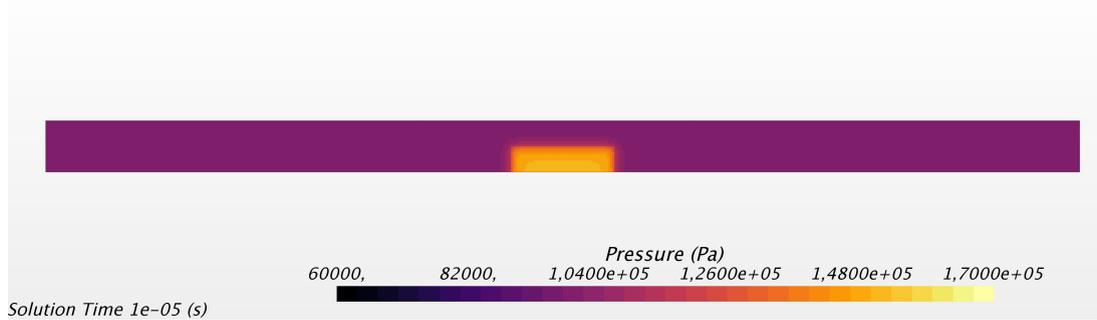


Figura 4.23: Imagen transversal para instante $1 \cdot 10^{-5} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)

Evolución temporal del problema inicial en la simulación numérica

Se simularon los primeros $250 \mu s$ del problema mediante el empleo de un software comercial, de los cuales se han tomado distintos contornos de presión con tal de poder compararlos con los resultados obtenidos mediante el simulador numérico. Se han seleccionado 5 instantes temporales particulares, por el hecho de que se han considerado como bastante representativos para entender qué es lo que está sucediendo con respecto al fenómeno físico. Los resultados aquí representados corresponden a los del simulador numérico empleando un integrador temporal tipo Euler y un discretizador espacial upwind, con un CFL de 0.02. En todos los experimentos desarrollados en la sección de validación radial en cilíndricas se usaron 100 divisiones en la dirección longitudinal, 10 en la radial y 4 en la azimutal (no hay ningún fenómeno azimutal en este caso, por lo que se optó por minimizar el coste). Además, en el anexo se han añadido los contornos de presión obtenidos mediante el software comercial con tal de poder compararlos fácilmente:

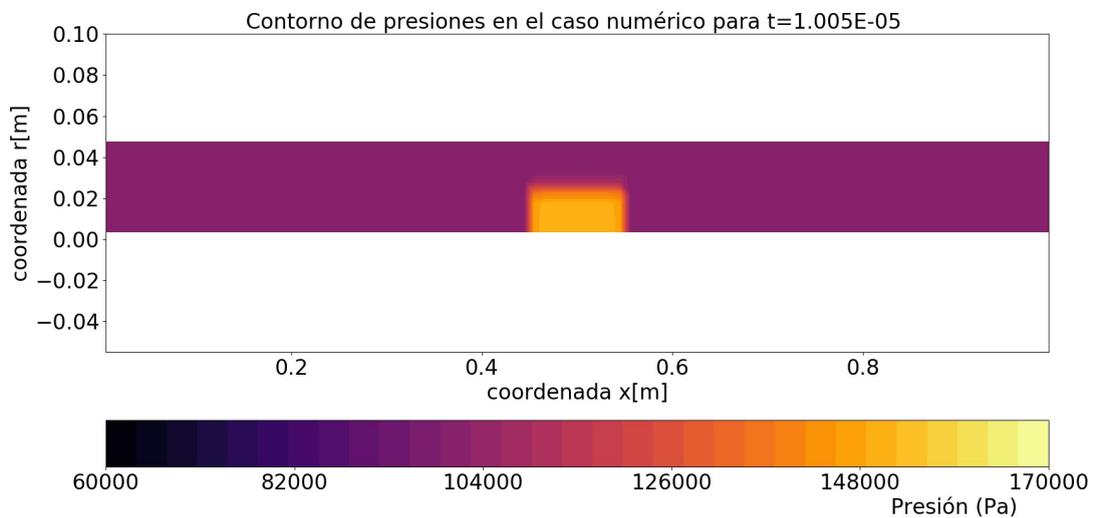


Figura 4.24: Imagen transversal para instante $1 \cdot 10^{-5} s$ de la mitad superior del cilindro (4.23)

En el primer instante, se puede observar como todavía no se habían generado apenas ondas de presión por lo que el cilindro inicial seguía prácticamente intacto. Había una cierta propagación en la dirección radial pero de momento era meramente testimonial.

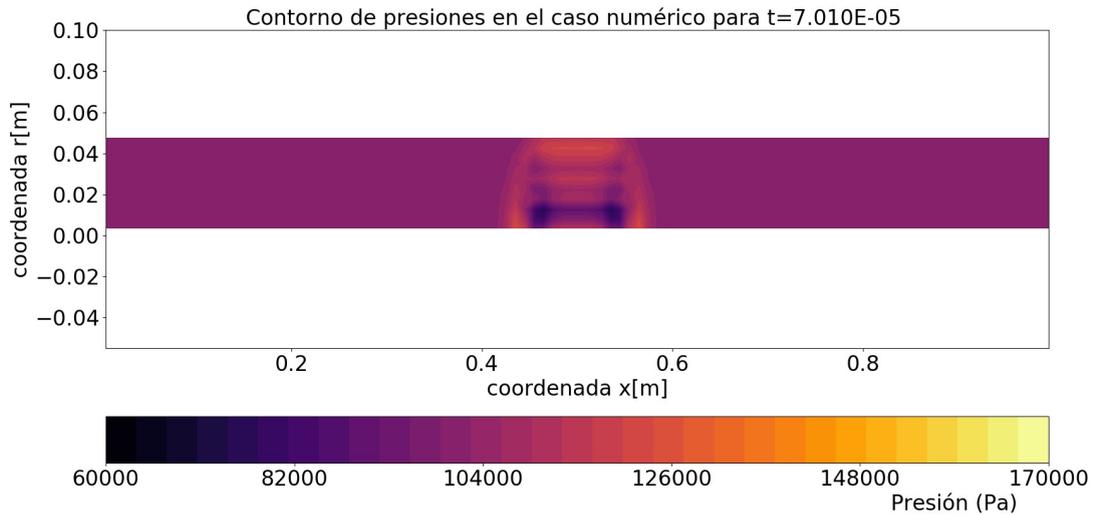


Figura 4.25: Imagen transversal para instante $7 \cdot 10^{-5} s$ de la mitad superior del cilindro (6.24)

La diferencia de presiones inicial existente entre el cilindro interno y el externo empezaba a verse claramente difuminada por un frente de presión que se transmitía desde el cilindro interno hasta las proximidades del mismo, tratando de equilibrar ambas presiones. Se puede observar como se generaron varias ondas de presión debido a la súbita variación de esta variable que se puede apreciar en varios puntos del dominio de forma consecutiva, marcado los límites de este fenómeno de transporte. Este transitorio generado por la diferencia de presiones originó que en el interior del cilindro se produjera una sobreoscilación negativa que disminuyó la presión incluso por debajo del valor medio del cilindro externo.

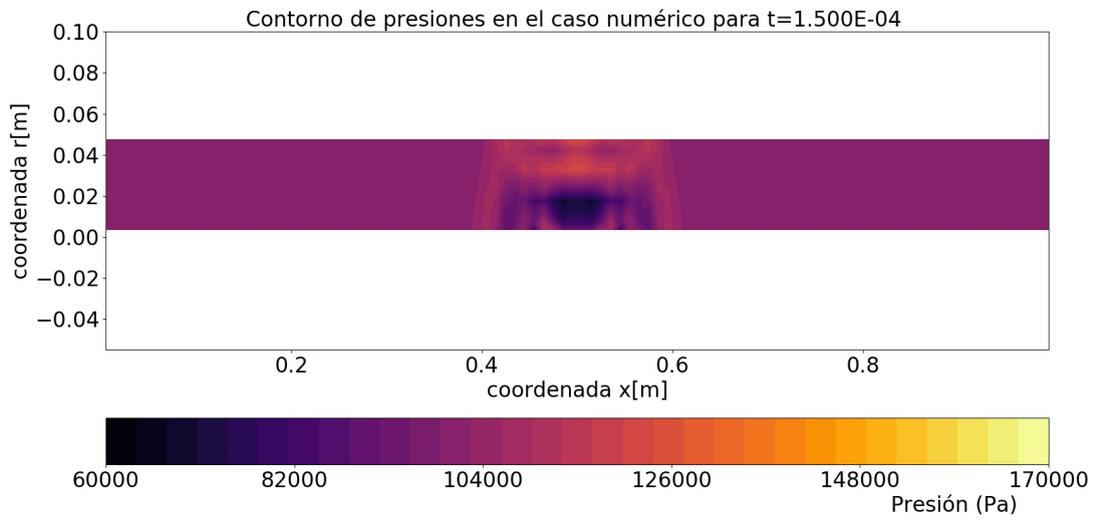


Figura 4.26: Imagen transversal para instante $1.5 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (6.25)

En este caso, la zona de perturbación seguía avanzando mientras que el cilindro original se acababa de desdibujar, juntando los dos polos con menor presión del dominio en un único punto.

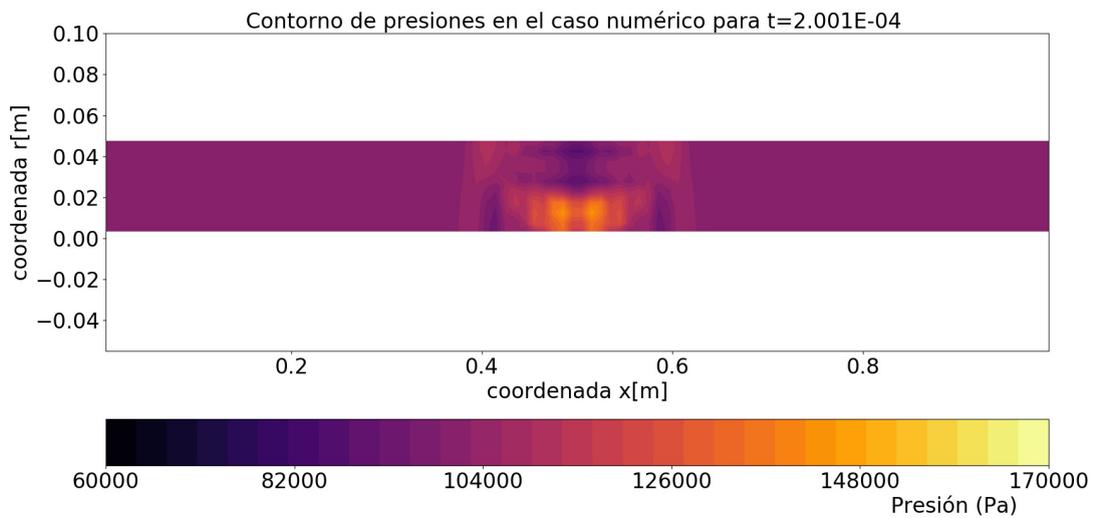


Figura 4.27: Imagen transversal para instante $2 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (6.26)

Una vez el tiempo transcurrido ya comenzaba a ser importante, se puede observar como el frente de ondas generado ya se volvió prácticamente plano, pero ocurrió un fenómeno muy curioso. La zona de depresión generada en el interior era tan grande que una parte de esta volvió hacia su

zona original, con tal de hallar el ansiado equilibrio de presiones.

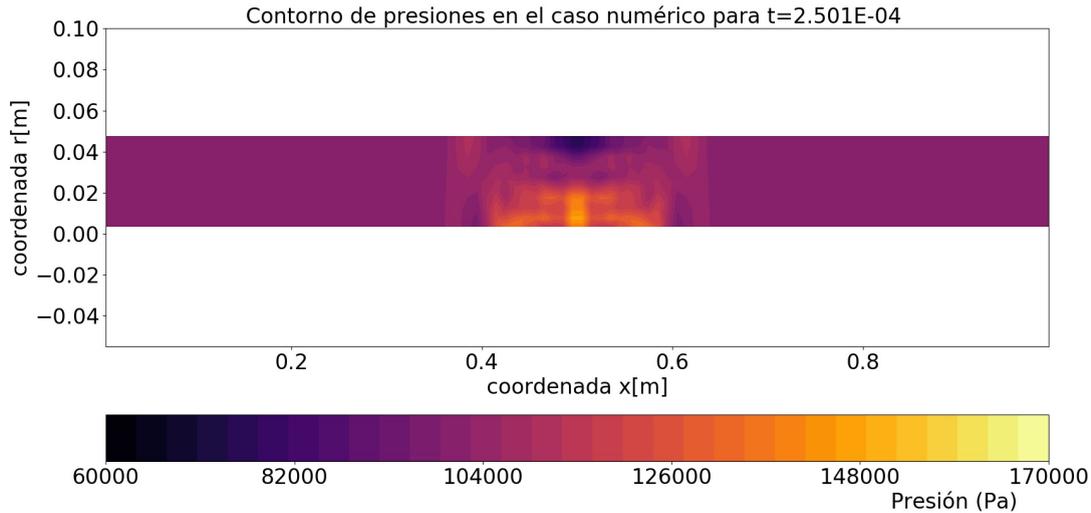


Figura 4.28: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (6.27)

Finalmente, ya se puede observar como el frente de presiones prácticamente desapareció y se estaba a punto de alcanzar el equilibrio de presiones. Si se hubiera simulado algún instante temporal posterior, se podría haber observado como esta sobrepresión remanente en la zona central se iba diluyendo conforme pasaba el tiempo sin generar ningún frente de presión nuevo que volviera hacia el interior, alcanzando plenamente el equilibrio.

El análisis de un fenómeno de estas características no fue casualidad, si se piensa detenidamente se puede ver como es un fenómeno de transporte bastante común en la naturaleza. Un ejemplo podría ser el movimiento que se genera en un estanque a la hora de lanzar una piedra en el mismo: en el primer instante en el que la piedra toca el agua, se genera una zona de depresión descendente debido a la acción de la roca rodeada por una sobreoscilación positiva del agua, cuando la roca penetra dentro del agua, el agua tiende a recuperar el espacio perdido debido a la acción de la roca, creando una columna vertical que sale de la misma. Sin embargo, el ejemplo más relevante para la aplicación que se está tratando en este trabajo podría ser el de las ondas presión que se generan dentro de la cámara de combustión de un MCI debido al movimiento del pistón: estas ondas avanzan y se reflejan en la pared por diversos motivos durante el ciclo por lo que este modelo puede permitir representarlas de forma más fidedigna.

Una vez analizado el fenómeno, se consideraron todos aquellos aspectos descubiertos para el caso 1D con tal de ver si los resultados obtenidos mediante estas modificaciones mejoraban los contornos de presión calculados usando el integrador temporal Euler, el discretizador espacial upwind y sin emplear ningún limitador de flujo. En todos los casos, se compararon los resultados obtenidos para el instante temporal $2.5 \cdot 10^{-4} s$.

Análisis uso del Rk4 sin limitador de flujo

Se realizaron una serie de experimentos empleando un método Runge-Kutta explícito de 4 pasos como integrador temporal, utilizando como discretizador espacial el método upwind. Se analizaron en este caso 3 pasos temporales distintos con tal de observar si las tendencias observadas en el caso 1D se seguían manteniendo para este caso.

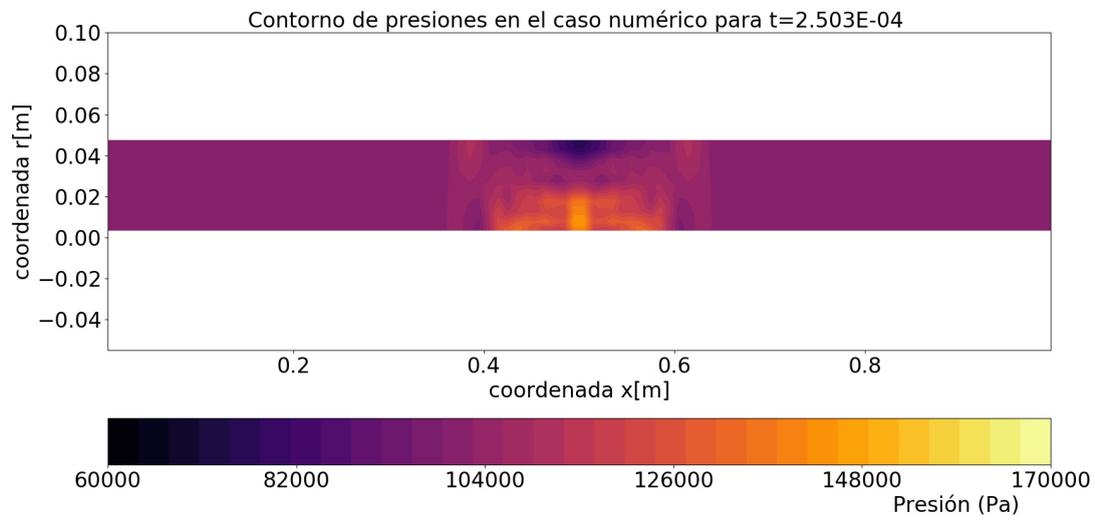


Figura 4.29: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 0.1

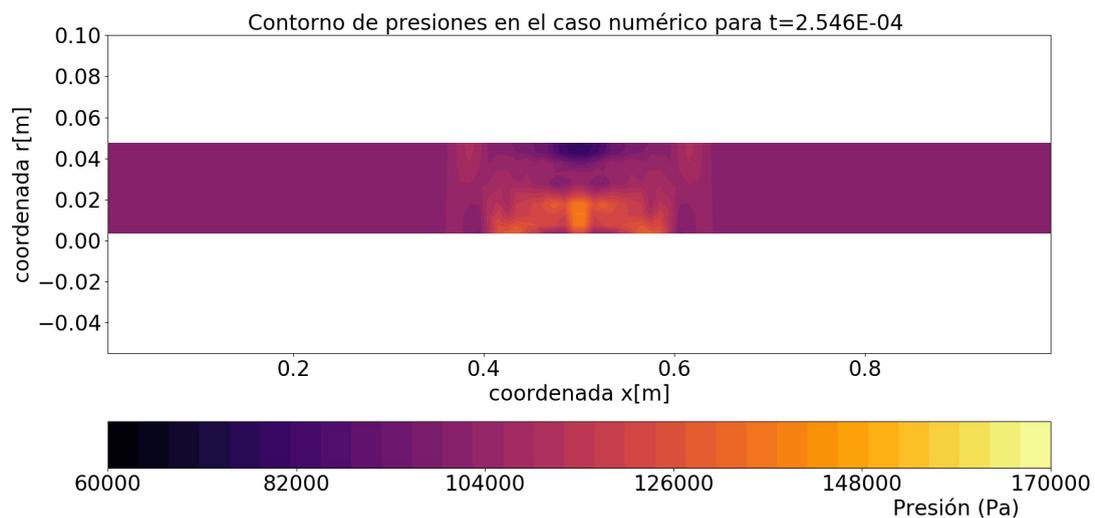


Figura 4.30: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 1

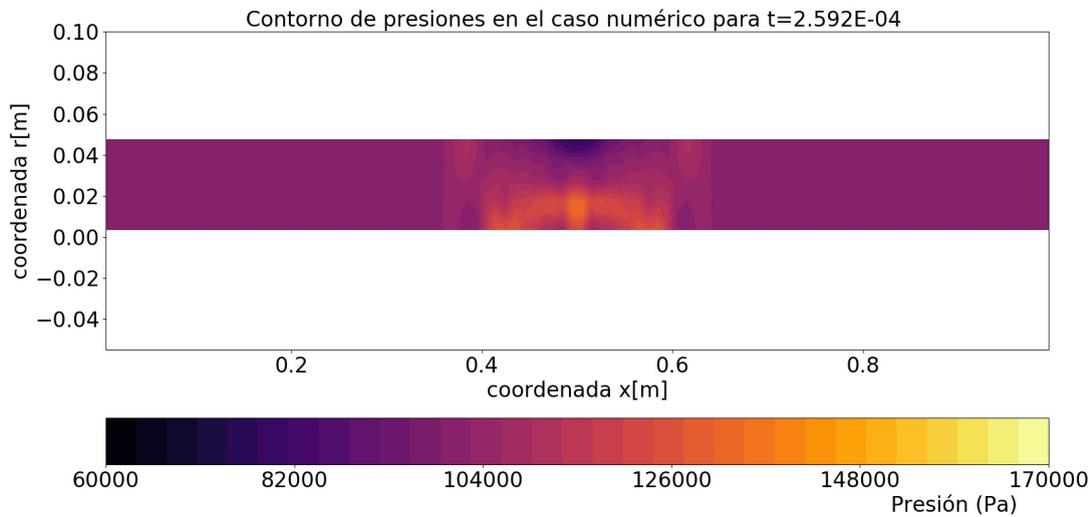


Figura 4.31: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 2.2

En primer lugar, se puede ver como todas las imágenes están bastante difuminadas independientemente del paso temporal seleccionado, por lo que se puede deducir que los resultados fueron bastante difusivos por el método upwind seleccionado. A pesar de esto, se puede ver como en la zona central sigue habiendo ciertos saltos de temperatura en zonas contiguas contenidas en esta región. Esto se puede deber seguramente al hecho de que el esquema tiene sobreoscilaciones por definición, lo que propicia estas súbitas variaciones de la variable de interés. Además, se puede observar como al aumentar el paso temporal, parece que empiece a generarse dentro de la zona central una pequeña región arqueada donde la presión tiende a asemejarse a aquella del cilindro externo (Figura 4.31), mientras que los resultados empiezan a alejarse de los obtenidos en el caso analítico. Por lo tanto, se puede deducir que las sobreoscilaciones siguen estando presentes cuando no se emplea un limitador de flujo, tal y como sucedía en el caso 1D, y la solución empeora a medida que aumenta el paso temporal.

Además, es bastante destacable el hecho de que se pudo aumentar el paso temporal para todos los experimentos hasta unos límites mucho mayores que los considerados en el tubo de Sod, llegando incluso a números de Courant cercanos a 3. Este hecho se produjo también en el resto de experimentos numéricos realizados para la configuración de prueba radial. Seguramente, esto se deba a que el salto de presiones impuesto entre el cilindro interno y el externo tenía un ratio de 1.5, por lo que las velocidades generadas en el seno del dominio fluido fueron mucho menores, esto permitió que la restricción de estabilidad del paso temporal se relajara también y por lo tanto se pudiera emplear estos CFL mucho más agresivos. Aún así, es muy interesante comentar también lo que sucedió cuando se sobrepasó el límite estable de este paso temporal, hecho que se puede observar en Figura 6.28. En este contorno, se puede ver como se suceden una serie de líneas cruzadas, tanto de izquierda a derecha como viceversa, que generan un empeoramiento

ostensible de la solución. Esto se debe a que al aumentar el paso temporal por encima del límite admisible, la solución se volvió claramente dispersiva y el entramado de líneas que lo evidenciaba empezó a aparecer.

MDT upwind vs MDT k-scheme

Se realizaron también una serie de experimentos con la finalidad de comprobar si después de aplicar un limitador de flujo, como es el caso del MDT, se seguía obteniendo una mejora de la solución tal y como se había observado en el experimento 1D al pasar de un esquema de tipo upwind a un k-scheme.

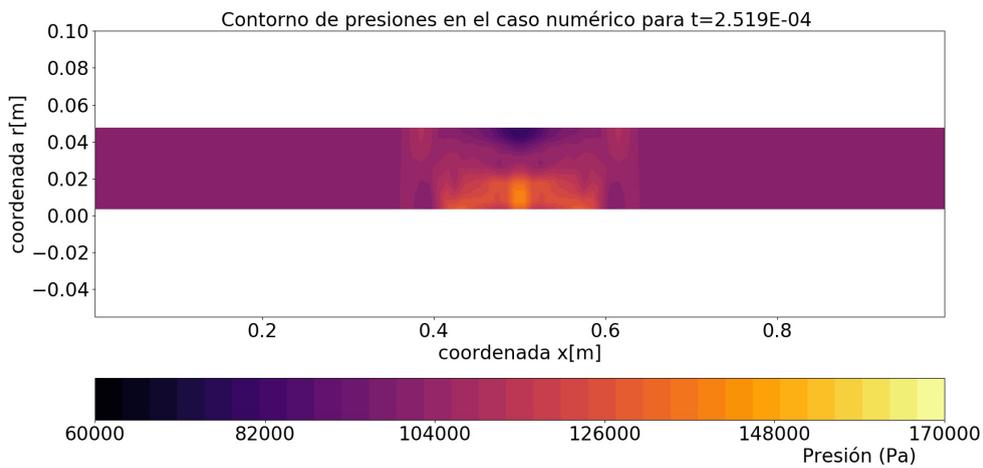


Figura 4.32: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 0.5 usando un k-scheme

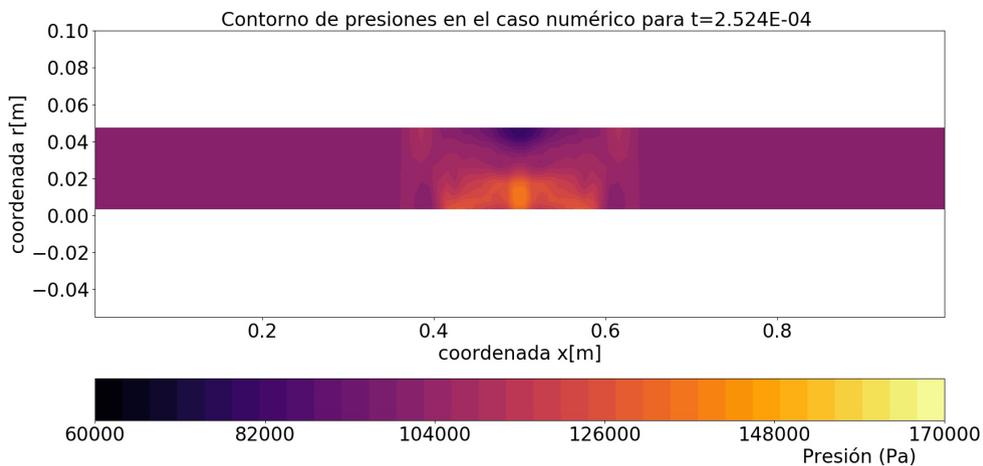


Figura 4.33: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 0.5 usando upwind

A juzgar por lo visto en Figura 4.32 y Figura 4.33, no se puede ver que haya una ventaja significativa al emplear un k-scheme respecto del upwind. Esto se debe seguramente a que el salto de presiones usado entre el cilindro interno y la región externa era relativamente pequeño con respecto al empleado en el tubo de Sod, por lo que al no haber grandes discontinuidades puede que tampoco se obtuviera una ganancia tan significativa como en el caso de la temperatura en el problema de validación 1D. Además, ya se había visto en ese problema que esta ganancia era mucho más marginal en otras magnitudes donde estos grandes saltos en la membrana de discontinuidad no existían, como por ejemplo la velocidad o la presión.

A pesar de esto, sí que se observa como en el caso del k-scheme se produce un ligero aumento de la temperatura en la zona central con respecto del caso upwind, por lo que se puede decir que se sigue produciendo una ligera mejora de los resultados obtenidos respecto del caso de validación de referencia.

FCT

Finalmente, se comprobó cuales eran los resultados de aplicar el método FCT para reducir las sobreoscilaciones, y si las conclusiones que se podían alcanzar eran las mismas que las expuestas en el caso 1D. Para comprobar esto, se emplearon dos coeficientes de difusión diferentes (0.5,0.7) los cuales se comprobaron para 4 números de Courant distintos (0.5,1,1.5,2.5).

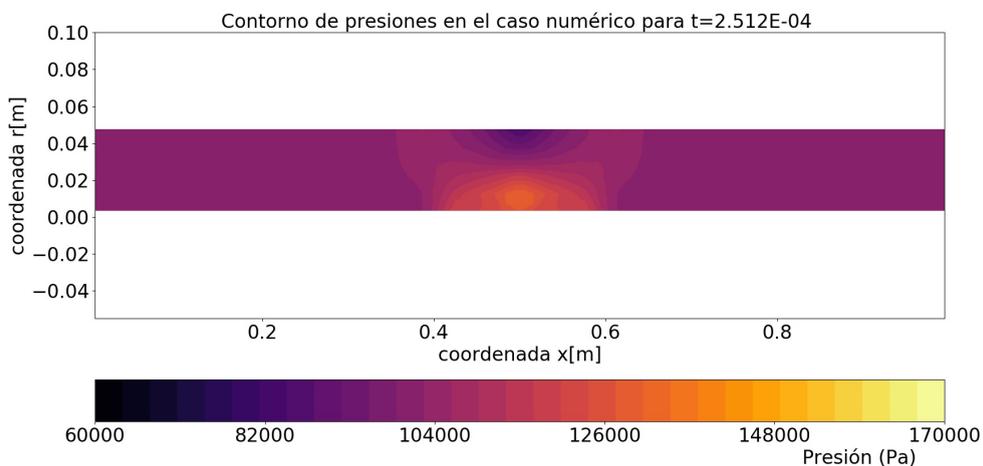


Figura 4.34: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 1.5 usando FCT($\vartheta=0.5$)

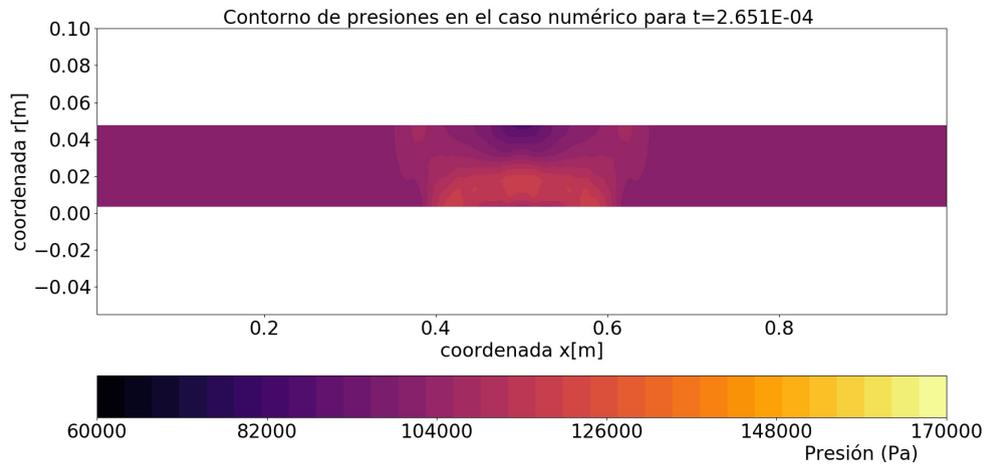


Figura 4.35: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con un CFL de 2.5 usando FCT($\vartheta=0.5$)

Ambos casos se obtuvieron con un discretizador espacial k-scheme y un integrador temporal Runge-Kutta. Como se puede observar, la difusión obtenida en todos los casos comprobados fue superlativa, ya que prácticamente no se puede distinguir ninguna forma o tendencia particular en la zona central inferior. Obviamente, estos resultados empeoraban si se aumentaba el coeficiente de difusión, por lo que no se pudo llegar a aplicar el rango de coeficientes obtenidos para el caso 1D. Esto está en consonancia con lo mencionado anteriormente, ya que evidencia que el salto de presiones era bastante pequeño y por lo tanto no requería de una técnica tan agresiva para suprimir las sobreoscilaciones como esta. Además, se puede ver como los resultados mejoraron ligeramente al aumentar el paso temporal, ya que la difusión se veía compensada parcialmente por el aumento del paso temporal.

Capítulo 5

Conclusiones

La principal contribución de este trabajo ha sido implementar dos herramientas numéricas completamente funcionales mediante las cuales se puede resolver las ecuaciones de Euler en 3D de forma numérica tanto para coordenadas cartesianas como cilíndricas, pudiendo elegir entre varios tipos de integradores temporales (Euler o Runge-Kutta) o discretizadores espaciales (k-scheme o upwind). A lo largo del trabajo, se han realizado una serie de hallazgos que merece la pena destacar con tal de tenerlos en cuenta a la hora de utilizar este tipo de códigos en futuros proyectos:

- Siempre que se utilicen esquemas de discretización espacial lineales de orden mayor que uno, se van a generar oscilaciones en la solución calculada, ya que no se puede asegurar que esta sea monotónica dentro del dominio de cálculo. Si las discontinuidades en las variables de interés son demasiado grandes, estas sobreoscilaciones pueden no ser sostenibles, haciendo que sea necesario emplear un limitador de flujo que trate de eliminarlas en aquellas zonas donde surgen, mientras se preserva la precisión del cálculo en el resto.
- El orden del integrador temporal puede ser muy relevante a la hora de obtener el error en los resultados de las variables de interés, tanto para los integradores temporales explícitos como en los implícitos. En la mayoría de resultados se ha observado como al aumentar el paso temporal, el error obtenido aumentaba también, lo cual es esperable. Sin embargo, se debe de tener en cuenta que cuando las diferencias de escalas temporales dentro del seno del fluido son importantes, el problema se puede volver bastante rígido dependiendo del CFL usado, por lo que la evolución del error cuando aumenta el paso temporal puede ser más inestable.
- El orden del discretizador espacial puede llegar a ser muy relevante a la hora de calcular el error acumulado. Al emplear un esquema de alto orden (k-scheme), se pueden llegar a producir oscilaciones realmente relevantes que hacen necesarios estos limitadores de flujo.
- El limitador de flujo MDT ha resultado ser un método bastante efectivo a la hora de

amortiguar en gran medida las oscilaciones al emplear el discretizador espacial k-scheme, aunque no se ha producido una supresión completa de las mismas. Usar este discretizador junto al MDT ha demostrado ser la forma más precisa para tratar de reproducir los grandes saltos de variables que se puedan generar en el dominio fluido, reduciendo al máximo el error generado. Sin embargo, este discretizador espacial no ha conseguido sacar a relucir su ventaja en aquellas variables donde estos saltos no están presentes.

- El limitador de flujo FCT ha resultado ser la forma más contundente de reducir las oscilaciones por completo, consiguiendo de esta forma un esquema prácticamente monotónico. El problema es que este sistema de postprocesado es tan difusivo, que suaviza excesivamente la solución. Esta difusión se puede compensar parcialmente si se emplea un paso temporal realmente agresivo. Por lo que respecta a los valores óptimos del coeficiente de difusión (ϑ) contra el paso temporal (CFL), se ha visto que están íntimamente relacionados con el problema que se está resolviendo, así como el número de elementos empleados, por lo que es difícil extraer una conclusión general sobre estos valores. Simplemente, se puede tomar como cierto el hecho de que el coeficiente de difusión debe ser mayor que 0.5.
- Los integradores temporales implícitos pueden ofrecer grandes ganancias en cuanto el paso temporal que se puede utilizar (A-estables), pero al mismo tiempo son bastante complicados de implementar.
- Por lo que respecta al programa en coordenadas cilíndricas, se ha visto que las hipótesis tomadas para este programa (asumir que no había flujo en la dirección radial cerca de la singularidad, la modificación de la fórmula de la reconstrucción de la velocidad en el centroide...) son bastante acertadas según el problema que se está considerando en este caso. Algunos hallazgos del caso 1D, como por ejemplo la mejora del k-scheme respecto del upwind, se siguen manteniendo, pero todavía hay muchas incógnitas en cuanto al comportamiento de los limitadores de flujo (FCT y MDT) en este caso.

5.1. Sugerencias como trabajos futuros

A pesar de que el trabajo realizado a lo largo de esta tesis ha sido numeroso, siguen quedando muchas incógnitas de las cuales merecería ocuparse en futuros proyectos:

- Sería interesante en primer lugar poder implementar condiciones de contorno de distintos tipos (anecoicas, pulsos de presión...) que permitieran una mayor versatilidad a la hora de poder reproducir los fenómenos que suceden en el interior de un MCIA.
- Habría que implementar también la conexión del código desarrollado con otros esquemas 1D ya hechos con tal de optimizar los recursos empleados en el cálculo, tal y como se hizo en [5]. Estaría bien probar con dos celdas limítrofes entre los dos códigos en lugar de solamente una, con la finalidad de poder emplear el k-scheme también ahí.

- Se podría comprobar el planteamiento y la implementación del integrador temporal implícito con tal de hallar el error que impide su puesta en funcionamiento.
- Sería aconsejable realizar un estudio empleando el código en cilíndricas mediante el cual fuera posible realizar la unión entre distintos conductos, pudiendo elegir cuantos se desean usar y en qué ángulo se deben unir.
- Habría que elaborar pruebas con el código en cilíndricas con tal de poder comprobar si los resultados de un fenómeno que tenga la dirección azimutal como su principal eje de transmisión se ven fielmente representados mediante este planteamiento.

Capítulo 6

Anexo

Rk4 vs Euler- sin difusión - Upwind de primer orden

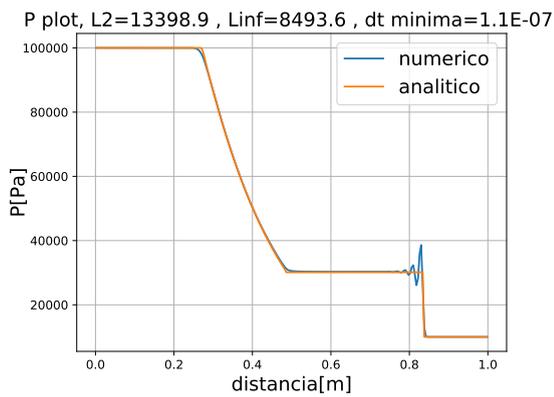


Figura 6.1: Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$

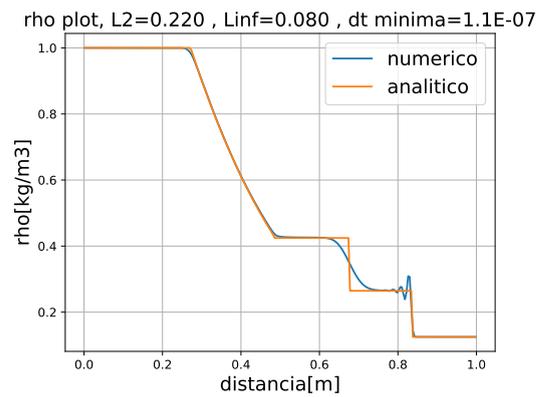


Figura 6.2: Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$

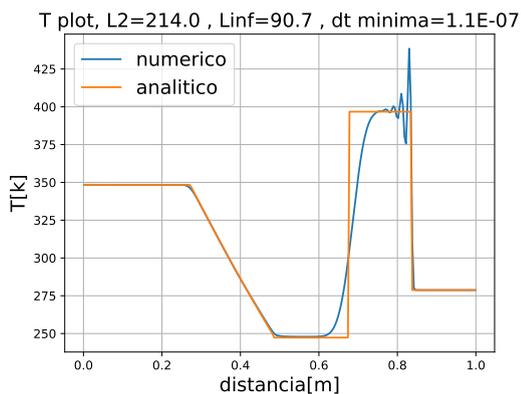


Figura 6.3: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$

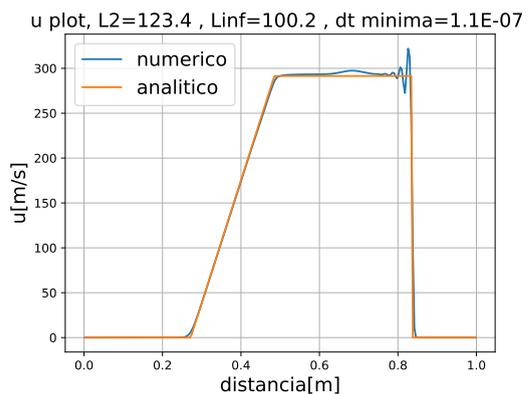


Figura 6.4: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.02-Rk4-upwind) para $N_X = 250$

Euler vs Rk4 usando MDT

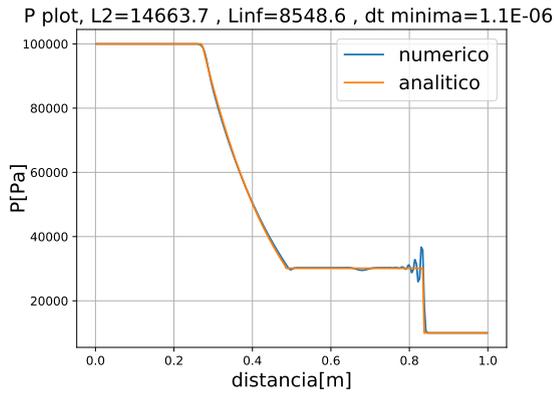


Figura 6.5: Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$

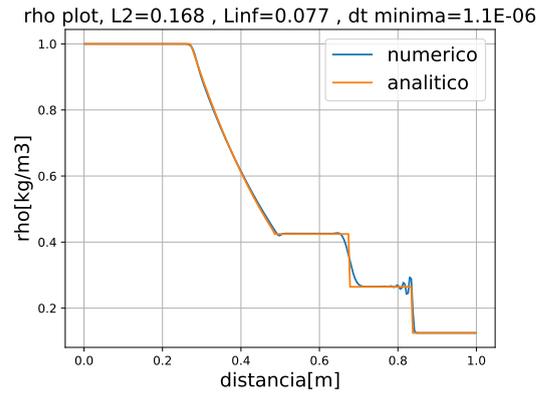


Figura 6.6: Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$

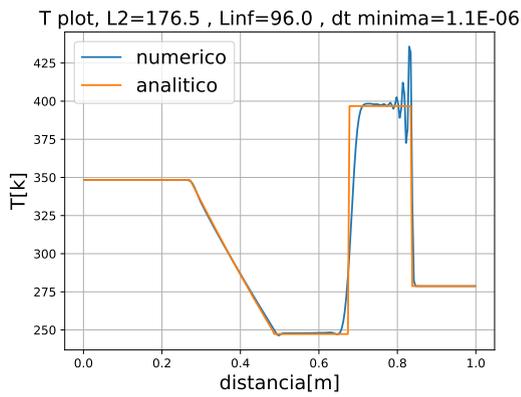


Figura 6.7: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$

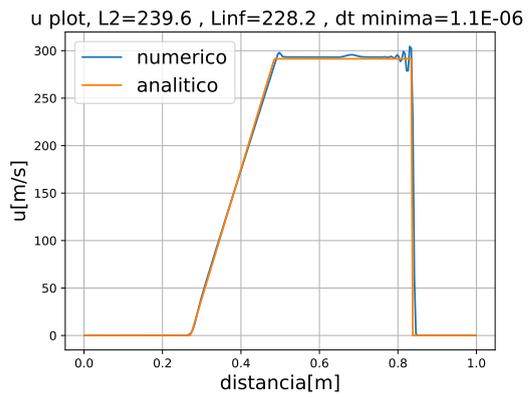


Figura 6.8: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.2-Euler-k-scheme) para $N_X = 250$

Upwind vs k-scheme aplicando MDT

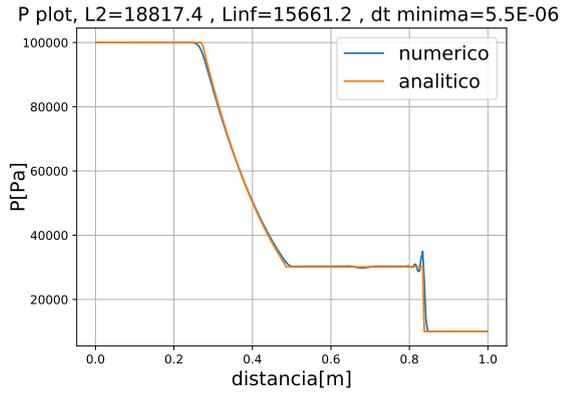


Figura 6.9: Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$

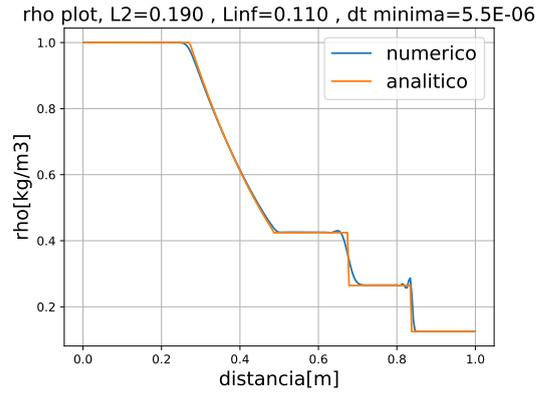


Figura 6.10: Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$

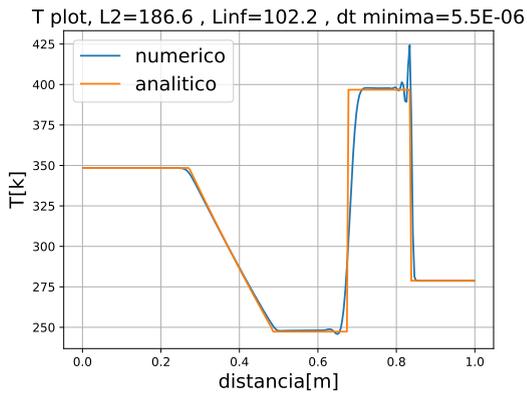


Figura 6.11: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$

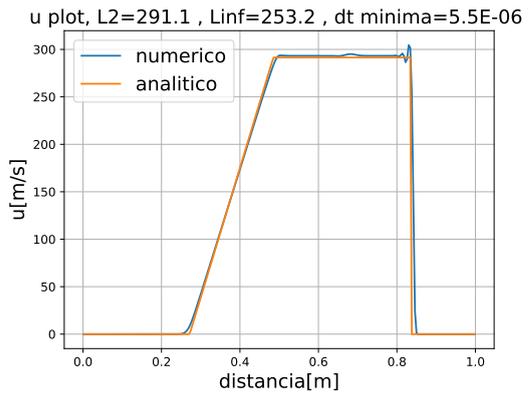


Figura 6.12: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=1-Rk4-k-scheme) para $N_X = 250$

Estudio paramétrico del CFL vs ϑ mediante el método FCT

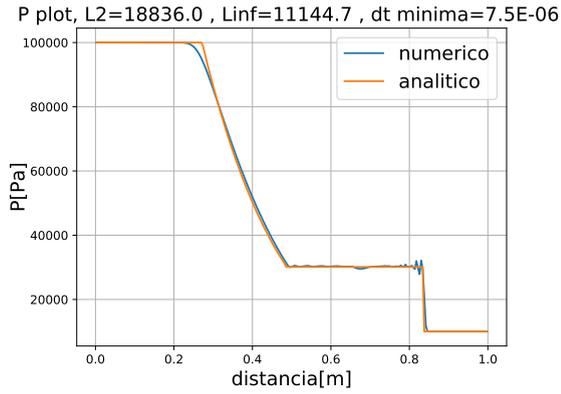


Figura 6.13: Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$

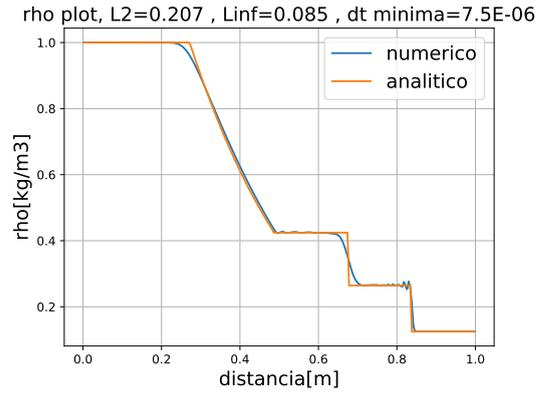


Figura 6.14: Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$

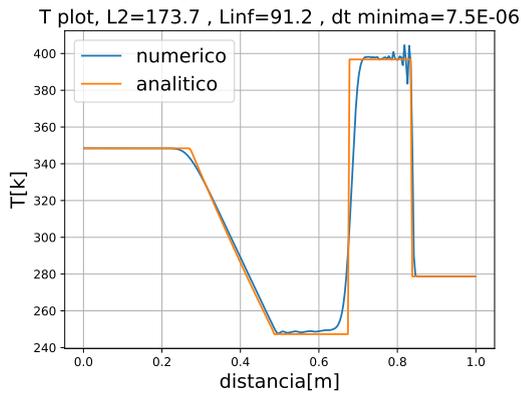


Figura 6.15: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$

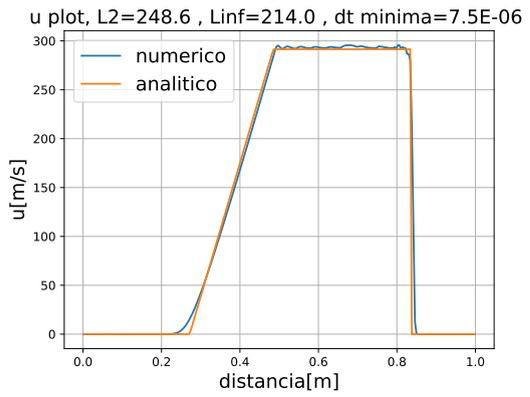


Figura 6.16: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT(0.7)) para $N_X = 250$

Evolución temporal de la solución con FCT para T y un $\vartheta=0.7$

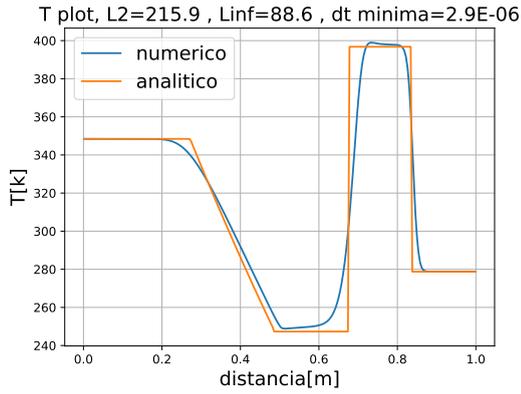


Figura 6.17: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.5-Rk4-ksch-FCT) para $N_X = 250$

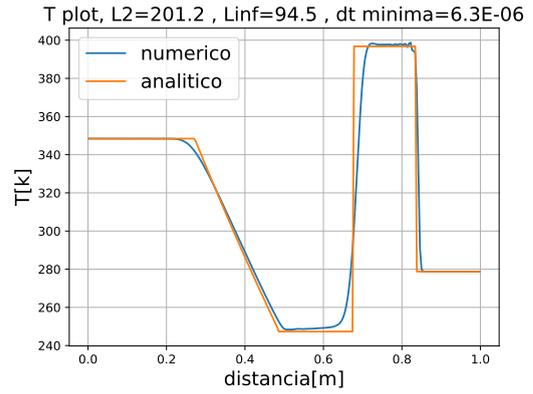


Figura 6.18: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.1-Rk4-ksch-FCT) para $N_X = 250$

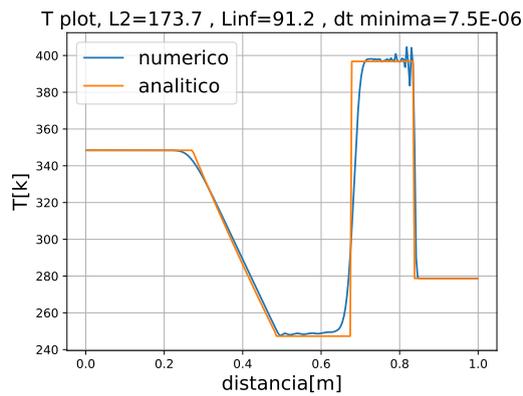


Figura 6.19: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=1.4-Rk4-ksch-FCT) para $N_X = 250$

Validación cilíndricas- Experimento 1

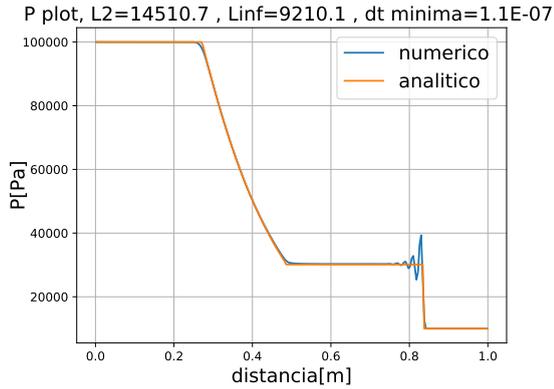


Figura 6.20: Perfil de P a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas

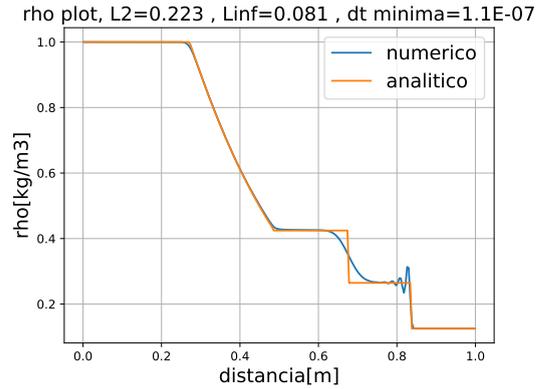


Figura 6.21: Perfil de ρ a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas

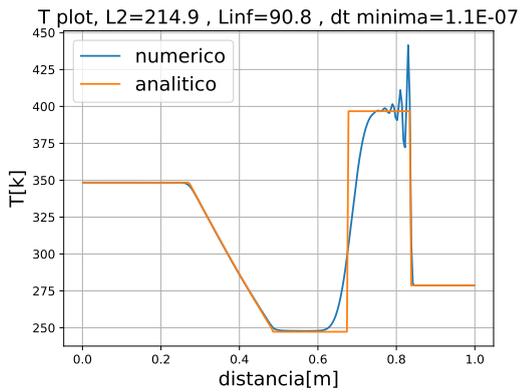


Figura 6.22: Perfil de T a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas

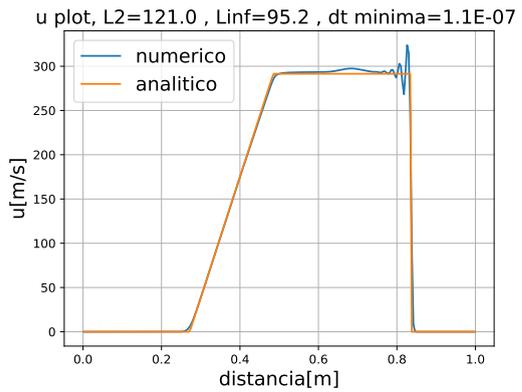


Figura 6.23: Perfil de u a lo largo del conducto (CFL=0.02-Euler-upwind) para $N_X = 250$ en cilíndricas

Evolución temporal el caso radial obtenido mediante software comercial por el tutor del proyecto

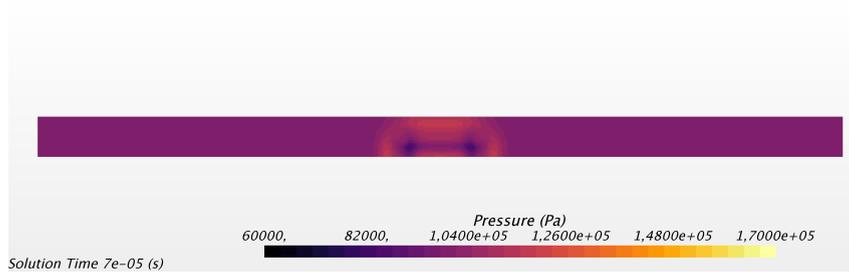


Figura 6.24: Imagen transversal para instante $7 \cdot 10^{-5} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)

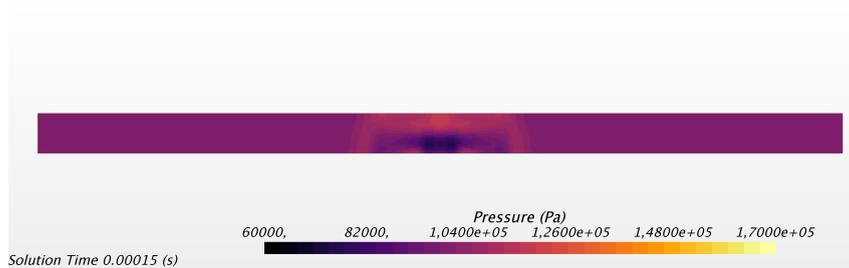


Figura 6.25: Imagen transversal para instante $1.5 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)

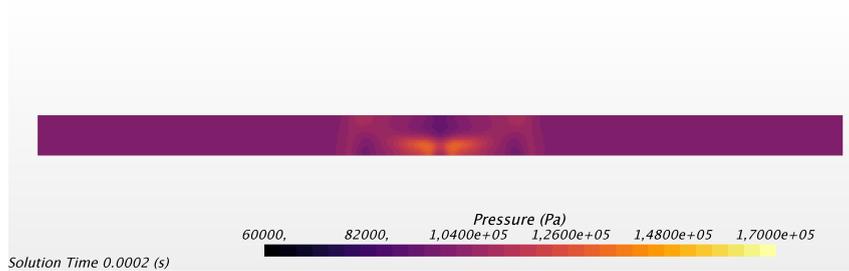


Figura 6.26: Imagen transversal para instante $2 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)

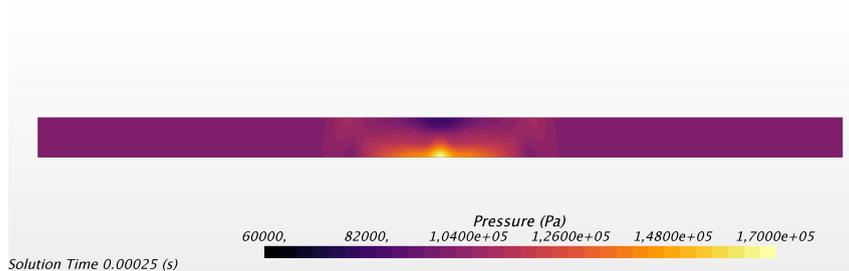


Figura 6.27: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ de la mitad superior del cilindro (STAR)

Resultado experimento radial Rk4 sin limitador de flujo

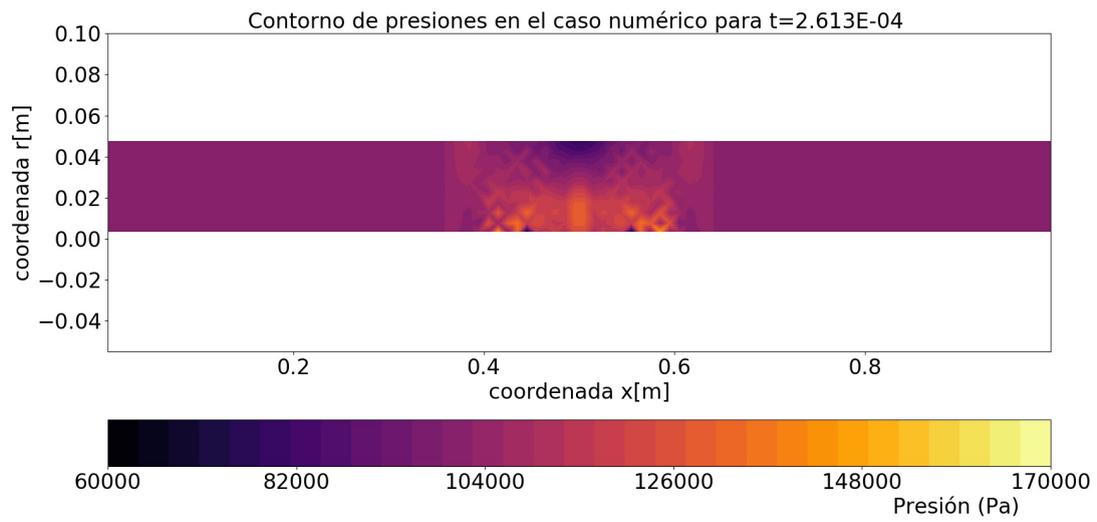


Figura 6.28: Imagen transversal para instante $2.5 \cdot 10^{-4} s$ con Rk4 y un CFL de 3

Capítulo 7

Anexo 2

En este segundo Anexo se ha descrito el presupuesto calculado con tal de que una empresa cualquiera que se esté planteando hacer un proyecto como el presentado en esta tesis final de máster pueda saber aproximadamente cual sería el precio de venta que podría pedir en el mercado actualmente. Además, se ha realizado un estudio del impacto ambiental que este proyecto ha podido tener, ya que esta clase de consideraciones son muy pertinentes en los tiempos actuales debido al nivel de compromiso de la sociedad con esta clase de temas, e incluso un gran número de gobiernos en todo el mundo lo están incluyendo como uno de los criterios a la hora de financiar un proyecto.

7.1. Presupuesto económico

El presupuesto elaborado es un esbozo básico desde el punto de vista de la empresa para saber más o menos cuales serían los costes que se derivarían de las actividades económicas, los posibles beneficios a obtener, así como el precio final del producto de cara a poder lanzarlo al mercado. Aún así, cabe destacar que se han tomado un gran número de simplificaciones, ya que se han excluido impuestos complejos de calcular como el impuesto sobre actividades económicas, o también impuestos locales, de medio ambiente, especiales...

Coste de mano de obra

Es el coste que proviene directamente de las horas trabajadas por los ingenieros en el proyecto. En este caso, los profesionales implicados han sido un becario y dos ingenieros con doctorado. Según los datos aportados por la Seguridad Social, un ingeniero titulado cotizó en el año 2019 entre 1466.10 €/mes y 4070.10 €/mes. Se puede suponer para los cálculos que los dos ingenieros que han tutorizado este trabajo cobran un 90 % del salario máximo, mientras que el becario cobra un 40 % de este salario máximo. De esta forma, teniendo en cuenta que al año hay 14 pagas, se puede estimar que los costes anuales de estos dos tipos de ingenieros son:

Coste Ingeniero Senior	
Total salario bruto (14 pagas)	51283 €
Fondo desempleo (5.5 %)	2821 €
Seguridad Social (23.6 %)	12103 €
FOGASA (0.2 %)	103 €
Formación Profesional (0.6 %)	308 €
Final	66617 €

Coste Ingeniero Becario	
Total salario bruto (14 pagas)	22793 €
Fondo desempleo (5.5 %)	1254 €
Seguridad Social (23.6 %)	5379 €
FOGASA (0.2 %)	46 €
Formación Profesional (0.6 %)	137 €
Final	29608 €

Este es el coste anual que supondría contratar a un ingeniero con esa cualificación en cada uno de los casos. Ahora, es necesario hacer una estimación de las horas trabajadas en un año natural, ya que si se consigue un coste por hora trabajada se puede hacer una estimación de cuanto costaría el trabajo total de cada uno de los integrantes según el tiempo invertido en el trabajo. Así pues, se puede deducir que en un mes natural hay unos 22 días laborales, que multiplicados por el número de meses y una jornada laboral de 8 h al día conducen a un total de horas trabajadas al año de 2112 h. Si se divide el coste total anual de un ingeniero senior por el número de horas trabajadas, se obtiene fácilmente que el coste asciende a unos 31.54 €/h. Para el caso del becario, este coste por hora se reduce a 14.02€/h.

A continuación, es necesario estimar cuantas horas le ha dedicado cada uno de los integrantes del equipo al proyecto. El ingeniero becario ha dedicado una jornada laboral de 8 horas al día, durante 5 días a la semana. Sabiendo que el contrato duraba 5 meses se puede obtener por una simple multiplicación el número de horas totales teniendo en cuenta que entre principios de febrero y finales de junio hay 22 semanas. Para el caso de los ingenieros senior, el tutor del proyecto le ha dedicado unas 3h a la semana, mientras que el director simplemente hizo una introducción inicial de unas 3h. De esta forma, se puede obtener que el coste real de las horas trabajadas es:

Ingeniero	Horas	Coste/h	Total Coste
Becario	880	14.02 €/h	12336 €
Tutor	66	31.54 €/h	2082 €
Director	3	31.54 €/h	95 €
-	-	TOTAL	14513 €

Amortización del coste de los equipos

En esta sección se describen los costes relacionados con productos en los que inicialmente se hace una inversión con la esperanza de poder recuperar el dinero al finalizar el proyecto en cuestión, ya sea porque se espera que su rendimiento empeore con el paso del tiempo o simplemente porque sean programas de carácter informático y su licencia expire. En este caso, la mayoría del TFM se ha desarrollado mediante Anaconda, que es una plataforma de software libre que soporta tanto Python como R, por lo que no ha habido ningún coste de licencias por esta parte. Sin embargo, sí que ha sido necesario emplear un portátil propio y se ha usado un software de pago para el

cálculo de las derivadas (Mathematica). De esta forma, el coste por amortización es el siguiente:

Concepto	Precio	Tiempo útil	Amortización	Coste Amortización
Portátil	1000	54 meses	5 meses	92.6 €
Licencia Mathematica	222	12 meses	5 meses	92.5 €
-	-	-	TOTAL	185.1 €

Material fungible

En este apartado se incluyen todos aquellos elementos que son necesarios para realizar el proyecto pero que no se pueden amortizar, como material de oficina o la electricidad. Por lo que respecta al material de oficina, se han contado como necesarios una silla (70 €), una mesa (100 €), una libreta (2 €) y un boli (1 €). En lo relativo a la electricidad, un ordenador medio consume unos 190 W , sabiendo que el precio fijo de la electricidad está entorno a 0.12 €/kWh. Simplemente hay que hallar el número de kWh consumidos sabiendo que se han trabajado unas 880 h (unos 167.2 kWh), que multiplicados por el precio del kWh dan lugar a un coste de 20 €. Así pues, el coste del material fungible asciende a:

Concepto	Coste
Material Oficina	173 €
Electricidad	20 €
TOTAL	193 €

Presupuesto Final

Finalmente, se puede estimar el precio definitivo de venta en el mercado a partir de los impuestos que faltan sobre el coste y los beneficios. Simplemente destacar que la fórmula del beneficio se obtiene como $\frac{\text{Ingresos}-\text{coste}}{\text{Ingresos}} = 7,5\%$ Así pues, se puede obtener que:

Presupuesto Final	
Coste Mano Obra	14513 €
Coste Amortización	185 €
Coste Fungible	193 €
SUBTOTAL	14891 €
Beneficio (7.5 % de los costes totales)	1207 €
Impuesto de sociedades (25 % sobre el beneficio)	302 €
Costes indirectos (30 % del subtotal)	4467 €
IVA (21 % menos material fungible)	3405 €
TOTAL	24273 €

De esta forma, se ha calculado que el precio final necesario para poder vender este producto y asegurar un margen de beneficio desde el punto de vista de una empresa es de #VEINTICUATRO MIL DOSCIENTOS SETENTA Y TRES EUROS

7.2. Huella de carbono

El cálculo del impacto medioambiental es un parámetro muy importante a la hora de elegir la viabilidad de un proyecto, por lo que conviene hacer una estimación de la cantidad de CO_2 generada. En este apartado se han incluido todas las actividades relacionadas con una jornada laboral normal: desde el desplazamiento al lugar de trabajo hasta la electricidad consumida, con tal de analizar qué actividades podían ser contaminantes.

Para elaborar esta estimación, se ha decidido seguir las directrices impuestas por el Ministerio de Transición Ecológica [20] para este tipo de cálculos. Por lo tanto se puede obtener que:

Identificación de las fuentes

Este trabajo ha sido desarrollado en el marco del instituto CMT - Motores Térmicos de la Universidad Politécnica de Valencia.

- Límite temporal: 2020 (desde Febrero hasta Junio).
- Límite de la propiedad: el becario ha realizado el trabajo por completo dentro de las instalaciones del centro, consumiendo parte de la energía de la red eléctrica nacional desde el mismo. Para su desplazamiento al trabajo únicamente ha empleado una bicicleta.
- Límite operativo: Identificación de las fuentes de contaminación.
 - Alcance 1: GEI provenientes de una fuente directa.
 - Transporte: se ha empleado una bicicleta como medio de transporte por lo que este concepto no ha originado contaminación en este caso.
 - Oficina: no se ha empleado climatización el tiempo que se ha estado en la oficina ya que el clima del periodo previo a la pandemia era bastante bueno.
 - Alcance 2: GEI provenientes de una fuente indirecta.
 - Electricidad: se ha consumido energía debido al empleo de un ordenador de uso personal durante el proyecto.

Datos de la actividad

Al ser la electricidad la única fuente de CO_2 mencionada, simplemente hay que acudir a la parte del presupuesto económico para hallar que durante el trabajo se han consumido unos 167.2 kWh .

Datos de emisión

En el documento [20] se especifica que para el caso de la red eléctrica en el año 2017, la producción de GEI ascendía a 0.43 $kg CO_2/kWh$.

Cálculo

Con una simple multiplicación de la energía consumida por la cantidad de CO_2 generada se puede obtener que se han producido 71.9 kg de CO_2 durante este tiempo. De esta forma, se puede deducir que la cantidad de GEI asociados a la actividad económica producida es de $\frac{71,9kg}{24273€} = 2,96 \cdot 10^{-3} \text{ kg } CO_2/€$, siendo por lo tanto un proyecto bastante limpio desde el punto de vista medioambiental.

Bibliografía

- [1] P.Wesseling. Elements of computational fluid dynamics. *Lecture notes WI 4011 Numerieke Stromingsleer- TU Delft*, page 21, 2001.
- [2] R.J. LeVeque, D. Mihalas, E.A. Dorfi, and E. Müller. *Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow*, chapter Leveque- 4, pages 49–52. Swiss Society for Astrophysics and Astronomy, 1997.
- [3] *Computational fluid Dynamics- 2013*. <http://www.nd.edu/~gtryggva/CFD-Course/>.
- [4] *The Visual Room 4. Sod's Test Problems: The Shock Tube Problem*. http://www.thevisualroom.com/sods_test_problem.html.
- [5] Manuel Hernández Marco. *A non-linear quasi-3D model for air management modelling in engines*. Universitat Politècnica de València, 2018.
- [6] C.Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*, volume 1: Fundamentals of fluid dynamics, chapter 1, pages 21–50. Elsevier, 2007.
- [7] Pieter Wesseling. *Principles of Computational Fluid Dynamics*, chapter 4, page 149. Springer Series in Computational Fluid Dynamics. Springer, 2001.
- [8] Germund Dahlquist. A special stability problem for linear multistep methods. pages 27–43, 1973.
- [9] Luis M. Sánchez Ruiz and Matilde P. Legua Fernández. *Ecuaciones diferenciales I y Transformadas de Laplace con aplicaciones*, chapter 4, page 82. Universitat Politècnica de València, 1995.
- [10] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik. *Mathematische annalen* 100(1), pages 32–74, 1928.
- [11] G. Montenegro, A.Della Torre, and R. Fairbrother. A nonlinear quasi-3d approach for the modeling of mufflers with perforated elements and sound-absorbing material. *Advances in Acoustics and Vibration*, page 4, 2013.

- [12] I.SHASTA. A fluid transport algorithm that works. *Journal of Computational Physics* 135, pages 172–176, 1971.
- [13] T. Colonius. Numerically nonreflecting boundary and interface conditions, for compressible flow and aeroacoustic computations. *AIAA J.* 35(7), page 1126, 1997.
- [14] Kamran Mohseni and Tim Colonius. Numerical treatment of of polar coordinate singularities. *Journal of Computational Physics* 157, pages 787–795, 1999.
- [15] D. De Santis, G. Geraci, and A. Guardone. Node-pair finite volume/finite element schemes for the euler equation in cylindrical and spherical coordinates. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 236, pages 4827–4839, 2012.
- [16] Sheng Wang and Eric Johnsen. High order schemes for the euler equations in cylindrical/spherical coordinates.
- [17] P.E. Crittenden and S. Balachandar. The impact of the form of the euler equations for radial flow in cylindrical and spherical coordinates on numerical conservation and accuracy. *Shock Waves* 28, pages 653–682, 2018.
- [18] Gary Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, pages 1–31, 1978.
- [19] C.Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*, volume 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flow, chapter 16, pages 204–209. Wiley-Interscience, 1990.
- [20] *Cálculo Huella de Carbono - Ministerio de Transición Ecológica.* https://www.miteco.gob.es/es/cambio-climatico/temas/mitigacion-politicas-y-medidas/guia_huella_carbono_tcm30-479093.pdf.