

Capítulo 5

Métodos de sudominios basados en la presión

En esta tesis se emplean dos métodos de descomposición de subdominios: un método conservativo que se ha presentado en el capítulo anterior (que denominaremos método MASS) y otro basado en la presión que se va a exponer a continuación. En el método conservativo se ha observado que, en el momento en que la interfase pasaba por la zona de solapamiento se producían ciertas discrepancias. Es por ello que en este capítulo se opta por una nueva aproximación (que denominaremos método MOM) que, como se verá a continuación, minimizará estas diferencias. De hecho, el resultado es prácticamente el mismo si resolvemos un caso sin subdominios o lo resolvemos con varios subdominios coincidentes.

Una vez comprobado que el método funciona correctamente, se ha procedido a realizar un estudio de verificación para el caso de fusión del galio con una relación de aspecto de 0.5. Se observa como la solución va aproximándose a la solución asintótica. Se compararán los resultados para un mismo caso utilizando el método MASS y el método MOM. Con el método MASS nos encontraremos con graves problemas de convergencia que obligan a una elevada densificación del mallado espacial.

Finalmente, y con el objetivo de presentar alguna de las muchas ventajas que ofrece la utilización de subdominios para resolver este tipo de fenomenología se procederá a resolver un caso con subdominios no coincidentes.

5.1 Introducción

Debido a las discrepancias observadas entre la solución obtenida con un único subdominio y la obtenida con dos subdominios cuando se utiliza el método expuesto en el capítulo anterior (que a partir de ahora llamaremos método MASS) se propuso una nueva opción a la hora de pasar información entre los diferentes subdominios. Este nuevo método recibió el nombre de método MOM [1], y es un método simple y fácil de implementar.

Las características básicas de la metodología propuesta son:

- Los flujos de masa, momentum, energía, etc. en las fronteras físicas entre subdominios se calculan de la misma manera que en los volúmenes de control interiores. De esta manera, la conservación de la masa entre subdominios y la conservación de flujos en la dirección transversal al contorno de interpolación no quedan impuestas.
- No se necesita ningún tratamiento especial cuando se utilizan esquemas de alto orden.

El método es el equivalente al esquema de interpolación que se había empleado para los campos escalares en el método MASS y que se ha explicado detalladamente en el capítulo anterior, con la única diferencia que para los campos escalares la interpolación se realiza en los nodos de los volúmenes de control y para los campos vectoriales la interpolación se realizará en las caras de los volúmenes de control. Así pues, consideraremos el caso estándar con 4 volúmenes de control de solapamiento, tal como muestra la Figura 5.1. En verde están representados los volúmenes de control más exteriores, *guest CVs*, y en rojo los dos más interiores, *host CVs*.

La zona ocupada por los *guest CVs* se calcula siempre con los valores del subdominio fuente, así pues, el subdominio fuente debe suministrar la información necesaria a estos volúmenes de control usando los esquemas de interpolación más adecuados. Por otra parte, la responsabilidad de los *host CVs* recae únicamente sobre el subdominio destino y no se hará ninguna distinción entre estos nodos y el resto de nodos interiores del subdominio destino que se resolverán de la misma manera.

La información necesaria para el subdominio fuente se representa en la Figura 5.1 en color verde y sólo afecta a los *guest CVs*. De manera más específica podemos decir:

- Se realiza la interpolación de las variables escalares (P, T, f_i, \dots) en los nodos centrados de los *guest CVs* (nodos E y EE en la figura).

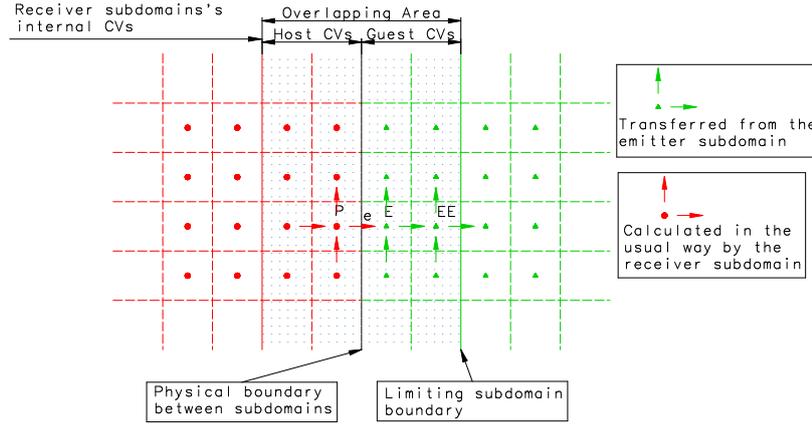


Figura 5.1: Caso con el que se realiza la explicación de la formulación matemática de los esquemas de interpolación en el caso de utilizar el método MOM [1]

- Se realiza la interpolación de las velocidades en las caras de los volúmenes de control (flechas verdes en la figura).

De esta manera, la información necesitada por los *guest CVs* se obtiene realizando interpolaciones en el subdominio fuente (ϕ_P^{ES}). Esta información se utilizará en el subdominio destino de la siguiente manera:

- Para las variables escalares (T, f_i) y para las velocidades (u, v) en la ecuación discretizada,

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b_P \tag{5.1}$$

tendremos:

$$a_P = 1; a_{nb} = 0; b_P = \phi_P^{ES}; \tag{5.2}$$

- La presión se transfiere directamente a los *guest CVs* desde el subdominio fuente. Cuando se utiliza este método la presión de corrección en los *guest CVs* debe ser cero ($P'_P=0$), de esta manera la presión transferida desde el subdominio fuente

se mantendrá en el subdominio destino. Por otra parte, y para asegurar que en el subdominio destino (en los nodos de los *quest CVs*) no se me generen imbalances másicos en la ecuación de corrección de presiones,

$$a_P^{p'} P_P' = \sum a_{nb}^{p'} p_{nb}' + b_P^{p'} \quad (5.3)$$

se impondrá el siguiente criterio:

$$a_P^{p'} = 1; a_{nb}^{p'} = 0; b_P^{p'} = 0; \quad (5.4)$$

Para los *host CVs* se utilizará exactamente el mismo procedimiento que para el resto de nodos interiores, incluyendo velocidades y flujos másicos en la frontera física entre subdominios. De esta manera y resumiendo, podemos decir que cuando se utiliza el método MOM las velocidades y los flujos másicos en la frontera física entre subdominios se evalúan con la ecuación de momentum sin imponer conservación de la masa entre subdominios pero utilizando las presiones del subdominio fuente; los flujos de momentum en la dirección tangencial a la frontera física entre subdominios se evalúan utilizando las velocidades de los *quest CVs* y los *host CVs*, es decir, sin imponer estos valores del subdominio fuente y en cuanto a los flujos escalares se evaluarán también de la misma manera que los flujos de momentum tangenciales.

5.2 Aspectos del método

Cuando se utiliza el método MOM se tiene que ir con especial cuidado a la hora de calcular el residuo másico. Así pues los nodos de los volúmenes de control de la zona de solapamiento que pertenecen al subdominio fuente se contabilizarán solo en el residuo másico de este subdominio y no se volverán a contabilizar otra vez en el subdominio destino y lo mismo para los nodos de los volúmenes de control del subdominio destino.

De manera gráfica esto lo podemos ver en la Figura 5.2. En esta figura aparecen representados los nodos de los volúmenes de control de solapamiento, en rojo los correspondientes al subdominio fuente y en verde los correspondientes al subdominio destino. En el cálculo del residuo másico en el subdominio fuente consideraremos todos los nodos interiores y de la zona de solapamiento hasta el TX-3. Para el cálculo del residuo másico en el subdominio destino consideraremos los nodos de la zona de solapamiento a partir del nodo 4 y todo el resto de nodos interiores.

Esta forma de calcular el residuo másico es básica para conseguir que el método converja.

Una de las ventajas del método MOM es la no necesidad de homogeneizar las presiones. Existen tres posibles actuaciones sobre el campo de presión:

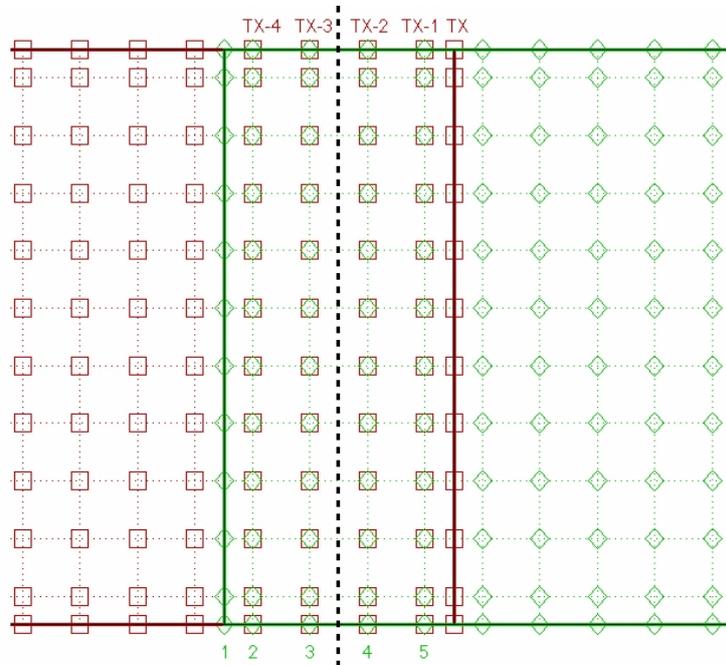


Figura 5.2: Nodos de la zona de solapamiento. Cálculo del residuo másico cuando el método empleado es el MOM

- A. Dejar la presión flotante, siempre controlando que los valores de esta variable no se me dispersen.
- B. Bajar la presión después de cada iteración global (en el *afterite*).
- C. Bajar la presión después de cada instante de tiempo global (en *cfdsolver_sbd*).

El problema radica en que para la presión no existe una ecuación en si misma, sino que lo que se hace es utilizar la ecuación de continuidad para conocer de forma indirecta el campo de presiones (siempre bajo la hipótesis de fluido incompresible). De esta manera, a la hora de calcular la presión lo que se conoce es un valor supuesto de esta variable (P^*) y una presión de corrección (P'), de manera que la presión la podemos calcular como sigue:

$$P = P^* + P' \quad (5.5)$$

Cuando comentamos de dejar la presión flotante, lo que se tendrá que vigilar es que el valor de la variable P no aumente de manera descontrolada.

A continuación explicaremos el concepto de bajar la presión. Para ello nos fijaremos en la presión en un nodo P_P . Pues bien, bajar la presión en lo que consiste es en restar este valor de la presión en el nodo P al valor de la presión en todos los nodos, es decir,

$$P(i, j) = P(i, j) - P_P \quad (5.6)$$

En nuestro caso si bajamos la presión después de cada iteración global, el método MOM no converge en algunos instantes de tiempo, por más que se utilice el incremento de tiempo dinámico, se incremente el número de veces que se entra en el bucle de escalares (*NPSCAL*), ya se incremente el número de veces que se entra en la ecuación de corrección de presiones (*NPPP*) o ya se resuelva directamente esta ecuación algebraica (*LU*).

Si en cambio optamos por bajar la presión después de cada incremento temporal el método funciona, siempre y cuando se resuelva la ecuación de corrección de presiones invirtiendo la matriz de coeficientes (método *LU*). Así pues, debemos elegir entre las opciones A y C. Para poder llevar a cabo dicha elección nos fijamos en la Tabla 5.1.

Por los resultados observados en la Tabla 5.1, la opción más interesante por obtenerse en el tiempo computacional más bajo una solución asintótica, es la de utilizar 4 pasadas por campos escalares e invertir la matriz de P' . Aunque si utilizamos un mayor número de pasadas por escalares la solución se ve ligeramente modificada (del orden de $3 \cdot 10^{-4}\%$), esta leve modificación no me compensa el aumento del tiempo de cpu (se ve incrementado en un 63%). Además la opción de utilizar el método LU para la ecuación de corrección de presiones nos permite resolver casos en que el número de subdominios sea mayor (si dejamos la presión flotante y utilizamos un número de pasadas por la ecuación de corrección de presiones se nos presentan problemas de convergencia al aumentar el número de subdominios o al hacer la malla de discretización más fina).

En la Tabla 5.2 se pueden observar las diferencias que se producen en las diferentes variables si se deja la presión flotante (con LU) o si se baja esta después de cada paso temporal, para diferentes instantes de tiempo.

En esta tabla observamos que las mayores diferencias se producen a partir del instante 720 segundos. Esto es así porque, es a partir del instante 770 segundos que en algunos momentos aparece la necesidad de bajar el incremento temporal mediante el incremento de tiempo dinámico y los dos esquemas empiezan a converger de manera ligeramente diferente, haciendo que la solución no sea exactamente la misma.

	NPSCAL	NPPP	mincpu	Nusselt	FL	ite	$n\Delta t_{dynamic}$
<i>Malla 20x10 ndt=14250</i>							
NF ¹	4	1	37.71900	0.2865827	0.559323	134956	2
F ²	4	1	36.98233	0.2865827	0.559323	130548	2
F	4	2	66.91683	0.2865827	0.559323	133101	2
F	4	4	72.25830	0.2865832	0.559322	139603	11
F	4	10	87.03517	0.2865796	0.559321	154626	111
F	4	LU	44.83783	0.2865750	0.559321	142492	162
F	10	LU	119.5648	0.2865759	0.559321	139660	159
NF	10	1	68.16383	0.2865827	0.559323	132981	2
<i>Malla 40x20 ndt=28500</i>							
F	4	1	498.2203	0.3407471	0.624046	466821	64
F	4	LU	556.0353	0.3407441	0.624064	267963	132
NF	4	1	580.3232	0.3407470	0.624046	566416	36

Tabla 5.1: Comparación entre dejar la presión flotante o bajarla después de cada incremento de tiempo. Resultados para diferentes valores de número de pasadas por los campos escalares (NPSCAL), forma de resolver la ecuación de corrección de presiones (NPPP) para las mallas de 20x10 y 40x 20 volúmenes de control. Entre los resultados, se ha tomado como referencia el tiempo computacional (mincpu), el número de Nusselt, la fracción de líquido en el dominio, el número de iteraciones totales (ite) y el número de veces que se utiliza en incremento de tiempo dinámico

time	100	300	600	720	840	1140	Average
U	$3.80 \cdot 10^{-8}$	$1.71 \cdot 10^{-7}$	$4.19 \cdot 10^{-8}$	$6.70 \cdot 10^{-8}$	$3.90 \cdot 10^{-5}$	$1.30 \cdot 10^{-5}$	$8.72 \cdot 10^{-6}$
V	$8.63 \cdot 10^{-8}$	$1.70 \cdot 10^{-7}$	$3.57 \cdot 10^{-8}$	$4.88 \cdot 10^{-8}$	$3.25 \cdot 10^{-5}$	$1.13 \cdot 10^{-5}$	$7.36 \cdot 10^{-6}$
T	$1.50 \cdot 10^{-6}$	$6.29 \cdot 10^{-6}$	$2.99 \cdot 10^{-6}$	$4.75 \cdot 10^{-6}$	$2.79 \cdot 10^{-3}$	$1.50 \cdot 10^{-3}$	$7.18 \cdot 10^{-4}$
f_i	$1.07 \cdot 10^{-6}$	$1.88 \cdot 10^{-6}$	$3.28 \cdot 10^{-6}$	$3.85 \cdot 10^{-6}$	$6.80 \cdot 10^{-4}$	$2.11 \cdot 10^{-3}$	$4.67 \cdot 10^{-4}$

Tabla 5.2: Diferencias entre dejar la presión flotante o no, en tanto por ciento, que se producen en las diferentes variables que intervienen en el problema para diferentes instantes de tiempo, así como el valor medio de dicho error para la malla de 40x20 volúmenes de control

Finalmente, resulta de interés ver las diferencias que se me producen al resolver un mismo caso con diferente número de subdominios. Esto es de interés porque para poder obtener una solución que me sirva como solución de referencia, el número de

¹NF: bajo la presión después de cada incremento temporal

²F : deajo la presión flotante

volúmenes de control requerido será muy elevado como para pensar en resolverlo con una única cpu. Esto nos obligará a paralelizar el problema en un número más o menos elevado de máquinas (en función del caso), pero tenemos que garantizar que las diferencias que se me van a producir por el hecho de utilizar un número elevado de sudominios sean asumibles si las comparamos con la reducción que me va a suponer en el tiempo de cómputo.

A tal efecto, hemos cogido los casos de 20x10 y de 40x20 volúmenes de control y los hemos resuelto, dejando la presión la presión flotante y utilizando el método LU, con diferente número de sudominios (1, 2 y 4 en el primer caso y 1, 2, 4 y 8 en el segundo caso). En la Figura 5.3 observamos las diferentes mallas de discretización utilizadas en el caso de 40x20 volúmenes de control.

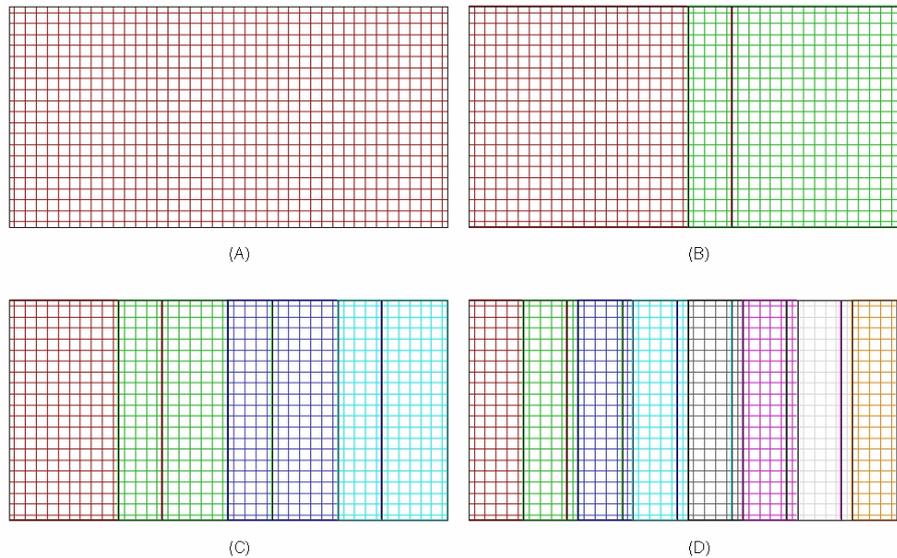


Figura 5.3: Diferentes mallas de discretización utilizadas para ver la influencia de resolver un mismo caso con diferente número de sudominios: (A) 1 solo sudominio (B) 2 sudominios (C) 3 sudominios y (D) 4 sudominios. En todos los casos los sudominios son coincidentes

En la Tabla 5.3 observamos que las diferencias que se producen al utilizar diferente número de sudominios en un mismo caso son muy pequeñas (no superan el 0.04%) y son debidas a que a medida que aumentamos el número de sudominios el número de veces que se entra en incremento de tiempo dinámico aumenta por lo que el problema

n°SBD	mincpu	Nusselt	f	ite	$n\Delta t_{dinamic}$
<i>Malla 20x10 ndt=14250</i>					
1	31.18050	0.2864578	0.559315	138692	0 (0%)
2	58.34767	0.2864606 (0.001%)	0.559314 (0.0002%)	190574	48 (0.33%)
4	158.93420	0.2865667 (0.038%)	0.559311 (0.0007%)	353091	420 (2.95%)
<i>Malla 40x20 ndt=28500</i>					
1	182.3682	0.3407434	0.624031	283223	0 (0%)
2	258.6408	0.3407387 (0.0014%)	0.624029 (0.0003%)	357249	57 (0.20%)
4	672.4077	0.3407128 (0.0090%)	0.624020 (0.0018%)	492443	159 (0.56%)
8	1239.5760	0.3406703 (0.0215%)	0.623960 (0.0114%)	669842	401 (1.41%)

Tabla 5.3: Comparación entre resolver el caso con diferente número de subdominios. Resultados para las mallas de 20x10 y 40x 20 volúmenes de control. Entre los resultados, se ha tomado como referencia el tiempo computacional (mincpu), el número de Nusselt, la fracción de líquido en el dominio, el número de iteraciones totales (ite) y el número de veces que se utiliza en incremento de tiempo dinámico, así como su porcentaje

convergerá a una solución ligeramente diferente.

En la Tabla 5.4 observamos como los errores aumentan a medida que aumentamos en número de subdominios con respecto al caso en que utilizamos un solo dominio de discretización. No obstante, comentar que estos errores son muy pequeños (nunca superiores a 0.2%) y que se pueden atribuir, como ya hemos comentado anteriormente a que en cada uno de los casos el número de veces que se utiliza el incremento de tiempo dinámico es diferente y, por lo tanto, cada uno de los casos convergerá a la solución final de manera ligeramente diferente.

Finalmente, en la Figura 5.4 podemos observar las pequeñas diferencias que se producen en el instante 1140 segundos para las variables U y V . Al dibujar el contorno de la velocidad tangencial, se producen errores en los contornos de interpolación. debidos únicamente a la herramienta utilizada para realizar la representación gráfica. Estos errores solo existen a nivel gráfico.

<i>2sbd vs 1sbd</i>							
time	<i>100</i>	<i>300</i>	<i>600</i>	<i>720</i>	<i>840</i>	<i>1140</i>	<i>Average</i>
U	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$1.65 \cdot 10^{-15}$	$3.18 \cdot 10^{-6}$	$1.07 \cdot 10^{-4}$	$1.84 \cdot 10^{-5}$
V	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$1.50 \cdot 10^{-15}$	$5.36 \cdot 10^{-6}$	$5.01 \cdot 10^{-5}$	$9.24 \cdot 10^{-6}$
T	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$2.50 \cdot 10^{-2}$	$4.17 \cdot 10^{-3}$
f_t	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$1.25 \cdot 10^{-4}$	$4.00 \cdot 10^{-4}$	$8.75 \cdot 10^{-5}$
<i>4sbd vs 1sbd</i>							
time	<i>100</i>	<i>300</i>	<i>600</i>	<i>720</i>	<i>840</i>	<i>1140</i>	<i>Average</i>
U	$0.00 \cdot 10^0$	$1.95 \cdot 10^{-13}$	$1.59 \cdot 10^{-6}$	$5.56 \cdot 10^{-5}$	$1.55 \cdot 10^{-4}$	$6.30 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{-4}$
V	$0.00 \cdot 10^0$	$6.47 \cdot 10^{-15}$	$1.51 \cdot 10^{-5}$	$7.88 \cdot 10^{-5}$	$1.28 \cdot 10^{-4}$	$4.80 \cdot 10^{-4}$	$1.17 \cdot 10^{-4}$
T	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$1.25 \cdot 10^{-2}$	$2.50 \cdot 10^{-2}$	$1.13 \cdot 10^{-1}$	$2.51 \cdot 10^{-2}$
f_t	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$8.88 \cdot 10^{-4}$	$1.20 \cdot 10^{-3}$	$1.10 \cdot 10^{-3}$	$5.31 \cdot 10^{-4}$
<i>8sbd vs 1sbd</i>							
time	<i>100</i>	<i>300</i>	<i>600</i>	<i>720</i>	<i>840</i>	<i>1140</i>	<i>Average</i>
U	$0.00 \cdot 10^0$	$3.39 \cdot 10^{-6}$	$1.11 \cdot 10^{-4}$	$6.07 \cdot 10^{-4}$	$6.47 \cdot 10^{-4}$	$1.70 \cdot 10^{-3}$	$5.11 \cdot 10^{-4}$
V	$0.00 \cdot 10^0$	$2.67 \cdot 10^{-6}$	$1.09 \cdot 10^{-4}$	$4.83 \cdot 10^{-4}$	$5.66 \cdot 10^{-4}$	$1.31 \cdot 10^{-3}$	$4.12 \cdot 10^{-4}$
T	$0.00 \cdot 10^0$	$0.00 \cdot 10^0$	$1.25 \cdot 10^{-2}$	$1.00 \cdot 10^{-1}$	$1.25 \cdot 10^{-1}$	$1.50 \cdot 10^{-1}$	$6.46 \cdot 10^{-2}$
f_t	$0.00 \cdot 10^0$	$2.54 \cdot 10^{-4}$	$1.15 \cdot 10^{-3}$	$4.93 \cdot 10^{-3}$	$6.39 \cdot 10^{-3}$	$7.26 \cdot 10^{-3}$	$3.33 \cdot 10^{-3}$

Tabla 5.4: Diferencias entre utilizar 1, 2, 4 u 8 subdominios, en tanto por ciento, que se producen en las diferentes variables que intervienen en el problema para diferentes instantes de tiempo, así como el valor medio de dicho error para la malla de 40×20 volúmenes de control

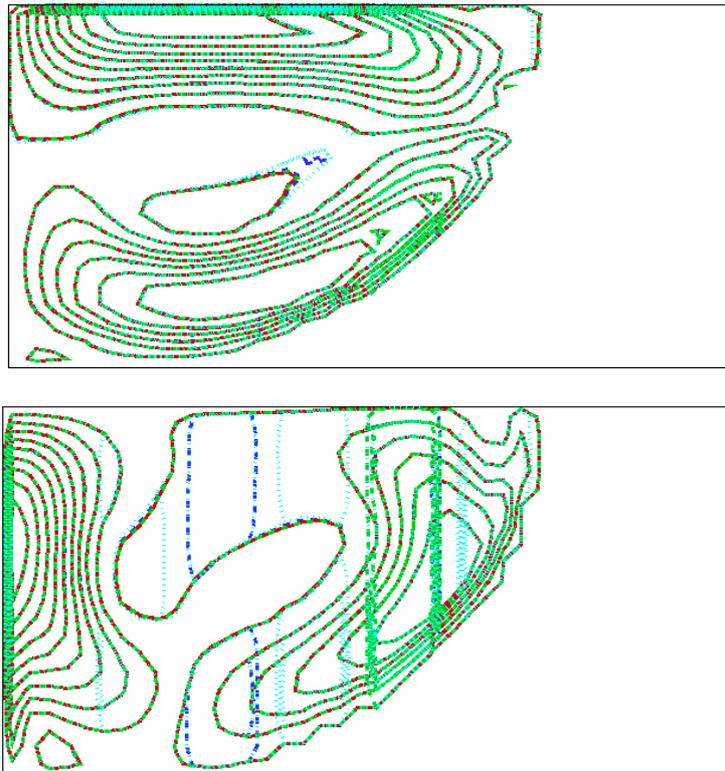


Figura 5.4: Contornos para las variables vectoriales (U en la parte superior, V en la parte inferior de la figura). En rojo 1 solo dominio, en verde 2 subdominios, en azul 4 subdominios y en azul claro 8 subdominios. Malla 40x20 y en el instante de tiempo 1140 segundos

5.3 Estudio de verificación

A continuación vamos a ver el comportamiento del método MOM al densificar la malla de discretización espacial y temporal. En este apartado las mallas serán en todos los casos coincidentes. El objetivo de este apartado también es encontrar una solución de referencia para el caso de fusión del galio (caso mostrado en la Figura 6.1 y en la Tabla 6.1).

En la Tabla 5.5 se muestran los diferentes casos que se han estudiado en este apartado. El caso c68 es el que se tomará como solución de referencia.

ref	vc _x	vc _y	ndt	n ^o cpu
c1	10	5	35625	1
c2	20	10	71250	1
c3	40	20	142500	1
c41	80	40	285000	1
c42	80	40	285000	2
c51	160	80	570000	1
c54	160	80	570000	4
c68	320	160	1140000	8

Tabla 5.5: Casos que se han tratado en el estudio de convergencia para observar el comportamiento del método MOM. Siendo **ref** el código de referencia, **vc_x** y **vc_y** el número de volúmenes de control en x y en y , **ndt** el número de pasos temporales (siendo entonces, el incremento de tiempo $1140/\text{ndt}$) y **n^o cpu** el número de máquinas que se han utilizado para obtener el resultado

En la Tabla 5.6 observamos los resultados obtenidos para los casos mostrados en la Tabla 5.5. En esta tabla podemos observar como la única diferencia entre ejecutar un caso en secuencial o en paralelo radica en el tiempo computacional; la reducción en el tiempo de cpu que supone ejecutar un caso en paralelo es muy importante: así, en el caso c4, el ejecutar el caso en paralelo me supone una reducción en el tiempo computacional de un 6% y en el caso c5 esta reducción se hace aún más importante (un 42%). De hecho, cuando pasamos al caso c6, realizar este caso en secuencial es impensable.

Por otra parte en esta tabla observamos como los resultados van acercándose a la solución asintótica a medida que densificamos el mallado espacial y temporal. Para el Número de Nusselt esta tendencia no se observa tan clara, pues como veremos en gráficos posteriores este valor se vuelve oscilatorio a medida que aumentamos el tamaño de malla. Esta oscilación no ocurre para el valor de la fracción líquida lo que hace que para este valor se pueda observar claramente la tendencia de la solución

ref	Nu	FL	ite	cpu	$n\Delta t_{dinamic}$
c1	0.21098	0.464988	4.00	5.561667	-
c2	0.28637	0.559311	4.02	38.18117	-
c3	0.34082	0.624020	4.03	387.0647	-
c41	0.34296	0.656895	4.87	5480.5362	-
c42	0.34296	0.656895	4.87	5162.5480	-
c51	0.37065	0.687086	5.79	50584.550	23
c54	0.37065	0.687086	5.79	29363.022	23
c68	0.33229	0.702630	6.80	69797.270	-

Tabla 5.6: Resultados obtenidos para los diferentes casos que se han ejecutado en el estudio de convergencia con el método MOM, siendo, **Nu** el número de Nusselt, **FL** la fracción de líquido en el dominio, **ite** el número de iteraciones por paso temporal, **cpu** el tiempo computacional en minutos y $n\Delta t_{dinamic}$ el número de veces que reduce el incremento temporal

hacia la solución asintótica. Es por esto que en la Tabla 5.7 y en la Figura 5.5 como evoluciona el error de la fracción de líquido en el dominio a medida que aumentamos el número de volúmenes de control y el número de pasos temporales. Tanto en la figura como en la tabla se observa como la solución va tendiendo hacia un valor asintótico y en la tabla observamos que esta tendencia se produce con un ratio que se encuentra entre 1 y 3 lo cual se corresponde con el esquema numérico que estamos empleando.

ref	FL	e_{FL} [%]	ratio de error
c1	0.464988	33.82	
c2	0.559311	20.40	1.66
c3	0.624020	11.19	1.82
c42	0.656895	6.51	1.72
c54	0.687086	2.21	2.94
c68	0.702630	-	

Tabla 5.7: Error en tanto por ciento obtenido en el cálculo de la fracción líquida en el dominio calculado como $\frac{|FL_{ci} - FL_{ref}|}{FL_{ref}} \cdot 100$ y ratio de este error calculado como $\frac{e_{ci}}{e_{ci+1}}$

En la Figura 5.6 observamos la evolución temporal de diferentes valores globales para los diferentes casos que se han estudiado.

En la Figura 5.6 observamos como en el caso de la fracción líquida a medida que

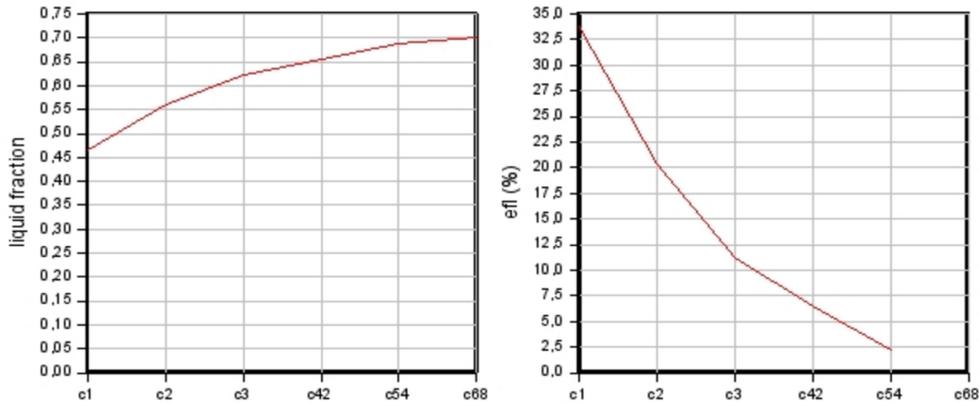


Figura 5.5: Evolución de la fracción líquida en el dominio y del error en tanto por ciento en el cálculo de esta fracción líquida a medida que aumentamos el número de volúmenes de control y el número de pasos temporales

aumentamos el número de volúmenes de control y el número de pasos temporales la diferencia entre dos mallas consecutivas se hace cada vez menor, lo que significa que cada vez la solución está más próxima a la solución asintótica. En cambio en el Número de Nusselt esta tendencia no puede observarse tan claramente porque a partir del caso c3 la solución empieza a oscilar. Esta oscilación es debida a que el sistema alcanza un régimen oscilatorio (periódico) (ver sección 4.5).

En las Figuras 5.8, 5.9, 5.10 y 5.11 se observa la evolución temporal de las velocidades, temperatura y fracción líquida en diferentes puntos del dominio (ver Figura 5.7).

En las Figuras 5.8 y 5.9 observamos claramente el estado oscilatorio que alcanza el caso en que nos encontramos. En la Figura 5.10 observamos que estas oscilaciones se producen cuando el material está en estado líquido; cuando está en estado sólido podemos observar como la solución va acercándose a la solución asintótica, siendo cada vez más pequeñas las diferencias que se producen al doblar la malla de discretización espacial; esto también se puede observar en la Figura 5.11.

En las Figuras 5.12, 5.13, 5.14 se pueden ver los perfiles de velocidad en los instantes de tiempo 100, 300 y 600 segundos, respectivamente; en general, observamos como la solución va acercándose a la solución asintótica, pero en algunos casos se producen saltos raros en la solución, que son debidos a que se alcanza un régimen oscilatorio.

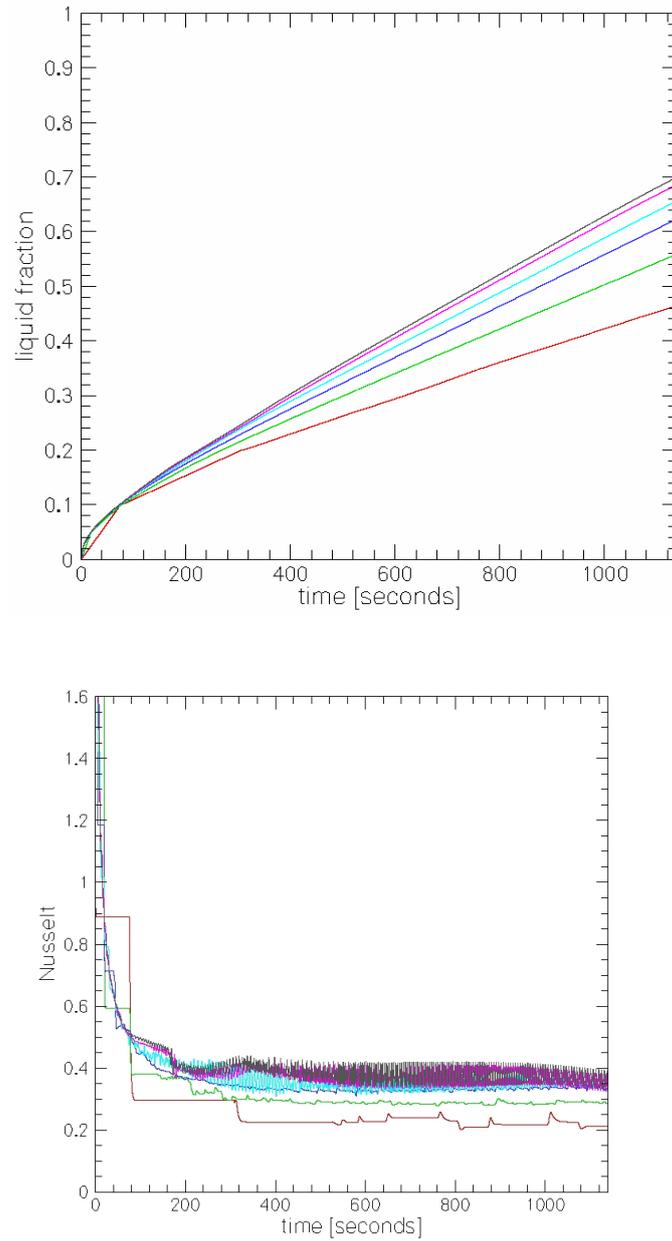


Figura 5.6: Evolución temporal de la fracción líquida y del número de Nusselt para los diferentes casos que se han estudiado. *c1* en rojo, *c2* en verde, *c3* en azul oscuro, *c42* en azul claro, *c54* en fucsia y *c68* en gris

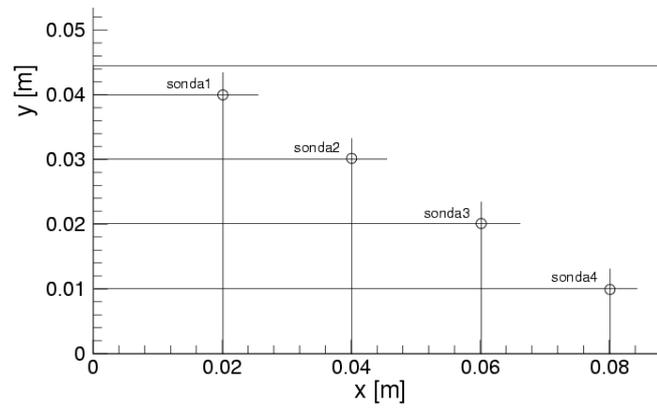


Figura 5.7: Puntos en los que se ha seguido la evolución temporal de las diferentes variables en estudio

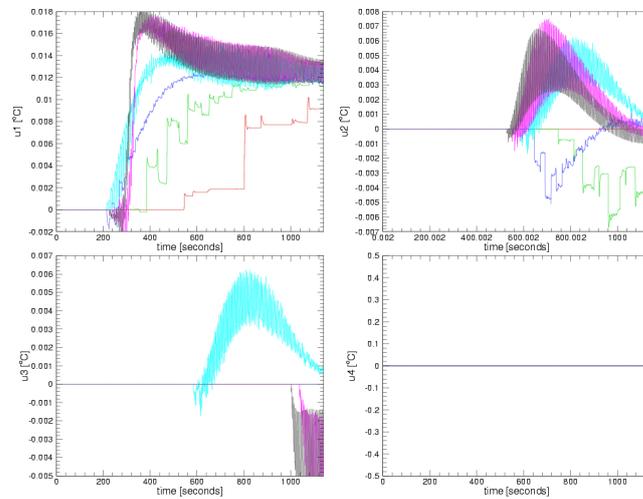


Figura 5.8: Evolución temporal de la velocidad longitudinal: $c1$ en rojo, $c2$ en verde, $c3$ en azul oscuro, $c42$ en azul claro, $c54$ en fucsia y $c68$ en gris

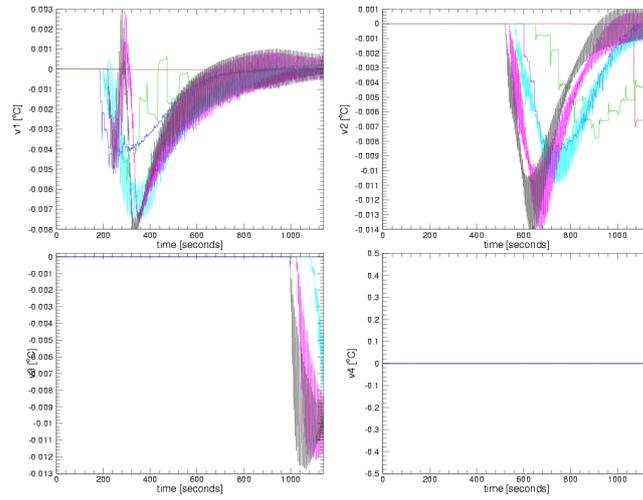


Figura 5.9: Evolución temporal de la velocidad tangencial: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_4 en azul claro, c_5 en fucsia y c_6 en gris

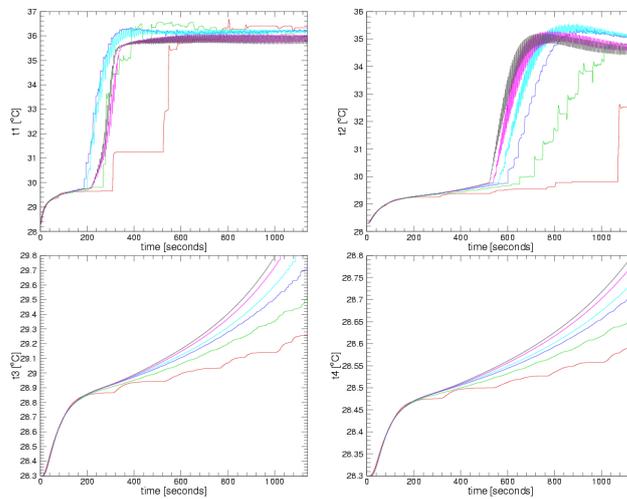


Figura 5.10: Evolución temporal de la temperatura: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_4 en azul claro, c_5 en fucsia y c_6 en gris

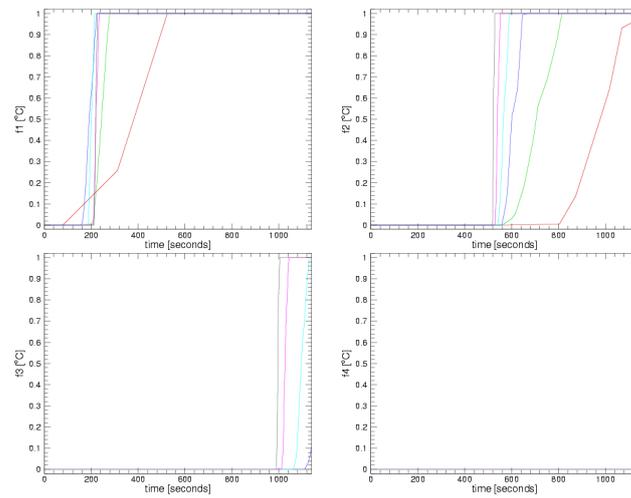


Figura 5.11: Evolución temporal de la fracción líquida: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_{42} en azul claro, c_{54} en fucsia y c_{68} en gris

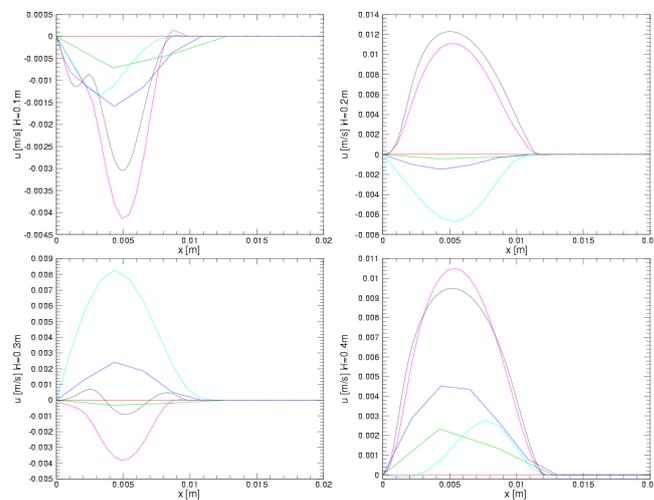


Figura 5.12: Perfiles de velocidad longitudinal en 100 segundos: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_{42} en azul claro, c_{54} en fucsia y c_{68} en gris

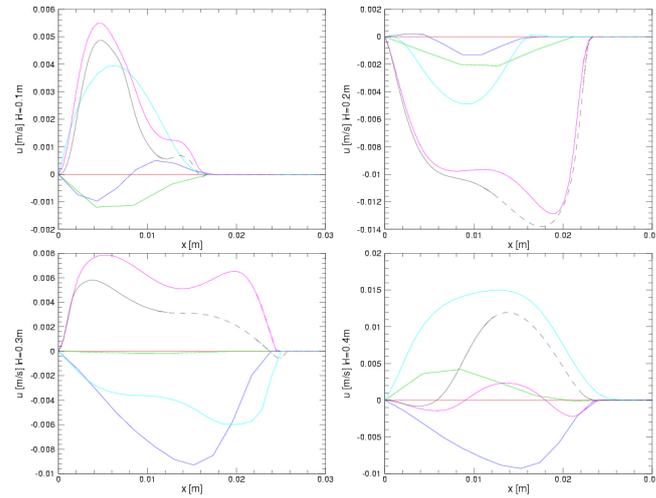


Figura 5.13: Perfiles de velocidad longitudinal en 300 segundos: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_{42} en azul claro, c_{54} en fucsia y c_{68} en gris

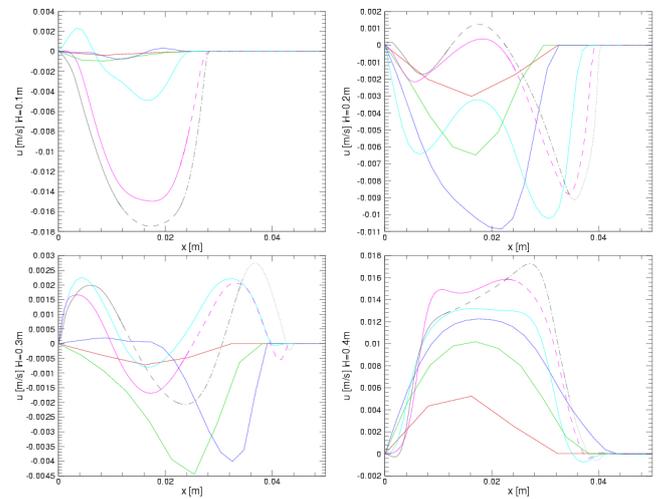


Figura 5.14: Perfiles de velocidad longitudinal en 600 segundos: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_{42} en azul claro, c_{54} en fucsia y c_{68} en gris

En las Figuras 5.15, 5.16, 5.17 se pueden ver los perfiles de velocidad transversal en los instantes de tiempo 480, 720 y 1140 segundos, respectivamente; comentar que en este caso en algunos casos se observa un salto a cero entre subdominios, pero decir que esto sólo se produce a nivel gráfico y que en la simulación no tiene ningún efecto.

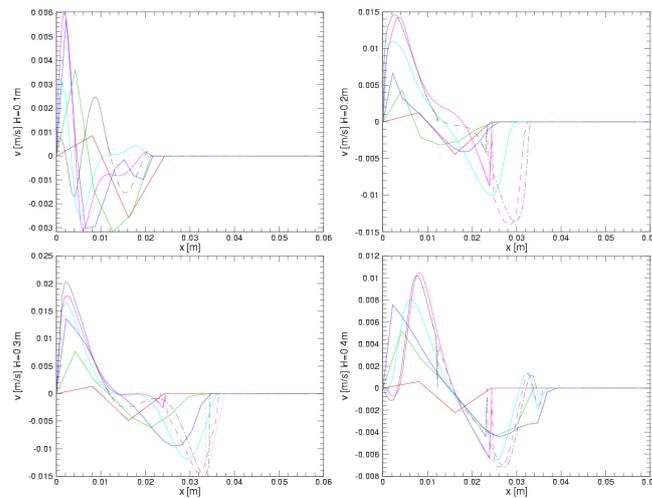


Figura 5.15: Perfiles de velocidad transversal en 480 segundos: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_{42} en azul claro, c_{54} en fucsia y c_{68} en gris

En las Figuras 5.18, 5.19, 5.20 se observan los perfiles de temperatura en los instantes de tiempo 300, 600 y 840 segundos, respectivamente; en estas figuras se observa claramente que las diferencias al ir doblando la malla son cada vez más pequeñas.

Finalmente, en las Figuras 5.21, 5.22, 5.23 se observan los perfiles de fracción líquida en los instantes de tiempo 100, 720 y 1140 segundos, respectivamente. En estas figuras, al igual que en el caso anterior también observamos como la solución va aproximándose a la solución asintótica.

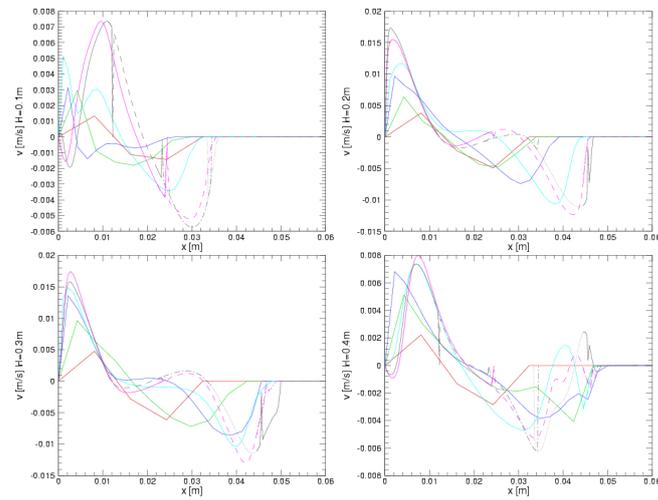


Figura 5.16: Perfiles de velocidad transversal en 720 segundos: $c1$ en rojo, $c2$ en verde, $c3$ en azul oscuro, $c42$ en azul claro, $c54$ en fucsia y $c68$ en gris

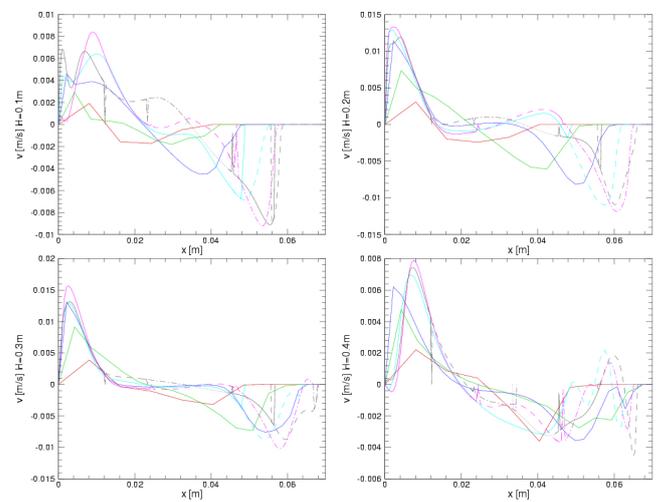


Figura 5.17: Perfiles de velocidad transversal en 1140 segundos: $c1$ en rojo, $c2$ en verde, $c3$ en azul oscuro, $c42$ en azul claro, $c54$ en fucsia y $c68$ en gris

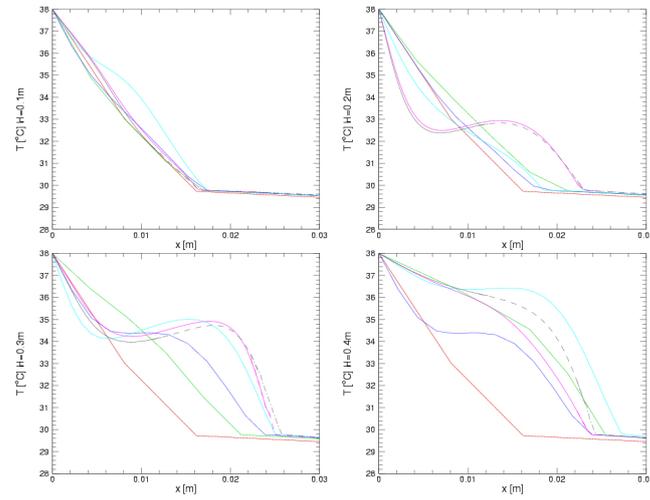


Figura 5.18: Perfiles de temperatura en 300 segundos: $c1$ en rojo, $c2$ en verde, $c3$ en azul oscuro, $c4$ en azul claro, $c5$ en fucsia y $c6$ en gris

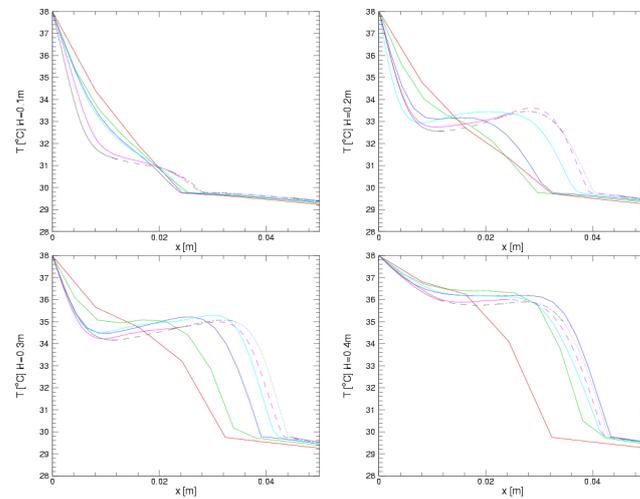


Figura 5.19: Perfiles de temperatura en 600 segundos: $c1$ en rojo, $c2$ en verde, $c3$ en azul oscuro, $c4$ en azul claro, $c5$ en fucsia y $c6$ en gris

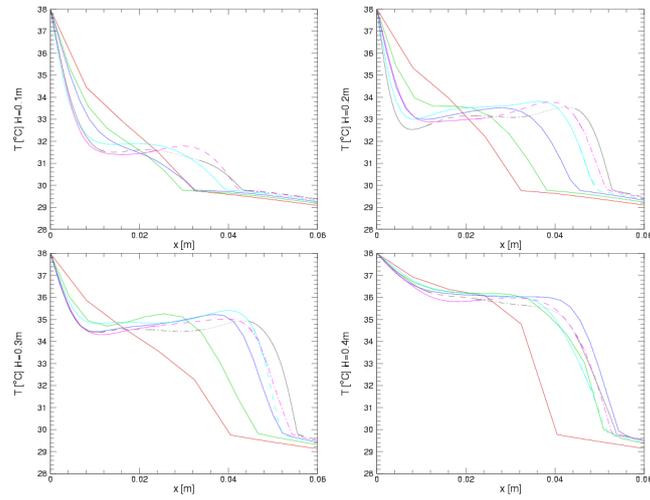


Figura 5.20: Perfiles de temperatura en 840 segundos: c1 en rojo, c2 en verde, c3 en azul oscuro, c42 en azul claro, c54 en fucsia y c68 en gris

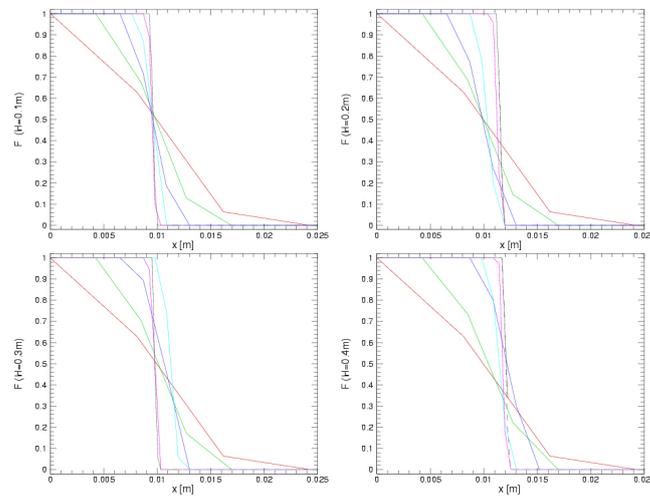


Figura 5.21: Perfiles de fracción líquida en 100 segundos: c1 en rojo, c2 en verde, c3 en azul oscuro, c42 en azul claro, c54 en fucsia y c68 en gris

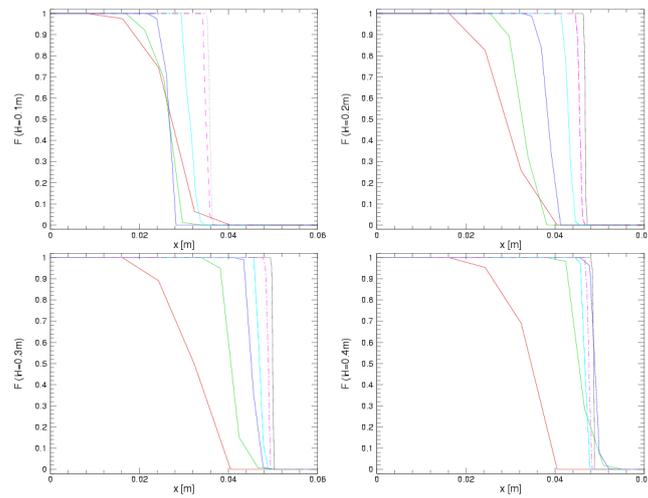


Figura 5.22: Perfiles de fracción líquida en 720 segundos: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_42 en azul claro, c_54 en fucsia y c_68 en gris

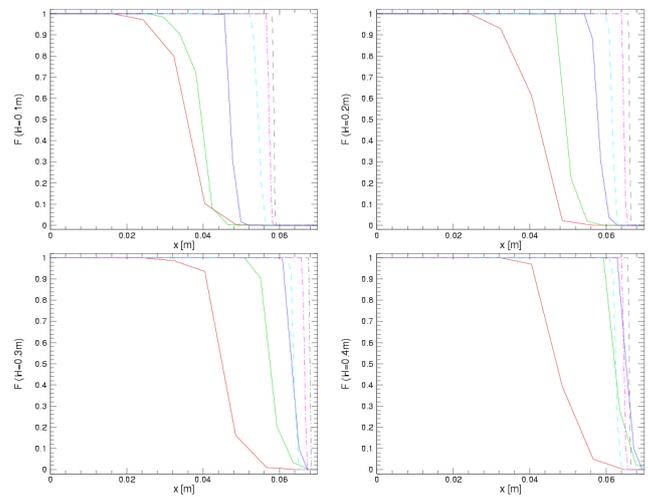


Figura 5.23: Perfiles de fracción líquida en 1140 segundos: c_1 en rojo, c_2 en verde, c_3 en azul oscuro, c_42 en azul claro, c_54 en fucsia y c_68 en gris

5.4 Comparación métodos: MOM vs MASS

En este apartado vamos a tratar de comparar los resultados obtenidos para un mismo caso según se utilice el método MOM o el método MASS. Para ello vamos a coger el caso de 20x10 volúmenes de control y lo vamos a resolver con 1, 2 y 4 subdominios con ambos métodos.

En la Tabla 5.8 se observa las diferencias que se producen entre utilizar el método MOM o el método MASS en el tiempo computacional, el número de Nusselt en la pared caliente y la fracción de líquido en el dominio en el instante de tiempo 1140 segundos, el número de iteraciones totales y el número de veces que se recurre al incremento de tiempo dinámico. En general, comentar que, si bien el tiempo computacional es inferior de utilizar el método MASS, las diferencias que se producen en los parámetros seleccionados son muy superiores para el método MASS que para el método MOM.

n°SBD	cpu	Nusselt	FL	ite	n $\Delta t_{dinamic}$
MÉTODO MASS					
1	31.29300	0.286458	0.559315	138692	0 (0%)
2	46.20733	0.286867 (0.14%)	0.559468 (0.03%)	151481	0 (0%)
4	72.62417	0.295564 (3.18%)	0.558301 (0.18%)	163283	0 (0%)
MÉTODO MOM					
1	31.18050	0.286458	0.559315	138692	0 (0%)
2	58.34767	0.286461 (0.001%)	0.559314 (0.0002%)	190574	48 (0.33%)
4	158.93420	0.286567 (0.038%)	0.559311 (0.0007%)	353091	420 (2.95%)

Tabla 5.8: Comparación entre resolver el caso con diferente número de subdominios. Resultados para la malla de 20x10 volúmenes de control y 14250 pasos temporales utilizando los métodos MOM y MASS. Se refleja el tiempo computacional (cpu), el número de Nusselt, la fracción de líquido en el dominio, el número de iteraciones totales (ite) y el número de veces que se utiliza en incremento de tiempo dinámico y su porcentaje

En las Figuras 5.24 y 5.25 se observa claramente que las diferencias entre utilizar 1, 2 o 4 subdominios son mucho mayores si utilizamos el método MASS que si utilizamos el método MOM. Estas diferencias aparecen cuantificadas en la Tabla 5.9 para diferentes instantes de tiempo.

Comentar que si seguimos doblando el mallado y tratamos de resolver el caso con el método MASS nos encontramos con graves problemas de convergencia si utilizamos 4 y 8 subdominios, cosa que no pasa si utilizamos el método MOM. Es por todo esto, que finalmente se ha escogido el método MOM para obtener la solución de referencia.

MÉTODO MASS							
<i>2sbd vs 1sbd</i>							
time	100	300	600	720	840	1140	Average
U	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.29·10 ⁻¹¹	1.28·10 ⁻³	2.14·10 ⁻⁴
V	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	2.01·10 ⁻¹²	7.74·10 ⁻⁴	1.29·10 ⁻⁴
T	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	3.00·10 ⁻¹	5.00·10 ⁻²
f _l	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.46·10 ⁻²	2.43·10 ⁻³
<i>4sbd vs 1sbd</i>							
time	100	300	600	720	840	1140	Average
U	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.64·10 ⁻³	9.72·10 ⁻³	3.24·10 ⁻³	1.76·10 ⁻²	5.37·10 ⁻³
V	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.31·10 ⁻³	5.74·10 ⁻³	1.86·10 ⁻³	1.38·10 ⁻²	3.79·10 ⁻³
T	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	9.00·10 ⁻¹	3.00·10 ⁰	1.95·10 ⁰	6.80·10 ⁰	2.11·10 ⁰
f _l	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.20·10 ⁻²	4.29·10 ⁻²	1.11·10 ⁻¹	1.43·10 ⁻¹	5.15·10 ⁻²
MÉTODO MOM							
<i>2sbd vs 1sbd</i>							
time	100	300	600	720	840	1140	Average
U	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.62·10 ⁻⁵	2.69·10 ⁻⁶
V	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	2.00·10 ⁻⁷	3.33·10 ⁻⁸
T	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰
f _l	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	5.00·10 ⁻⁴	8.33·10 ⁻⁵
<i>4sbd vs 1sbd</i>							
time	100	300	600	720	840	1140	Average
U	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	1.48·10 ⁻⁶	1.15·10 ⁻⁵	1.00·10 ⁻⁸	1.80·10 ⁻⁴	3.21·10 ⁻⁵
V	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	7.40·10 ⁻⁷	3.00·10 ⁻⁶	7.98·10 ⁻¹²	9.44·10 ⁻⁵	1.64·10 ⁻⁵
T	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰
f _l	0.00·10 ⁰	0.00·10 ⁰	5.00·10 ⁻⁴	0.00·10 ⁰	5.00·10 ⁻⁵	5.00·10 ⁻⁴	1.75·10 ⁻⁴

Tabla 5.9: Diferencias entre utilizar 1, 2 o 4 subdominios, en tanto por ciento, que se producen en las diferentes variables que intervienen en el problema para diferentes instantes de tiempo, así como el valor medio de dicho error la malla de 20x10 volúmenes de control según utilicemos el método MASS o el MOM

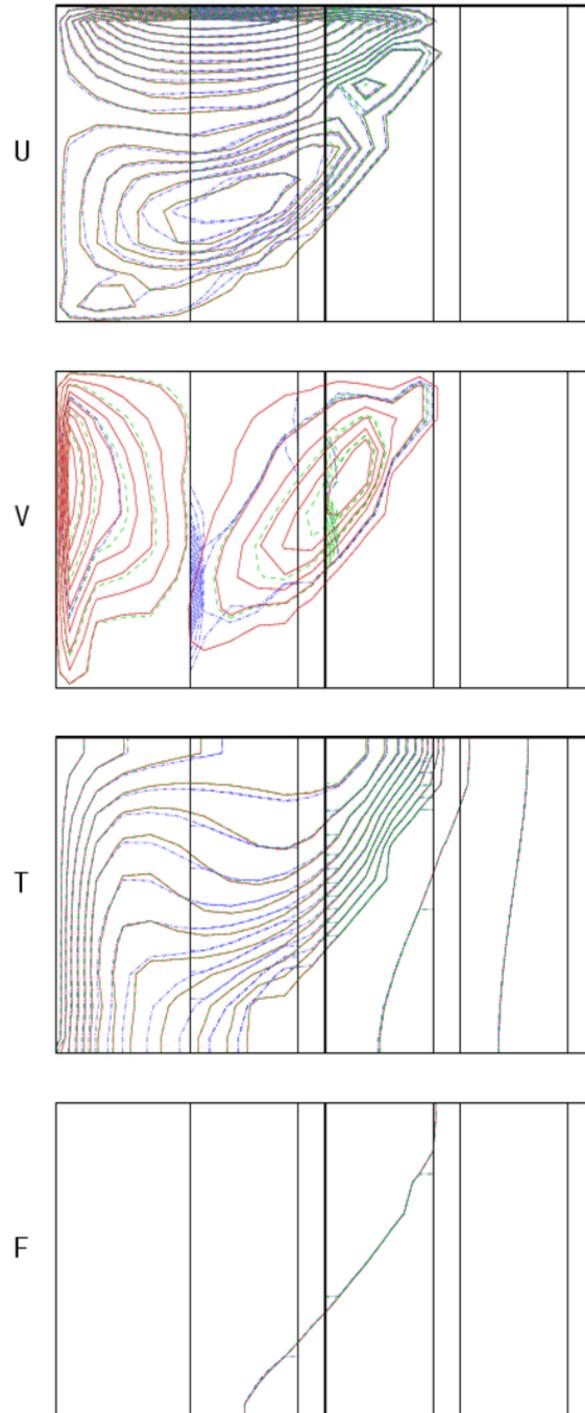


Figura 5.24: Contornos de velocidad, temperatura y fracción líquida en el instante 1140 segundos utilizando el método MASS. 1 subdominio en rojo, 2 subdominios en verde, 4 subdominios en azul

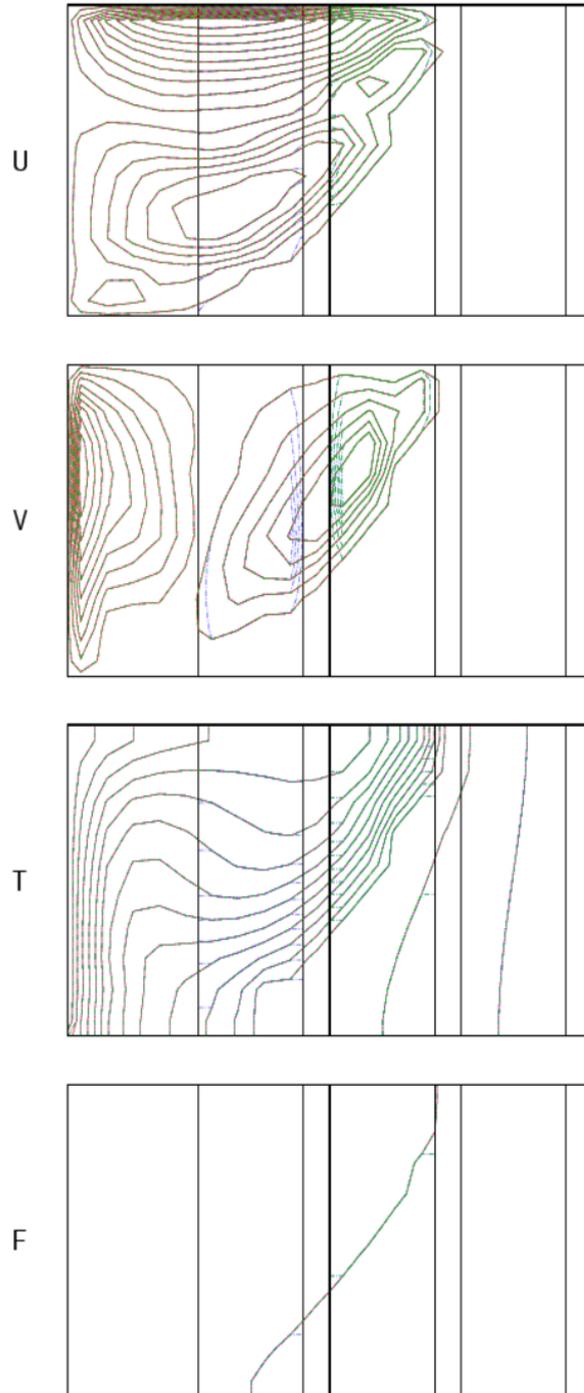


Figura 5.25: Contornos de velocidad, temperatura y fracción líquida en el instante 1140 segundos utilizando el método MOM. 1 subdominio en rojo, 2 subdominios en verde, 4 subdominios en azul

5.5 Mallas no coincidentes

Una de las ventajas de la utilización de subdominios para la resolución de problemas de cambio de fase sólido-líquido es que nos permite utilizar diferentes tamaños de malla. Así pues, en este apartado lo que hemos hecho es utilizar en la parte del dominio que sabemos que es líquida una malla de discretización espacial fina y en la parte del dominio que sabemos que es sólida una malla más basta, para a continuación paralelizar el problema.

En la Figura 5.26 y en la Tabla 5.10 aparece las dos discretizaciones espaciales que hemos utilizado en este caso. En ambos casos se puede observar como hemos dividido el tiempo analizado en cuatro tramos. Para estos tramos, si nos fijamos en la solución de referencia, sabemos, aproximadamente, donde se va a situar la interfase, y en función de esto, en primer lugar (*case1*) en la parte que es líquida hemos utilizado el mismo tamaño de malla que en el caso *c54* (ver Tabla 5.5) y en la parte que sabemos que es sólida un tamaño de malla aproximadamente 4 veces superior. En segundo lugar (*case2*) hemos doblado el mallado, tanto en la parte líquida como en la parte sólida.

tramo	líquido			sólido		
	lx_l [m]	vcx_l	vcy_l	lx_s [m]	vcx_s	vcy_s
<i>case1</i>						
0–300 segundos	0.0267	48	80	0.0623	28	20
300–600 segundos	0.0445	80	80	0.0445	20	20
600–840 segundos	0.55625	100	80	0.033375	15	20
840–1140 segundos	0.068975	124	80	0.020025	9	20
<i>case2</i>						
0–300 segundos	0.0267	96	160	0.0623	56	40
300–600 segundos	0.0445	160	160	0.0445	40	40
600–840 segundos	0.55625	200	160	0.033375	30	40
840–1140 segundos	0.068975	248	160	0.020025	18	40

Tabla 5.10: Descripción del mallado espacial en cada uno de los tramos cuando resolvemos el caso de fusión del galio utilizando mallas no coincidentes

Como ya hemos visto en el apartado 5.3 (a modo de ejemplo ver Figura 5.6), en este caso se alcanza un estado oscilatorio. Esto provoca que para realizar una visualización de algunas variables sea conveniente realizar un filtrado temporal de la señal. Este filtrado lo hemos realizado como se explica a continuación.

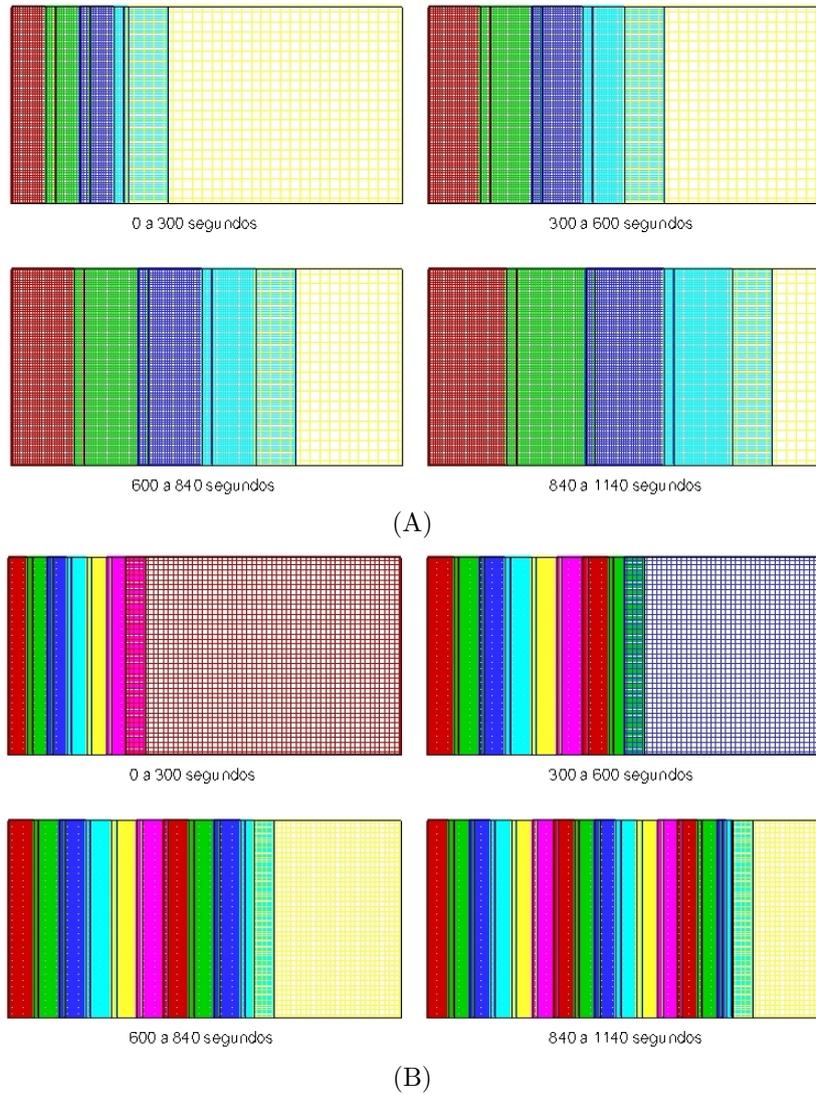


Figura 5.26: Descripción gráfica del mallado espacial en cada uno de los tramos cuando resolvemos el caso de fusión del galio utilizando mallas no coincidentes: (A) *case1*. (B) *case2*.

En la Figura 5.27 se muestra una señal que es claramente oscilatoria, como la que nos vamos encontrar en el caso que estamos analizando.

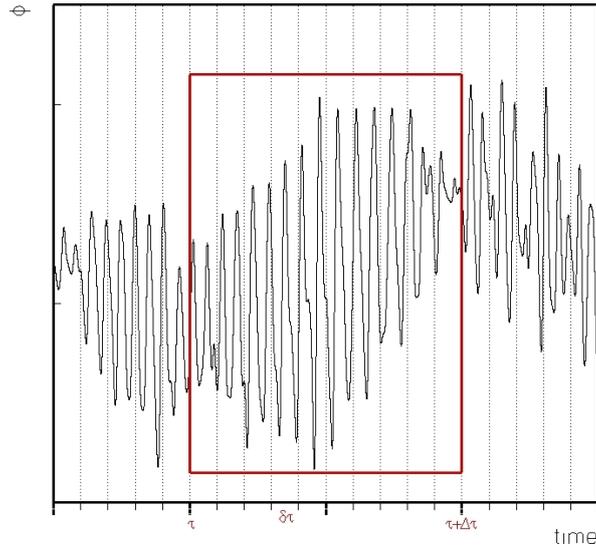


Figura 5.27: Filtrado de la una señal oscilatoria

Lo que hacemos es coger una ventana de anchura $\Delta\tau$ siendo

$$\Delta\tau = \kappa\delta\tau \quad (5.7)$$

y calculamos un valor promediado de la variable ϕ en esta ventana,

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta\tau} \sum \phi\delta\tau \quad (5.8)$$

simplificando, nos queda:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\kappa} \sum \phi \quad (5.9)$$

Después de realizar un estudio sobre las señales oscilatorias que obtenemos en el caso de fusión de galio, se ha llegado a la conclusión de que el valor del parámetro κ que nos da un filtrado suficiente sin perder demasiada información de la señal es 5000.

Una vez explicado esto, en la Figura 5.28 observamos la evolución temporal del número de Nusselt y de la fracción líquida. En el caso del número de Nusselt hemos realizado el filtrado tal y como hemos explicado antes.

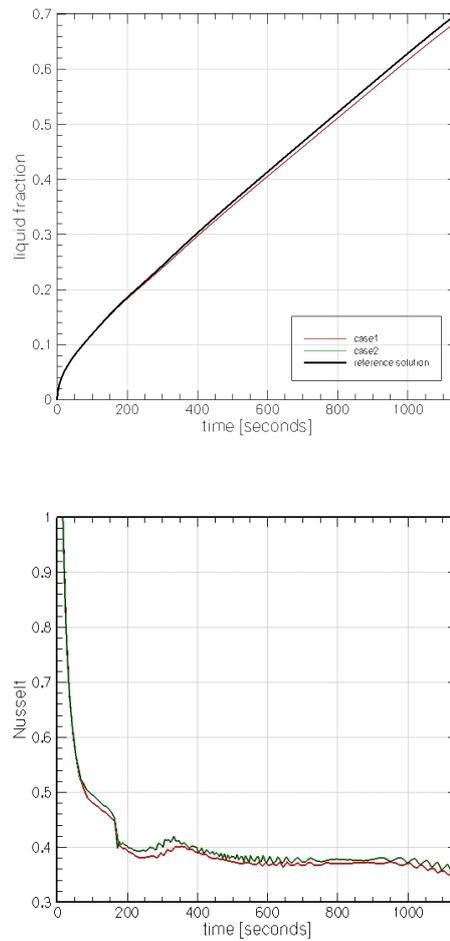


Figura 5.28: Evolución temporal de la fracción líquida y del número de Nusselt para los diferentes casos que se han estudiado. En el caso del número de Nusselt se ha realizado un filtrado de la señal. En rojo *case1*, en verde *case2* y en negro el caso de referencia

En la Figura 5.28 se observa que a simple vista no existen diferencias entre el caso de referencia y el *case2* pero en cambio el uso de una malla de discretización más basta en la parte líquida nos ha supuesto una reducción de 42,56% en el número de volúmenes de control lo que ha supuesto una reducción del 37,34% en el tiempo de cpu. Esto mismo aparece reflejado en la Tabla 5.11.

ref	Nu	$e_{Nu}(\%)$	FL	$e_{FL}(\%)$	ite	cpu (días)	$\Delta\text{cpu}(\%)$
<i>case1</i>	0.375910	13.127	0.687058	1.960	6.11	11.29	76.706
<i>case2</i>	0.331856	0.131	0.700822	0.004	7.07	30.37	37.335
<i>reference</i>	0.332290	-	0.700792	-	6.80	48.47	-

Tabla 5.11: Resultados obtenidos para los diferentes casos que se han ejecutado en el estudio de la fusión del galio utilizando mallas no coincidentes, siendo, **Nu** el número de Nusselt, e_{Nu} el error porcentual en el número de Nusselt con respecto a la solución de referencia, **FL** la fracción de líquido en el dominio, e_{FL} el error porcentual en la fracción de líquido en el dominio con respecto a la solución de referencia, **ite** el número de iteraciones por paso temporal, **cpu** el tiempo computacional en días y Δcpu la variación en el tiempo de cpu (en tanto por ciento) que se produce con respecto a la solución de referencia

En esta Tabla observamos, que utilizar el *case1* en vez del caso de referencia nos supone un error en el cálculo de la fracción líquida (valor que no es oscilatorio) del 1.96% pero tardamos muchos menos tiempo en obtener dicho resultado (solo 11 días en comparación con los 48 días del caso de referencia). En esta Tabla también se observa que las diferencias entre el *case2* y el caso de referencia son muy pequeñas (nunca superiores al 0.2%).

En las Figuras 5.29, 5.30, 5.31 y 5.32 se observa la evolución temporal de las velocidades, temperatura y fracción líquida en diferentes puntos del dominio (ver Figura 5.7). En este caso, cuando nos encontramos en la fase líquida la señal es oscilatoria por lo que también hemos realizado un filtrado de la señal con un valor de κ de 5000. En estas figuras volvemos a observar que las diferencias entre el *case2* y el caso de referencia son muy pequeñas, de hecho, a nivel gráfico no se observan.

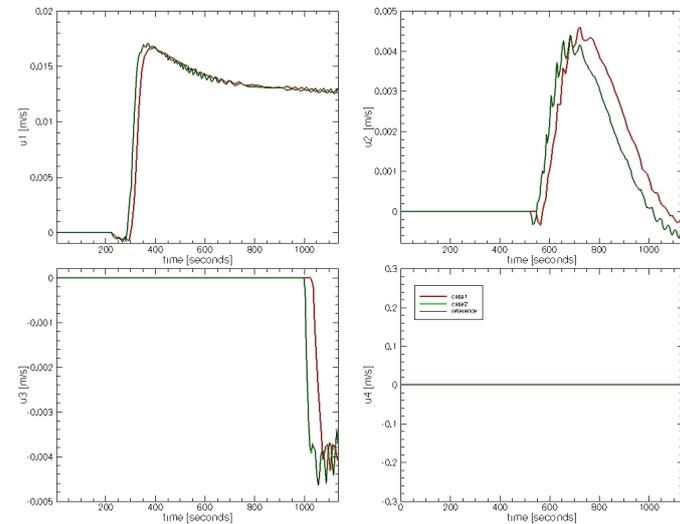


Figura 5.29: Evolución temporal de la velocidad longitudinal: *case1* en rojo, *case2* en verde y *solución de referencia* negro

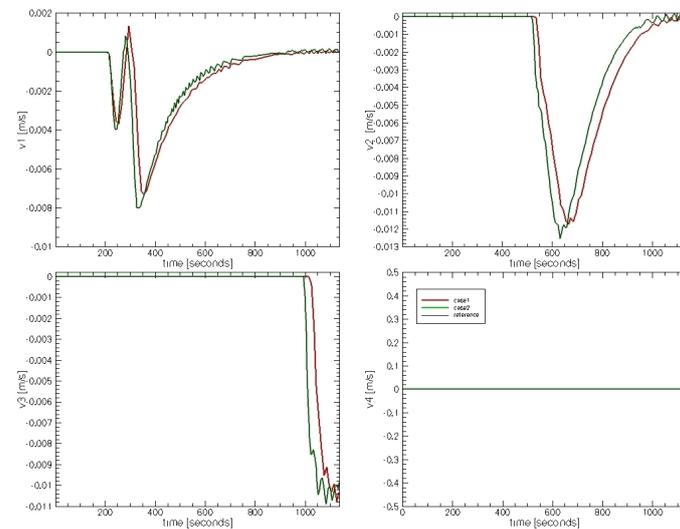


Figura 5.30: Evolución temporal de la velocidad tangencial: *case1* en rojo, *case2* en verde y *solución de referencia* negro

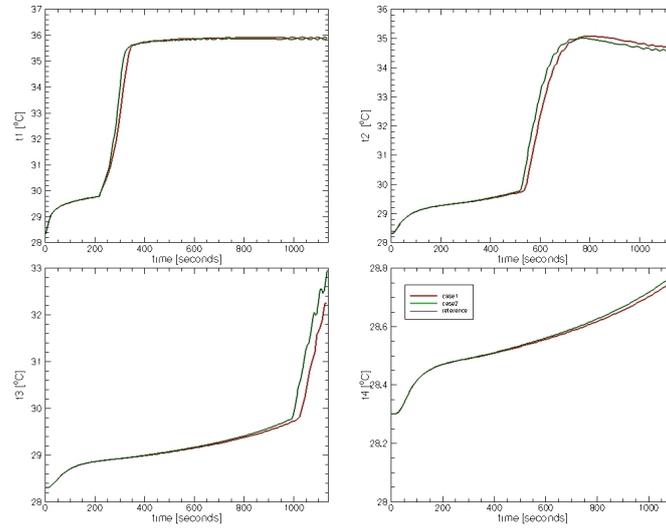


Figura 5.31: Evolución temporal de la temperatura: *case1* en rojo, *case2* en verde y *solución de referencia* negro

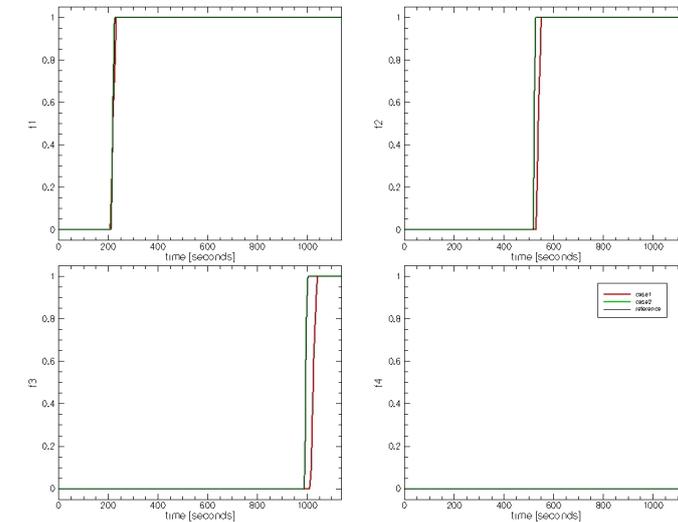


Figura 5.32: Evolución temporal de la fracción líquida: *case1* en rojo, *case2* en verde y *solución de referencia* negro

Esto mismo lo podemos volver a observar en las Figuras 5.35, 5.34 y 5.33. En estas figuras observamos los contornos de velocidad, temperatura y fracción líquida en diferentes instantes de tiempo. En el caso de la fracción líquida además de los resultados obtenidos por nosotros, aparece también la solución experimental obtenida por Gau y Viskanta [2], observando una buena consonancia entre los resultados. En el caso del contorno de temperatura aparecen los resultados del *case1*, del *case2* y del *caso de referencia*, mientras que en el caso de las líneas de corriente sólo aparecen representados el *case2* y el *caso de referencia*. En todos los casos existe muy poca diferencia entre utilizar el *case2* y el *caso de referencia*. Las diferencias con respecto al *case1* son un poco mayores pero el tiempo computacional requerido en este caso es muy inferior a los otros dos.

time	e_U	e_V	e_T
<i>case1 vs Reference case</i>			
300	0,1740	0,1340	6,82
480	0,0989	0,1270	6,43
600	0,1260	0,1220	9,41
720	0,0944	0,0855	9,94
840	0,1610	0,1660	17,6
1140	0,1520	0,1260	20,1
<i>case2 vs Reference case</i>			
300	0,00157	0,00150	0,0507
480	0,00582	0,00571	0,2550
600	0,00641	0,00638	0,3540
720	0,01040	0,00801	0,7400
840	0,01180	0,00915	0,8720
1140	0,01110	0,00825	1,2500

Tabla 5.12: Incrementos en tanto por ciento de las variables velocidad longitudinal, velocidad transversal y temperatura en diferentes instantes de tiempo del *case1* o el *case2* con respecto al caso de referencia

En la Tabla 5.12 aparecen representados los incrementos (en tanto por ciento) que se producen en las velocidades longitudinal y transversal y en la temperatura en diferentes instantes de tiempo. No se exponen los resultados para la fracción líquida porque a la hora de calcular los incrementos las herramientas que posee el sistema nos elimina los nodos en los que la variable permanece constante; en el caso de la fracción líquida el número de nodos en los que la variable permanece constante es muy elevado, por lo que el cálculo del error utilizando estas herramientas no resulta muy útil en el caso de esta variable. En esta Tabla volvemos a observar que en el *case2* las diferencias son muy pequeñas (nunca superiores al 1.25%, en cambio en el

case1 las diferencias son un poco superiores del orden de un grado de magnitud, pero se tiene que tener en consideración, como ya hemos ido comentando anteriormente que el tiempo de cpu es en este caso muy inferior (aproximadamente un 77%).

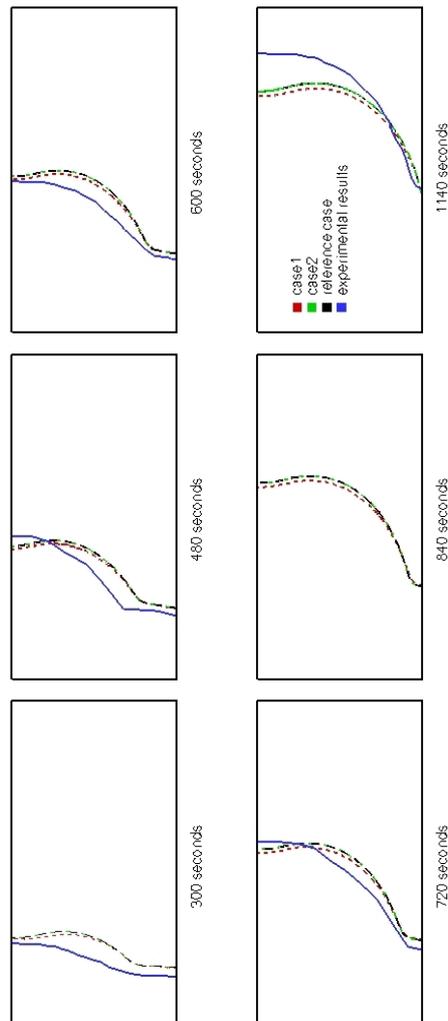


Figura 5.33: Contorno de la fracción líquida en diferentes instantes de tiempo: *case1* en rojo, *case2* en verde, *solución de referencia* negro, *resultado experimental* en azul

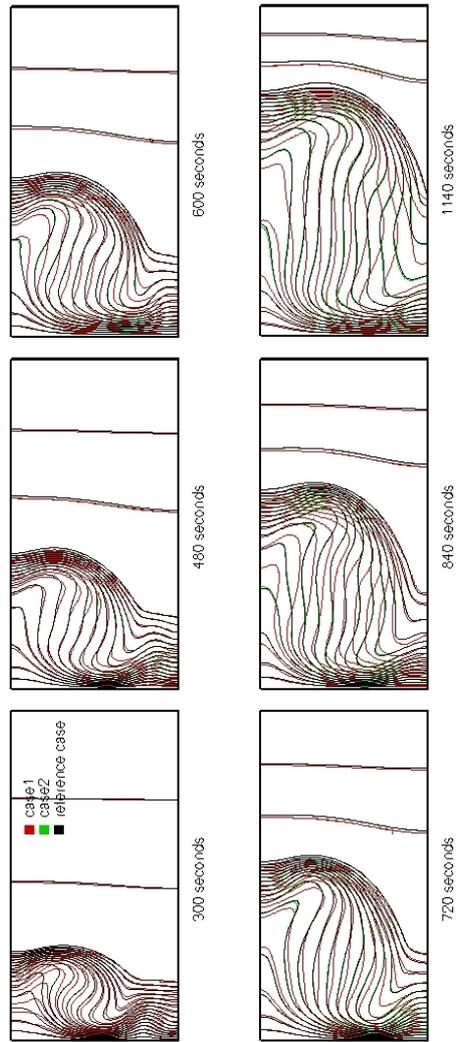


Figura 5.34: Contorno de temperatura en diferentes instantes de tiempo: *case1* en rojo, *case2* en verde y *solución de referencia* negro

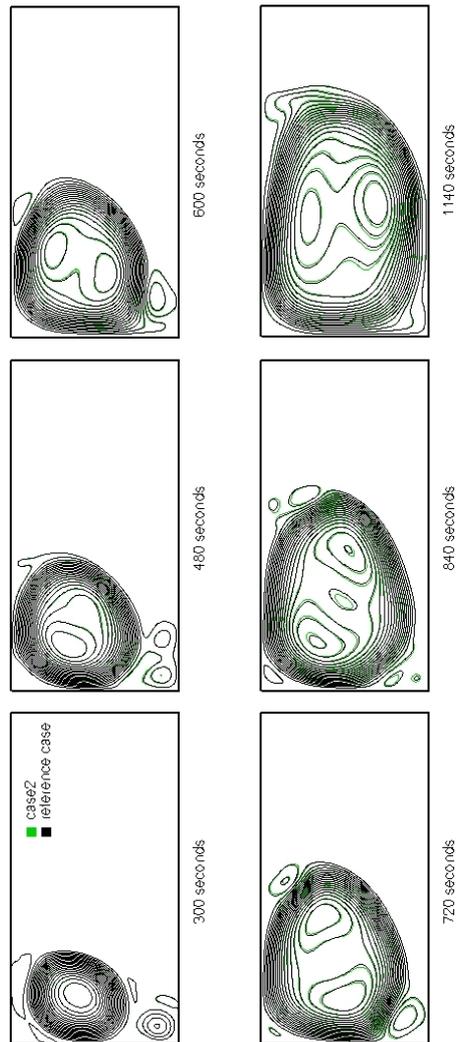


Figura 5.35: Líneas de corriente en diferentes instantes de tiempo: *case2* en verde y *solución de referencia* negro

5.6 Conclusiones

Las discrepancias observadas entre la solución obtenida con un único subdominio y la obtenida con dos subdominios cuando se utiliza el método conservativo (MASS) expuesto en el capítulo anterior nos hicieron pensar en una nueva opción a la hora de pasar información entre los diferentes subdominios. Este nuevo método basado en la presión recibió el nombre de método MOM, y es un método simple y fácil de implementar.

Si comparamos ambos métodos, tomando un mismo caso y resolviéndolo usando 1, 2 y 4 subdominios, observamos que si bien el tiempo computacional es en general inferior si utilizamos el método MASS, las diferencias que se producen en la fracción de líquido en el dominio y en el número de Nusselt en la pared caliente son muy superiores para el método MASS (3,2%) que para el método MOM (0.038%). Además, comentar que si seguimos doblando el mallado y tratamos de resolver el caso con el método MASS nos encontramos con graves problemas de convergencia si utilizamos 4 y 8 subdominios, cosa que no pasa si utilizamos el método MOM. Es por todo esto, que finalmente se ha escogido el método MOM para obtener la solución de referencia.

Hemos realizado un estudio de convergencia utilizando subdominios y paralelizando el problema siempre que ha sido necesario, se observa que se alcanza un estado oscilatorio en la fase líquida y que los resultados se aproximan de manera progresiva, y según el esquema numérico SMART, hacia una solución asintótica.

La malla más fina de este estudio de convergencia es la hemos denominado solución de referencia, que hemos obtenido utilizando el método MOM, con una discretización espacial de 320x160 volúmenes de control y con 1140000 pasos temporales. Con el objetivo de poder resolver este problema, lo hemos paralelizado utilizando 8 máquinas. A pesar de ello, el tiempo computacional necesario para obtener la solución convergida ha sido de 48 días.

Una de las ventajas de la utilización de subdominios para la resolución de problemas de cambio de fase sólido-líquido es que nos permite utilizar diferentes tamaños de malla según la zona o bloque de análisis. Es por ello que, en la parte del dominio que sabemos que es líquida se emplea una malla de discretización espacial fina. En la parte del dominio que sabemos que es sólida se emplea una malla más basta. Hemos estudiado dos casos: El *case2* se correspondería, en la parte líquida, con el tamaño de malla del caso de referencia, mientras que en el *case1* hemos sido menos exigentes y hemos utilizado una malla inferior (tanto en la parte sólida como en la líquida). Comentar que no existen apenas diferencias entre el *case2* y el caso de referencia. En cambio, el hecho de utilizar mallas no coincidentes nos ha supuesto una reducción del tiempo de cpu del 37%. Las diferencias entre el *case1* y

el caso de referencia son superiores, pero se debe tener en cuenta que en este caso la reducción en el tiempo computacional es del 77%. Es por todo esto, que para realizar el estudio paramétrico que expondremos en el siguiente capítulo se ha optado por este tamaño de malla.

5.7 Nomenclatura

a_P	coeficiente de la ecuación algebraica en P
b_P	término fuente de la ecuación algebraica en el nodo P
cpu	tiempo computacional
CV	Volumen de control
e_D	error computacional
f_i	fracción líquida (como variable local)
FL	fracción líquida (como valor global)
ite	número de iteraciones totales
ndt	número de pasos temporales
$NPPP$	Número de pasadas por la ecuación de corrección de presiones
$NPSCAL$	Número de pasadas por los campos escalares
Nu	Número de Nusselt
P	Presión
p_d	presión dinámica
SBD	Subdominio
T	temperatura
U	velocidad longitudinal
V	velocidad transversal
vc_x	número de volúmenes de control en x
vc_y	número de volúmenes de control en y

Símbolos griegos

$n\Delta t_{dynamic}$	número de veces que se utiliza el incremento de tiempo dinámico
$\Delta\tau$	anchura de la señal que se quiere filtrar
$\delta\tau$	paso temporal
κ	parámetro de filtrado

Bibliografía

- [1] C.D. Pérez Segarra. Subdomain methods. CTTC Internal Report, 2002.
- [2] C. Gau and R. Viskanta. Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall. *ASME J. Heat Transfer*, 108:174–181, 1986.

Capítulo 6

Estudio paramétrico

En este capítulo realizamos un extenso estudio paramétrico, donde se tiene en cuenta variaciones tanto de parámetros geométricos, como de condiciones de contorno y de propiedades termofísicas. El estudio pretende mostrar las posibilidades que ofrece la simulación numérica y comprender mejor el fenómeno del cambio de fase sólido-líquido.

Este estudio paramétrico se realiza sobre el caso de fusión del galio. Las variaciones las tomaremos respecto a un caso que denominaremos caso de referencia y que se corresponderá con el problema que hemos estado analizando a lo largo de esta tesis.

6.1 Introducción

Basándonos en el código desarrollado y después de un cuidadoso proceso de verificación (errores de convergencia, errores de discretización, errores de programación, ...) y de validación (contrastación con resultados experimentales), en este capítulo se realizará un extenso estudio paramétrico. Se tendrá en cuenta variaciones tanto de parámetros geométricos, como de condiciones de contorno y de propiedades termofísicas. El estudio muestra las posibilidades que ofrece la simulación numérica y ayuda a comprender mejor la fenomenología del cambio de fase.

El estudio paramétrico lo vamos a realizar entorno al caso de fusión de un metal puro, el galio, dentro de una cavidad rectangular bidimensional. Los contornos superior e inferior son adiabáticos. En el instante de tiempo inicial todo el dominio se encuentra a una temperatura T_0 , inferior a la temperatura de fusión, T_m . En el instante de tiempo inicial, $t = 0$, la temperatura de la pared izquierda aumenta repentinamente por encima del punto de fusión (ver Figura 6.1). El caso que tomaremos como caso de referencia es el que hemos estado tratando a lo largo de este trabajo, es decir, tomando un recinto con unas dimensiones alto x ancho de 4.45x8.89 cm respectivamente, siendo la relación de aspecto 0.5.

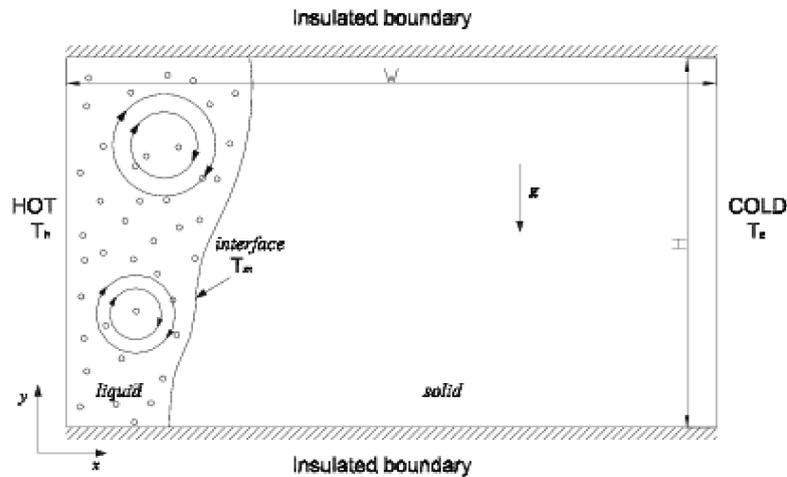


Figura 6.1: Configuración del problema de fusión del galio

Las propiedades termofísicas, condiciones de contorno y los números adimensionales se muestran en la Tabla???. Estos parámetros adimensionales los

hemos calculado como sigue:

$$Ra = \frac{g\beta(T_h - T_m)H^3}{\nu\alpha} \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (6.1)$$

siendo la viscosidad cinemática $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ y la difusividad $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c_p}$.

$$St_l = \frac{c_p(T_h - T_m)}{L} \quad St_s = \frac{c_p(T_m - T_c)}{L} \quad (6.2)$$

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidades
Altura	H	0.0445	m
Anchura	W	0.0889	m
Relación de aspecto	A_R	0.501	–
Temperatura de fusión	T_m	29.78	$^{\circ}C$
Temperatura de la pared caliente	T_h	38	$^{\circ}C$
Temperatura de la pared fría	$T_c = T_0$	28.3	$^{\circ}C$
Densidad	ρ	6093	kg/m^3
Calor específico	c_p	381.5	J/kgK
Viscosidad dinámica	μ	$1.81 \cdot 10^{-3}$	kg/ms
Conductividad térmica	λ	32	W/mK
Coefficiente de expansión volumétrico	β	$1.2 \cdot 10^{-4}$	K^{-1}
Calor latente de fusión	L	$8.106 \cdot 10^4$	J/kg
Número de Rayleigh	Ra	$2.1 \cdot 10^5$	–
Número de Prandtl	Pr	0.0216	–
Número de Stefan del líquido	St_l	$3.87 \cdot 10^{-2}$	–
Número de Stefan del sólido	St_s	$6.97 \cdot 10^{-3}$	–

Tabla 6.1: Definición del caso de referencia

Los resultados que utilizaremos para la realización del estudio paramétrico son el tiempo que tarda en fundirse una cierta porción del dominio y la energía absorbida en este tiempo. Estos dos valores los daremos en forma adimensional.

El valor adimensional del tiempo que tarda en fundirse una cierta una cierta porción del dominio lo representaremos en términos del número de Fourier definido como sigue:

$$Fo = \frac{t}{\frac{\rho c_p}{\lambda} \cdot H^2} \quad (6.3)$$

El valor adimensional de la energía absorbida, se ha definido en la forma:

$$Ea^{ad} = \frac{10^5 Ea}{\rho [c_p (T_h - T_c) + L] HW} \quad (6.4)$$

La malla de discretización del caso de referencia viene definida en la Tabla 5.10 del capítulo anterior como *case1*, por lo que observamos que hemos primado un tiempo de cálculo razonable respecto a la precisión requerida. Este es un factor importante en este caso pues el número de veces que deberemos ejecutar el problema es elevado.

6.2 Relación de aspecto

En primer lugar vamos a estudiar como afecta sobre nuestro problema el hecho de variar la relación de aspecto. Con este objetivo se han estudiado 5 casos. En la Tabla 6.2 se muestran los resultados obtenidos en todos los casos analizados, junto con los resultados obtenidos en el caso de referencia. Estos mismos resultados aparecen representados gráficamente en la Figura 6.2. En la Tabla observamos que al ir aumentando la relación de aspecto esto supondrá un aumento en el número de Rayleigh.

En la Figura 6.2A observamos claramente como a medida que aumenta la relación de caja (aumenta H manteniendo W constante) el tiempo que se tarda en fundir una cierta porción del dominio disminuye. Para las relaciones de aspecto más bajas (0.286 y 0.5), estas diferencias son acentuadas, pero a medida que aumentamos A_R estas diferencias se hacen menores.

En la Figura 6.2B se ve como a medida que aumenta el *Aspect Ratio* la energía absorbida adimensional (E_a^{ad}) cuando ha fundido una cierta parte del dominio también aumenta.

En la Figura 6.3 se muestran las líneas de corriente cuando han pasado 300 segundos en cada uno de los casos analizados. En esta figura se puede ver claramente como el número de bucles va aumentando a medida que aumenta la relación de aspecto; de esta manera, cuando el A_R es de 0.286 claramente solo existe un bucle de convección; en cambio, cuando el A_R es de 1.5 se ve claramente que el número de recirculaciones es 4.

En la Figura 6.4A observamos la evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio. En esta figura podemos ver que hasta que no han pasado 400 segundos las diferencias en este valor no empiezan a ser importantes. Una vez pasado este tiempo en un principio la mayor porción de fundido se corresponde con la relación de aspecto menor, es decir el caso A1, pero a medida que va avanzando en tiempo, la pendiente de la curva correspondiente a este caso va disminuyendo mientras que la de la curva correspondiente al caso de referencia (A_R 0.5) va aumentando, de manera

6.2. Relación de aspecto

	$H[m]$	A_R	Rayleigh
A1	0.0254	0.286	$3.89 \cdot 10^4$
ref	0.0445	0.501	$2.09 \cdot 10^5$
A2	0.0635	0.714	$6.05 \cdot 10^5$
A3	0.0889	1.000	$1.66 \cdot 10^6$
A4	0.13335	1.500	$5.61 \cdot 10^6$

	Fourier					E _a ^{ad}						
FL	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%
A1	1.579	3.123	6.546	10.101	17.015	-	0.255	0.382	0.636	0.891	1.280	-
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934
A2	0.252	0.497	1.059	1.744	2.759	3.800	0.639	0.956	1.592	2.234	3.206	4.193
A3	0.128	0.253	0.547	0.868	1.430	-	0.895	1.340	2.231	3.128	4.493	-
A4	0.057	0.112	0.239	0.387	0.622	-	1.342	2.009	3.346	4.690	6.733	-

Tabla 6.2: Resultados obtenidos cuando vamos variando la relación de aspecto. En negrita los resultados correspondientes al caso de referencia

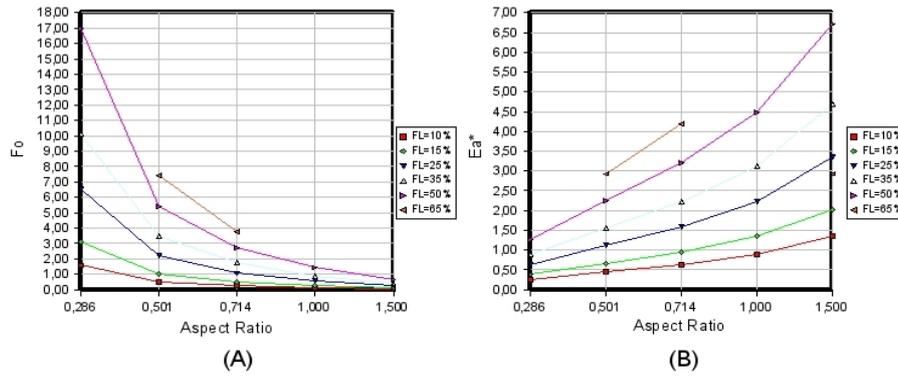


Figura 6.2: (A) Tiempo adimensional (Fourier) que tarda en fundirse una cierta porción del dominio para cada uno de los casos analizados. (B) Cantidad de energía absorbida (adimensional) en el tiempo anterior.

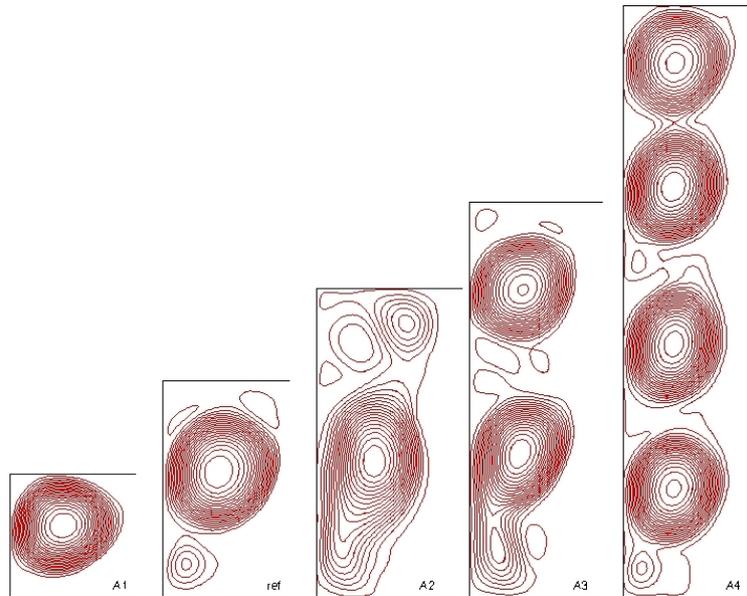


Figura 6.3: Líneas de corriente para los diferentes casos que se muestran en la Tabla 6.2 cuando han pasado 300 segundos

que al final, cuando han pasado los 19 minutos, la mayor fracción de sólido fundido se corresponde para la relación de aspecto es de 0.5. Para las relaciones de aspecto 1 y 1.5 estas curvas son prácticamente iguales.

Por otra parte, en la Figura 6.4B se observa la evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente. Estas señales, que son claramente oscilatorias, han sido filtradas con un valor de κ (número de veces que se repite el incremento temporal en la ventana de filtrado) de 5000. Con respecto a esta oscilación, cabe comentar que a medida que va aumentando la relación de aspecto, va aumentando la oscilación de la señal. De esta manera, para el caso A1 no existe apenas oscilación (para la señal sin filtrar) y en cambio para el caso A4 aún y filtrado se observan bastantes oscilaciones. En cuanto a lo que se refiere al número de Nusselt en la pared caliente, comentar que en todos los casos, de 0 a 100 segundos se produce un descenso de este parámetro, para a continuación mantenerse prácticamente constante alrededor de un cierto valor, que va aumentando a medida que aumenta la relación de aspecto.

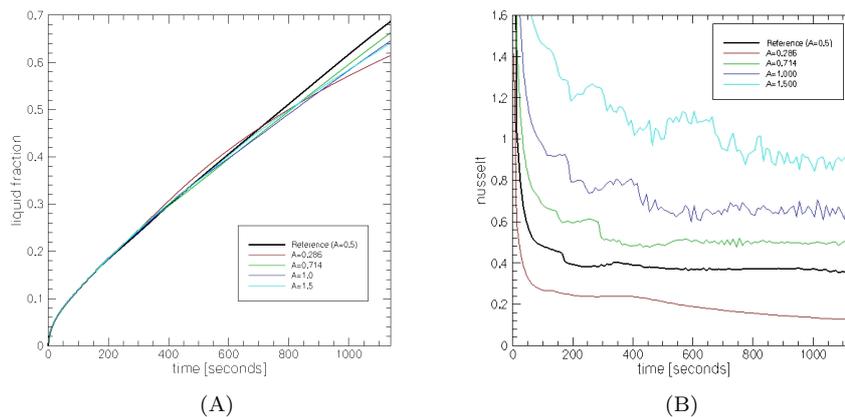


Figura 6.4: (A) Evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio para los diferentes casos analizados (B) Evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente.

Finalmente, y dada la naturaleza oscilatoria de la señal, se ha realizado en este caso un estudio de la transformada de Fourier (FFT). Este estudio nos permite pasar una señal del espacio temporal al frecuencial y de esta manera podemos conocer, entre otras cosas, la amplitud de la señal a diferentes frecuencias [1]. De la realización de este estudio hemos llegado a la conclusión de que cuando las frecuencias son bajas la amplitud de onda es elevada, en cambio, para frecuencias elevadas (200-1000 Hz)

las amplitudes son muy bajas (ruido). Además, a medida que aumenta la relación de aspecto, esta amplitud a frecuencias elevadas va aumentando; esto lo observamos de manera gráfica en la Figura 6.5.

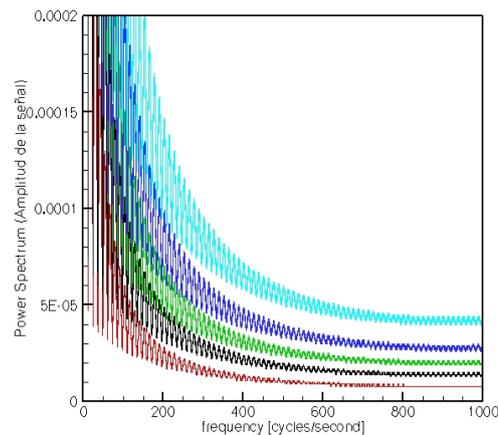


Figura 6.5: Amplitud de las diferentes señales descritas en este estudio paramétrico en el espectro de frecuencias

6.3 Condiciones de contorno

A continuación vamos a ver como afecta sobre nuestro problema variar las condiciones de contorno. En primer lugar variaremos la temperatura de la pared caliente. Al ir aumentando T_h aumentarán tanto el número de Rayleigh como el número de Stefan de la parte líquida. En segundo lugar iremos variando la temperatura de la pared fría, con lo que variará el número de Stefan de fase sólida (al disminuir T_c aumentará el número de Stefan de la zona sólida).

6.3.1 Temperatura de la pared caliente, T_h

En la Tabla 6.3 aparecen los resultados obtenidos en todos los casos analizados. Estos mismos resultados aparecen representados gráficamente en la Figura 6.6.

En la Figura 6.6A se ve como a medida que aumenta la temperatura de la pared caliente el tiempo que tarda en fundirse una cierta porción del dominio evidentemente

disminuye.

En la Figura 6.6B observamos como a medida que aumenta esta temperatura la energía absorbida adimensional (E_a^{ad}) cuando ha fundido una cierta parte del dominio disminuye, pero esta disminución es muy débil no siendo especialmente relevante este parámetro en la energía acumulada.

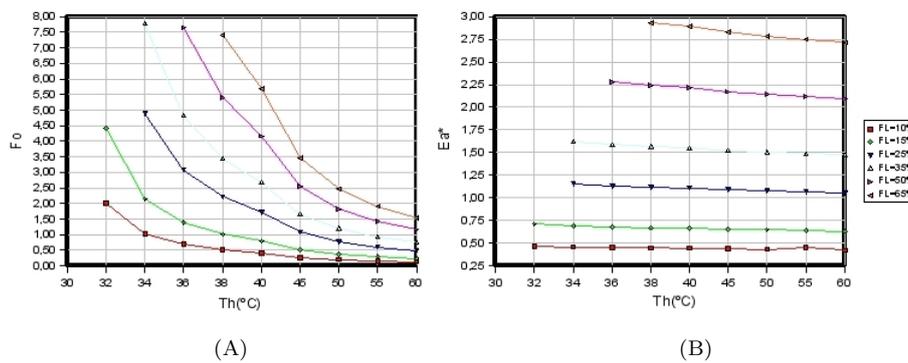


Figura 6.6: (A) Tiempo adimensional (Fourier) que tarda en fundirse una cierta porción del dominio para cada uno de los casos analizados. (B) Cantidad de energía absorbida (adimensional) en el tiempo anterior.

En la Figura 6.7 se muestran las líneas de corriente cuando han pasado 300 segundos en cada uno de los casos analizados. En esta figura se puede ver claramente como a medida que va aumentando T_h el tiempo que tarda en fundirse el material evidentemente disminuye. Cuando nos encontramos en el caso B1, como la temperatura de la pared caliente es muy próxima a la de fusión, cuando han pasado 300 segundos aún nos encontramos con que sólo se está produciendo un fenómeno conductivo. Ya en el siguiente caso, empiezan a aparecer los bucles de convección que según el caso son 2 o 3.

Finalmente, En la Figura 6.8A observamos la evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio. En esta figura observamos que a partir del caso B6 llegaremos a una situación en que todo el dominio está en estado líquido. En cambio en el caso B1 tan solo llega a fundirse el 7% del dominio. Por otra parte, en la Figura 6.8B se observa la evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente. Estas señales, que son claramente oscilatorias, han sido filtradas con un valor de κ de 5000. En este caso, podemos decir que las diferencias con respecto al número de Nusselt en la pared caliente son pequeñas en todos los casos exceptuando el caso B1.

	$T_h [^\circ C]$	Rayleigh	St_h
B1	30	$5.58 \cdot 10^3$	$1.04 \cdot 10^{-3}$
B2	32	$5.63 \cdot 10^4$	$1.04 \cdot 10^{-2}$
B3	34	$1.07 \cdot 10^5$	$1.99 \cdot 10^{-2}$
B4	36	$1.58 \cdot 10^5$	$2.93 \cdot 10^{-2}$
ref	38	$2.09 \cdot 10^5$	$3.87 \cdot 10^{-2}$

FL	Fourier									En^{ad}				
	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%		
B1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
B2	2.014	4.408	-	-	-	-	0.468	0.709	-	-	-	-		
B3	1.031	2.138	4.885	7.780	-	-	0.457	0.687	1.152	1.624	-	-		
B4	0.689	1.385	3.078	4.827	7.647	-	0.452	0.677	1.130	1.587	2.281	-		
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934		
B5	0.409	0.793	1.718	2.677	4.173	5.699	0.445	0.666	1.108	1.551	2.220	2.899		
B6	0.268	0.506	1.081	1.661	2.563	3.476	0.438	0.656	1.090	1.522	2.174	2.832		
B7	0.198	0.370	0.780	1.197	1.834	2.468	0.432	0.647	1.077	1.506	2.147	2.785		
B8	0.157	0.289	0.605	0.931	1.427	1.911	0.430	0.640	1.064	1.488	2.121	2.749		
B9	0.130	0.236	0.492	0.759	1.153	1.544	0.422	0.633	1.052	1.474	2.096	2.714		

Tabla 6.3: Resultados obtenidos cuando vamos variando la condición de contorno de contorno de pared caliente. En negra el resultado de referencia

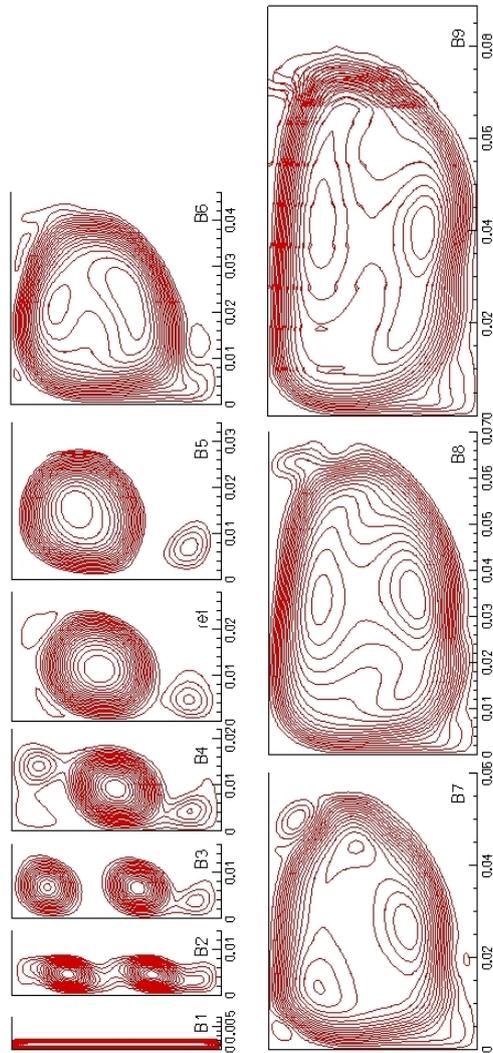


Figura 6.7: Líneas de corriente para los diferentes casos que se muestran en la Tabla 6.3 cuando han pasado 300 segundos

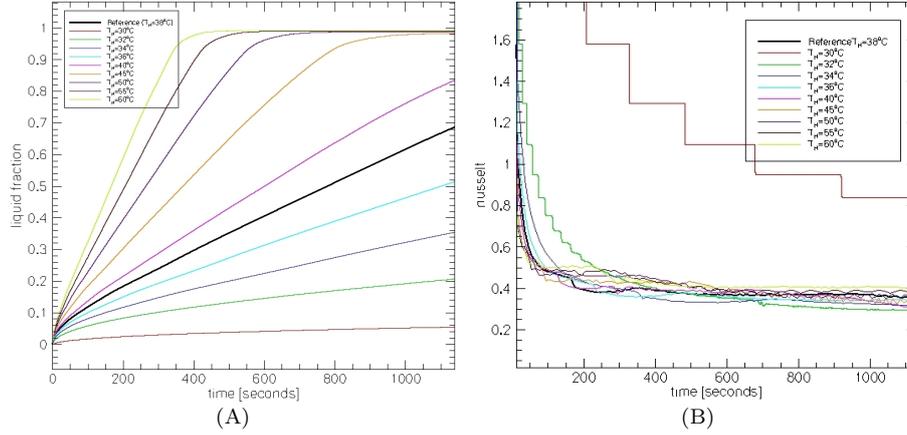


Figura 6.8: (A) Evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio para los diferentes casos analizados (B) Evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente.

6.3.2 Temperatura de la pared fría, T_c

En la Tabla 6.4 se muestran los resultados obtenidos en todos los casos analizados. Se observa como una reducción de la temperatura en la pared fría provoca variaciones en el número de Stefan de la fase sólida. Estos mismos resultados aparecen representados gráficamente en la Figura 6.9. En todos los casos analizados la temperatura inicial de todo el dominio se corresponde con la temperatura de la pared fría. Por otro lado, comentar que el primer caso que se ha analizado (C1) se corresponde a la situación en que todo el dominio permanece líquido durante todo el proceso, pues la temperatura de la pared fría es superior a la temperatura de fusión del material.

En la Figura 6.9A observamos como a medida que aumenta la temperatura de la pared fría el tiempo que tarda en fundirse una cierta porción del dominio evidentemente disminuye.

En la Figura 6.9B se puede ver como a medida que aumenta esta temperatura la energía absorbida adimensional (E_a^{ad}) cuando ha fundido una cierta parte del dominio también disminuye.

Finalmente, en la Figura 6.10A observamos la evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio. En esta figura observamos que a medida que disminuye la temperatura de la pared fría, el dominio funde de manera más lenta. Así pues, si nos

6.3. Condiciones de contorno

	$T_c [^\circ C]$		St_s	
C1	30.0	todo el dominio es líquido		
C2	29.7	3.77·10 ⁻⁴		
C3	29.0	3.67·10 ⁻³		
ref	28.3	6.97·10⁻³		
C4	26.0	1.78·10 ⁻²		
C5	24.0	2.72·10 ⁻²		
C6	22.0	3.66·10 ⁻²		
C7	20.0	4.60·10 ⁻²		
C8	15.0	6.96·10 ⁻²		
C9	10.0	9.31·10 ⁻²		

FL	Fourier							Ea ^{ad}						
	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%		
C1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-		
C2	0.500	0.986	2.155	3.348	5.227	7.099	0.437	0.656	1.093	1.530	2.185	2.837		
C3	0.507	1.000	2.185	3.398	5.318	7.253	0.443	0.663	1.105	1.548	2.215	2.886		
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934		
C4	0.541	1.061	2.319	3.626	5.733	-	0.466	0.696	1.159	1.628	2.350	-		
C5	0.565	1.104	2.414	3.791	6.040	-	0.482	0.718	1.197	1.686	2.450	-		
C6	0.589	1.148	2.513	3.969	6.377	-	0.498	0.741	1.236	1.747	2.560	-		
C7	0.614	1.195	2.618	4.159	6.746	-	0.515	0.765	1.278	1.813	2.681	-		
C8	0.680	1.319	2.910	4.716	7.859	-	0.559	0.828	1.391	2.002	3.043	-		
C9	0.754	1.456	3.252	5.420	-	-	0.606	0.896	1.552	2.237	-	-		

Tabla 6.4: Resultados obtenidos cuando vamos variando la condición de contorno de pared fría. En negrita el resultado de referencia

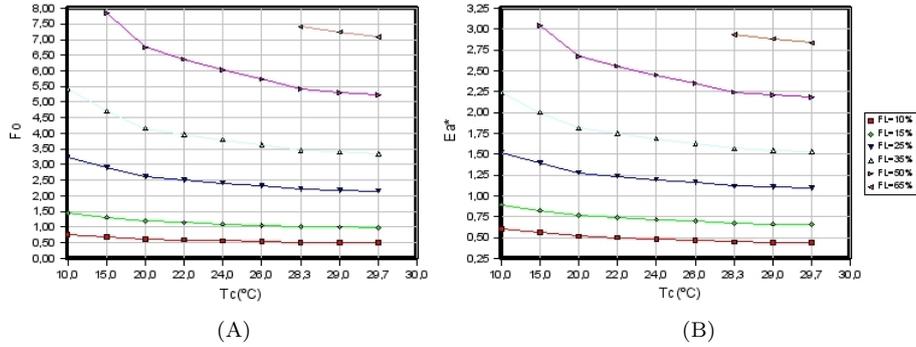


Figura 6.9: (A) Tiempo adimensional (Fourier) que tarda en fundirse una cierta porción del dominio para cada uno de los casos analizados. (B) Cantidad de energía absorbida (adimensional) en el tiempo anterior.

fijamos en la fracción de líquido cuando han pasado 19 minutos, podemos observar que esta variable dependerá linealmente de T_c . Por otra parte, en la Figura 6.10B se observa la evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente. Como en el caso anterior esta magnitud varía oscilatoriamente en el tiempo por lo que ha sido filtrada en todos los casos con un valor de κ de 5000. En este caso, podemos decir que las diferencias con respecto al número de Nusselt en la pared caliente son pequeñas en todos los casos exceptuando el caso C1. Comentar que ha medida que disminuye el valor de T_c el tiempo que tarda en alcanzar el valor alrededor del cual oscilará la señal es mayor.

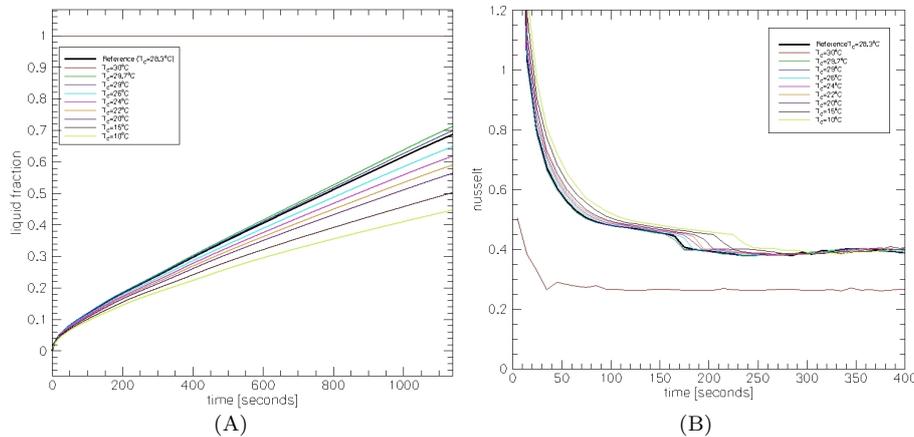


Figura 6.10: (A) Evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio para los diferentes casos analizados (B) Evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente.

6.4 Propiedades termofísicas

Para finalizar este estudio paramétrico vamos a ver como afecta una variación del $\pm 10\%$ en las diferentes propiedades termofísicas. Las propiedades que hemos considerado en este estudio paramétrico son: la densidad ρ , la capacidad calorífica c_p , la viscosidad μ , la conductividad térmica λ y el coeficiente de expansión volumétrico β .

En las Tablas 6.5, 6.6, 6.7, 6.8 y 6.9 se muestran los resultados obtenidos en todos los casos analizados, observando que:

- el aumento en la densidad supondrá un aumento en el número de Rayleigh,
- la variación de la capacidad calorífica afectará sobre los cuatro números adimensionales: a medida que aumenta c_p aumentará el número de Rayleigh, el de Prandtl y el de Stefan tanto en la fase sólida como en la líquida,
- el aumento de la viscosidad provocará una disminución en el número de Rayleigh y un aumento en el número de Prandtl,
- el aumento de conductividad térmica (magnitud que hemos considerado que no varía pero que sabemos que es claramente anisotrópica) provocará disminuciones tanto en el número de Rayleigh como en el de Prandtl,

- el aumento del coeficiente volumétrico de expansión causará un aumento en el número de Rayleigh.

Estos mismos resultados aparecen representados gráficamente en las Figuras 6.11 y 6.12. De estos gráficos podemos sacar las siguientes conclusiones:

- A medida que aumenta la densidad el número de Fourier y la energía acumulada adimensional disminuyen (Figura 6.11).
- Cuando aumenta la capacidad calorífica, Fo y E_A^{ad} disminuyen (Figura 6.11).
- El aumento de la viscosidad provocará un aumento en los dos parámetros adimensionales (Figura 6.11).
- Un incremento de $\pm 10\%$ de la conductividad causará un incremento en el valor de Fourier y de la energía acumulada (Figura 6.12).
- El aumento de β provocará una disminución de Fo y E_A^{ad} (Figura 6.12).

En todos estos casos la variación de la energía acumulada adimensional es como máximo del orden de 10^{-4} por lo que gráficamente no resulta perceptible. Además, es claro como el aumento del número de Rayleigh provocará una disminución en el número de Fourier.

Finalmente, en las Figuras 6.13 y 6.14 observamos, respectivamente, la evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio y la del número de Nusselt en la pared caliente en todos los casos analizados. En estas figuras observamos que los factores que más influyen son la densidad y la conductividad térmica seguidos por la capacidad calorífica, el coeficiente de expansión volumétrico y finalmente, el que menos influye, la viscosidad. Si nos fijamos en los que más influyen, es decir, en las gráficas de la densidad y de la conductividad térmica, observamos que la influencia es de signo contrario. Esto es, a medida que aumenta la densidad la fracción de líquido aumenta y el número de Nusselt en la pared caliente disminuye, mientras que para la conductividad térmica, a medida que la aumentamos la fracción de líquido disminuye y el número de Nusselt aumenta. En la Tabla 6.10 podemos ver las influencias de las diferentes propiedades sobre la fracción de líquido en el dominio y sobre el número de Nusselt en la pared caliente.

	ρ [kg/m ³]		Rayleigh	
D1	6702.3	2.52·10 ⁵		
D2	6397.7	2.30·10 ⁵		
ref	6093	2.09·10⁵		
D3	5788.4	1.88·10 ⁵		
D4	5483.7	1.69·10 ⁵		

FL	Fourier							Ea ^{rad}						
	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%		
D1	0.510	0.988	2.140	3.320	5.182	7.073	0.448	0.671	1.117	1.565	2.242	2.930		
D2	0.513	1.001	2.177	3.382	5.290	7.229	0.448	0.671	1.117	1.566	2.244	2.932		
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934		
D3	0.517	1.027	2.257	3.521	5.537	7.588	0.448	0.671	1.118	1.567	2.246	2.937		
D4	0.520	1.040	2.301	3.596	5.661	7.762	0.448	0.671	1.118	1.567	2.246	2.938		

Tabla 6.5: Resultados obtenidos cuando vamos variando la densidad del material. En negra el resultado de referencia

	c_p [J/kgK]	Rayleigh	Prandtl	St_s	St_l
E1	419.650	$2.29 \cdot 10^5$	0.0237	0.0077	0.04256
E2	400.575	$2.19 \cdot 10^5$	0.0227	0.0073	0.04062
ref	381.5	$2.09 \cdot 10^5$	0.0216	0.0070	0.03869
E3	362.425	$1.98 \cdot 10^5$	0.0205	0.0066	0.03675
E4	343.350	$1.88 \cdot 10^5$	0.0194	0.0063	0.03482

FL	Fourier						Ea ^{ad}					
	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%
E1	0.467	0.910	1.973	3.061	4.775	6.505	0.448	0.670	1.115	1.563	2.239	2.922
E2	0.490	0.959	2.088	3.245	5.075	6.933	0.448	0.670	1.116	1.565	2.242	2.930
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934
E3	0.543	1.074	2.359	3.678	5.785	7.930	0.448	0.671	1.118	1.568	2.248	2.939
E4	0.573	1.142	2.518	3.934	6.206	8.526	0.448	0.671	1.119	1.569	2.251	2.944

Tabla 6.6: Resultados obtenidos cuando vamos variando la capacidad calorífica del material. En negrita el resultado de referencia

	μ [kg/ms]	Rayleigh	Prandtl
F1	0.00199	$1.90 \cdot 10^5$	0.0237
F2	0.00190	$1.99 \cdot 10^5$	0.0227
ref	0.00181	$2.09 \cdot 10^5$	0.0216
F3	0.00172	$2.19 \cdot 10^5$	0.0205
F4	0.00163	$2.32 \cdot 10^5$	0.0194

	Fourier							Ea ^{ad}				
	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%
FL	1.022	2.239	3.487	5.471	7.482	0.448	0.671	1.118	1.567	2.246	2.936	
F1	0.517	1.018	2.228	3.466	5.439	7.440	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.935
F2	0.516	1.018	2.228	3.466	5.439	7.440	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.935
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934
F3	0.514	1.009	2.202	3.430	5.379	7.361	0.448	0.671	1.117	1.566	2.245	2.934
F4	0.513	1.004	2.189	3.409	5.345	7.320	0.448	0.671	1.117	1.566	2.254	2.933

Tabla 6.7: Resultados obtenidos cuando vamos variando la viscosidad del material. En negra el resultado de referencia

	$\lambda[W/mK]$	Rayleigh	Prandtl
G1	35.2	$1.90 \cdot 10^5$	0.0196
G2	33.6	$1.99 \cdot 10^5$	0.0206
ref	32.0	$2.09 \cdot 10^5$	0.0216
G3	30.4	$2.19 \cdot 10^5$	0.0227
G4	28.8	$2.32 \cdot 10^5$	0.0240

PL	Fourier							Ea ^{ad}				
	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%
G1	0.517	1.029	2.270	3.544	5.576	7.646	0.448	0.671	1.118	1.566	2.246	2.936
G2	0.516	1.022	2.245	3.498	5.498	7.534	0.448	0.671	1.118	1.566	2.246	2.935
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934
G3	0.513	1.005	2.186	3.398	5.315	7.261	0.448	0.671	1.117	1.566	2.244	2.933
G4	0.512	0.995	2.158	3.347	5.221	7.118	0.448	0.671	1.117	1.565	2.243	2.931

Tabla 6.8: Resultados obtenidos cuando vamos variando la conductividad térmica del material. En negrita el resultado de referencia

		β		Rayleigh		Pantall	
H1		1.32.10 ⁻⁴		2.29.10 ⁵		0.0196	
H2		1.26.10 ⁻⁴		2.19.10 ⁵		0.0206	
ref		1.20.10⁻⁴		2.09.10⁵		0.0216	
H3		1.14.10 ⁻⁴		1.98.10 ⁵		0.0227	
H4		1.08.10 ⁻⁴		1.88.10 ⁵		0.0240	

		Fourier					E _{a^{ad}}					
FL	10%	15%	25%	35%	50%	65%	10%	15%	25%	35%	50%	65%
H1	0.513	1.001	2.178	3.384	5.293	7.233	0.448	0.671	1.117	1.566	2.244	2.932
H2	0.514	1.007	2.195	3.416	5.349	7.315	0.448	0.671	1.117	1.566	2.244	2.933
ref	0.515	1.014	2.215	3.449	5.410	7.402	0.448	0.671	1.118	1.566	2.245	2.934
H3	0.516	1.020	2.237	3.485	5.473	7.494	0.448	0.671	1.118	1.566	2.246	2.936
H4	0.517	1.027	2.259	3.523	5.541	7.593	0.448	0.671	1.118	1.567	2.247	2.937

Tabla 6.9: Resultados obtenidos cuando vamos variando el coeficiente de expansión volumétrico del material. En negrita el resultado de referencia

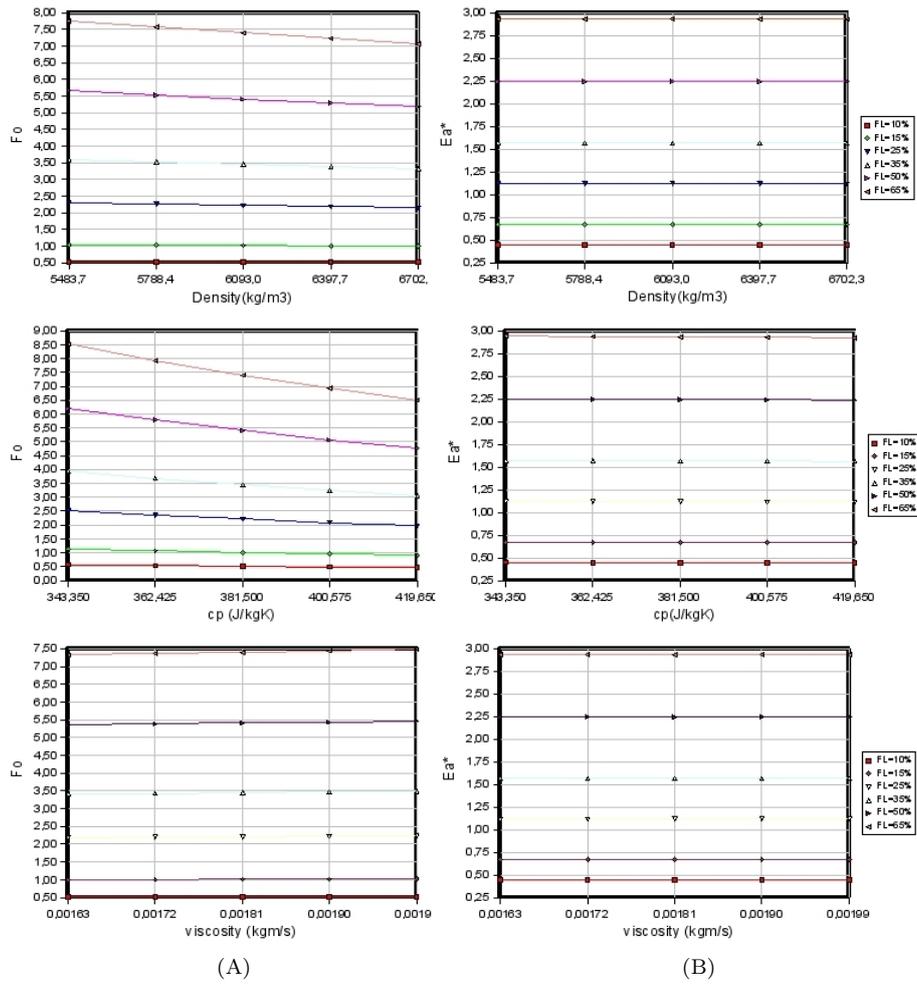


Figura 6.11: (A) Tiempo adimensional (Fourier) que tarda en fundirse una cierta porción del dominio para cada uno de los casos analizados. (B) Cantidad de energía absorbida (adimensional) en el tiempo anterior.

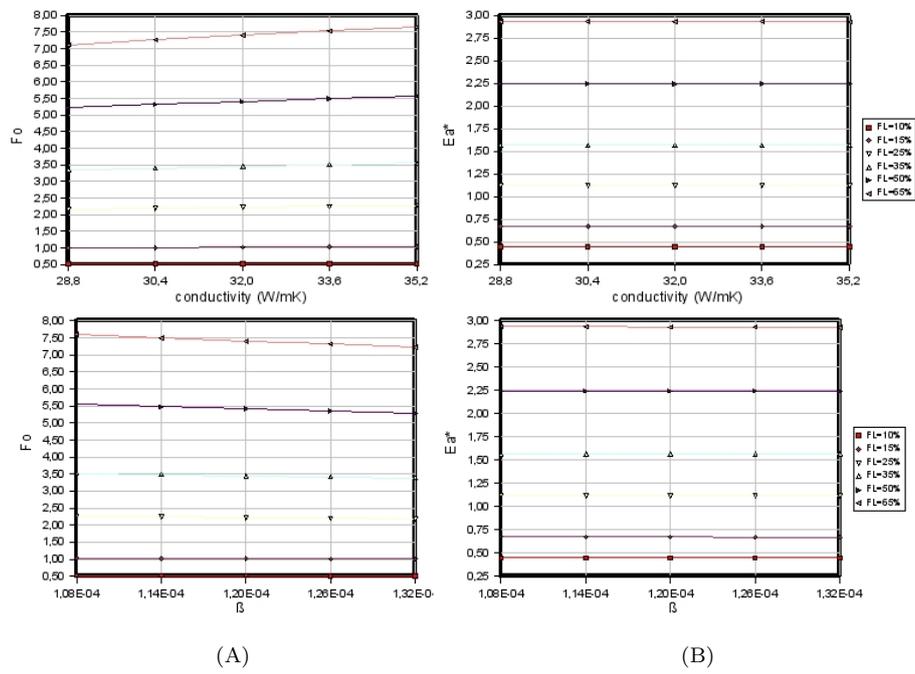


Figura 6.12: (A) Tiempo adimensional (Fourier) que tarda en fundirse una cierta porción del dominio para cada uno de los casos analizados. (B) Cantidad de energía absorbida (adimensional) en el tiempo anterior.

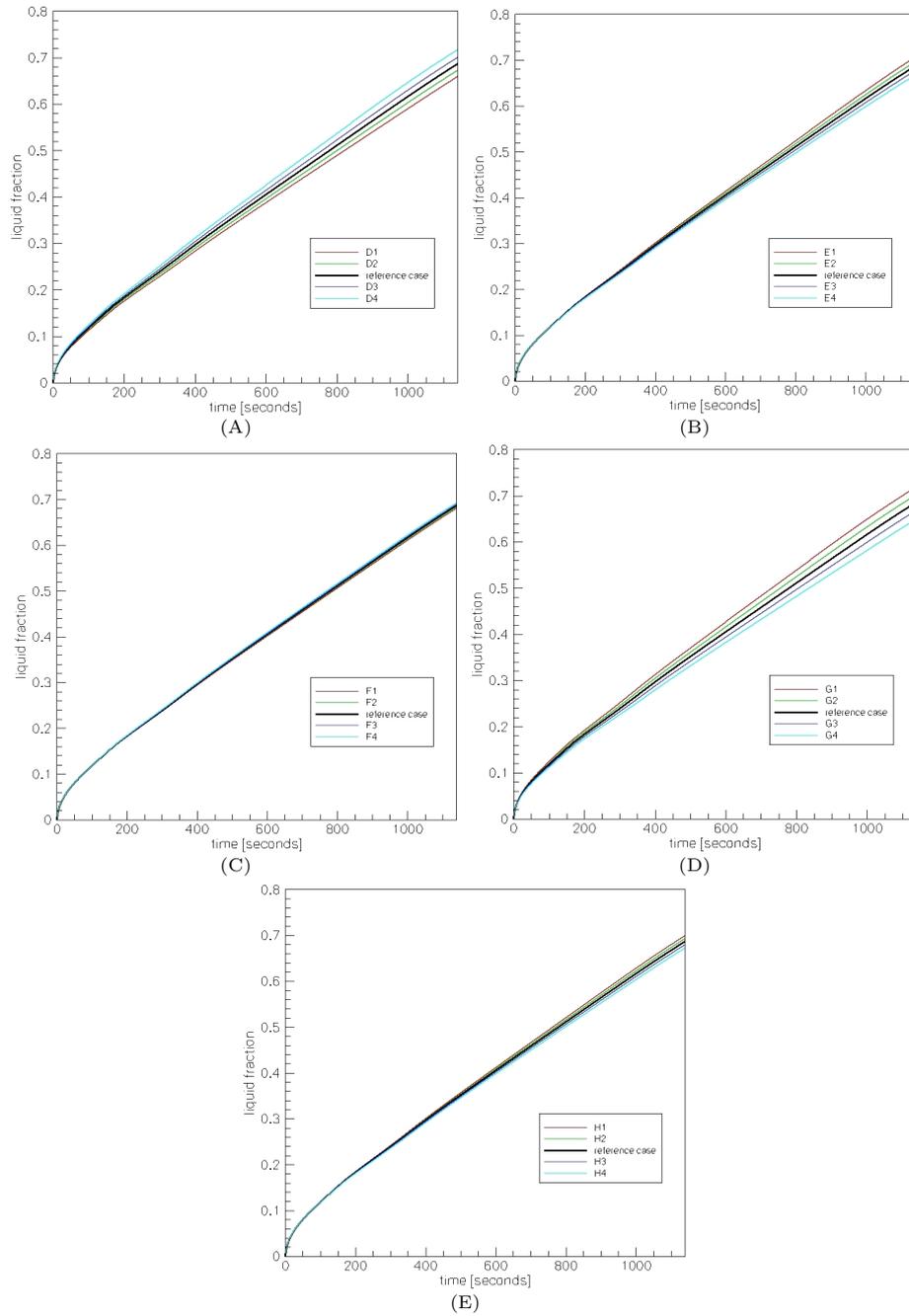


Figura 6.13: (A) Evolución temporal de la fracción de líquido en el dominio cuando varía (A) densidad (B) capacidad calorífica (C) viscosidad (D) conductividad térmica (E) coeficiente de expansión

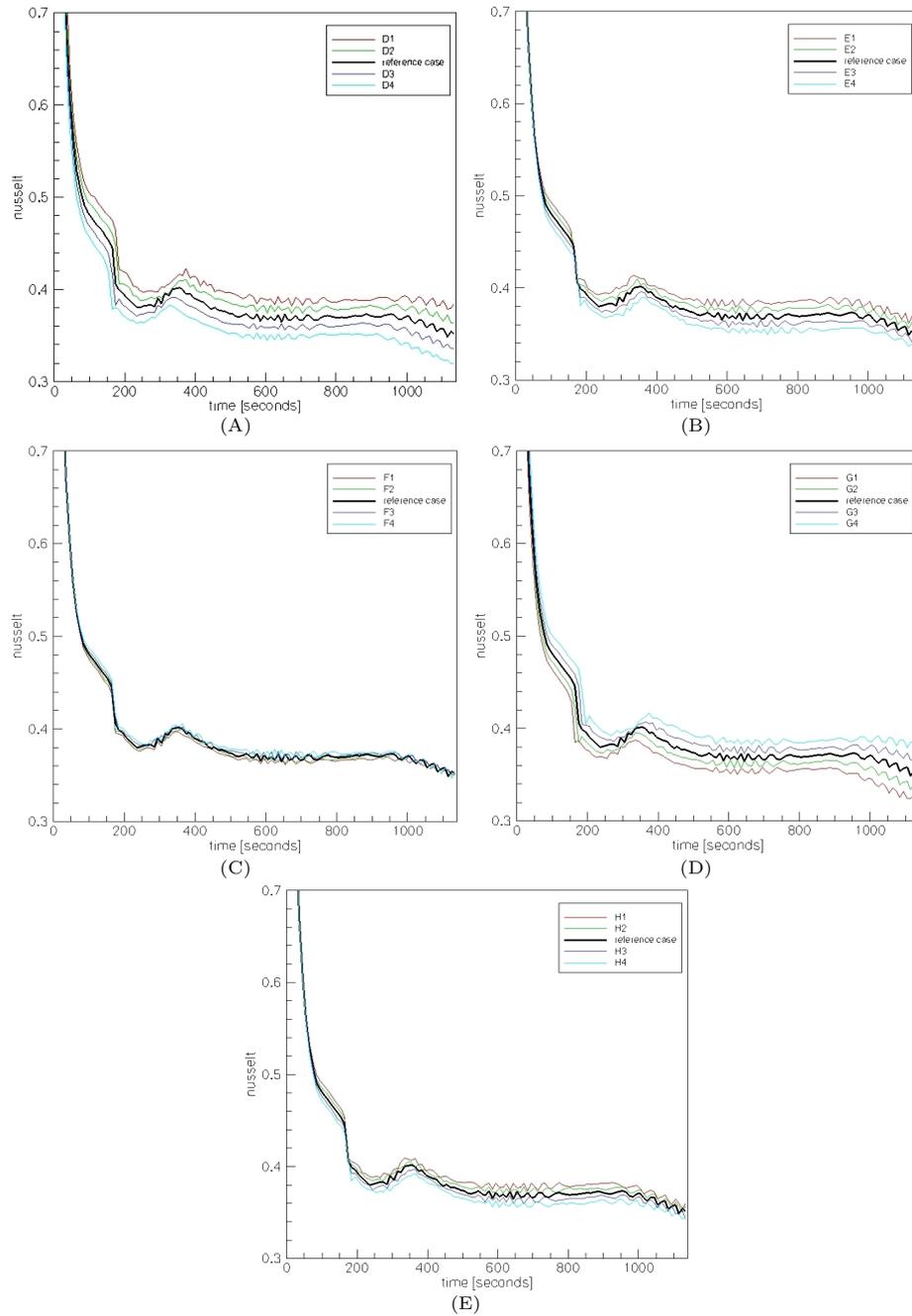


Figura 6.14: (A) Evolución temporal del número de Nusselt en la pared caliente cuando varía (A) densidad (B) capacidad calorífica (C) viscosidad (D) conductividad térmica (E) coeficiente de expansión

	FL	Nu
$\uparrow \rho$	\uparrow	\downarrow
$\uparrow \lambda$	\downarrow	\uparrow
$\uparrow c_p$	\downarrow	\downarrow
$\uparrow \beta$	\downarrow	\downarrow
$\uparrow \mu$	\uparrow	\uparrow

Tabla 6.10: Influencia de las diferentes propiedades termofísicas sobre la fracción de líquido en el dominio y sobre el número de Nusselt en la pared caliente

6.5 Conclusiones

En este capítulo hemos realizado un estudio paramétrico sobre el caso de fusión del galio. El caso que hemos tomado como caso de referencia es el que hemos estado tratando a lo largo de este trabajo: el caso de fusión del galio con una relación de aspecto de 0.5 y los resultados que hemos utilizado para la realización del estudio paramétrico han sido el tiempo que tarda en fundirse una cierta porción del dominio y la energía absorbida por el material en este tiempo. Estos dos valores se presentan en forma adimensional.

Las tendencias observadas aparecen resumidas en la Tabla 6.11. En esta tabla, la influencia que se observa más clara es la del número de Rayleigh sobre el número de Fourier: a medida que aumenta el número de Rayleigh el número de Fourier disminuirá.

	Ra	Pr	St_l	St_s	Fo	E_a^{ad}	FL	Nu
$\uparrow A_R$	\uparrow	$=$	$=$	$=$	\downarrow	\uparrow	\times	\uparrow
$\uparrow T_H$	\uparrow	$=$	\uparrow	$=$	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\approx
$\uparrow T_C$	$=$	$=$	$=$	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\approx
$\uparrow \rho$	\uparrow	$=$	$=$	$=$	\downarrow	\downarrow	\uparrow	\downarrow
$\uparrow \lambda$	\downarrow	\downarrow	$=$	$=$	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\uparrow
$\uparrow c_p$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow
$\uparrow \beta$	\uparrow	$=$	$=$	$=$	\downarrow	\downarrow	\downarrow	\downarrow
$\uparrow \mu$	\downarrow	\uparrow	$=$	$=$	\uparrow	\uparrow	\uparrow	\uparrow

Tabla 6.11: Influencia de las diferentes variables sobre las que hemos realizado el estudio paramétrico sobre el número de Fourier, la energía absorbida adimensional, la fracción de líquido en el dominio y sobre el número de Nusselt en la pared caliente

Si nos fijamos en la relación de aspecto observamos que a medida que

aumenta A_R el número de Nusselt en la pared caliente también aumenta, pero además, también aumenta la oscilación en la evolución temporal de este número adimensional. Así pues, se puede observar que cuando la relación de aspecto es de 0.286 apenas existen oscilaciones y en cambio, cuando la relación de aspecto es de 1.5 aún filtrando la señal se observan bastantes oscilaciones. En este caso también se ha estudiado como afecta la relación de aspecto sobre el número de recirculaciones en la zona de líquido, observando que a medida que aumenta la A_R el número de bucles de convección también aumentará.

A continuación, se ha estudiado el efecto que provoca el variar las condiciones de contorno, observando, como era de esperar, que si aumentamos la temperatura de pared caliente el material tardará menos en fundirse, y que si aumentamos la temperatura de pared fría el material también tardará menos tiempo en fundirse. En ambos casos no se observan demasiadas variaciones en el número de Nusselt en la pared caliente.

Finalmente, hemos estudiado como afecta variar las propiedades termofísicas (densidad, capacidad calorífica, viscosidad, conductividad térmica y coeficiente de expansión volumétrico) pudiendo sacar la conclusión de que los factores que influyen más sobre la fracción de líquido en el dominio y el número de Nusselt en la pared caliente son la densidad y la conductividad, seguidos por la capacidad calorífica, el coeficiente de expansión volumétrico y finalmente, el que menos influye, la viscosidad.

6.6 Nomenclatura

A_R	Relación de aspecto
c_p	Calor específico a presión constante
E_a	Energía absorbida
E_a^{ad}	Energía absorbida adimensional
Fo	Número de Fourier
g	gravedad
H	Altura del recinto en estudio
L	Calor latente de cambio de fase
Pr	Número de Prandtl
Ra	Número de Rayleigh
St	Número de Stefan
T_c	Temperatura de la pared fría
T_h	Temperatura de la pared caliente
T_m	Temperatura de fusión
T_0	Temperatura inicial
W	Anchura del recinto en estudio

Símbolos griegos

α	difusividad térmica
β	coeficiente de expansión volumétrico
λ	conductividad térmica
μ	viscosidad dinámica
ρ	densidad

subíndices

s	fase sólida
l	fase líquida

Bibliografía

- [1] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*. Second edition, 1992.

Capítulo 7

Conclusiones y Actuaciones Futuras

7.1 Conclusiones

La fenomenología del cambio de fase sólido-líquido es de gran interés en diferentes áreas científicas y de ingeniería como por ejemplo la cristalografía, la acumulación de energía térmica para el control térmico, metalurgia, etc. Si bien existen diferentes métodos numéricos para resolver problemas de cambio de fase sólido-líquido (métodos que siguen la frontera móvil, métodos que fijan la frontera móvil, . . .) en este trabajo hemos utilizado el Método Entálpico pues nos permite emplear una malla fija en todo el dominio. De esta forma, la condición de Stefan queda impuesta de manera implícita, se permite la coexistencia de más de un frente de cambio de fase, y se permite que la interfase tenga un cierto grosor.

Para realizar la simulación numérica hemos utilizado unas mallas cartesianas fijas en el espacio y en el tiempo. Para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes hemos utilizado el algoritmo *SIMPLEC* y un incremento de tiempo dinámico, con el fin de asegurar la convergencia de todos los instantes de tiempo. En cuanto a los esquemas numéricos, hemos optado por utilizar esquemas de alto orden, en nuestro caso el SMART, por obtener con éstos mejores soluciones con mallas menos finas, y mostrar algunos aspectos del movimiento del fluido que los esquemas de bajo orden son incapaces de captar.

Nos hemos encontrado con la problemática de obtener una solución en el rango asintótico en un tiempo computacional que sea asumible, aspecto que hemos tratado de abordar mediante la utilización de subdominios. Hemos utilizado dos métodos de descomposición en subdominios. En primer lugar un método conservativo (lo denominaremos MASS) en el que se han observado discrepancias entre la solución obtenida con un único subdominio y la obtenida con dos subdominios. El segundo método está basado en la presión (lo denominaremos MOM). Con el método conservativo aparecen discrepancias por el hecho de dividir el dominio, por lo que se ha escogido el método basado en la presión para obtener una solución de referencia para el caso de fusión del Galio con una relación de aspecto de 0.5. La utilización de estos métodos nos ha permitido paralelizar el problema, lo cual nos ha supuesto un ahorro importante en el tiempo computacional. A modo de ejemplo, para obtener la solución de referencia hemos utilizado una discretización espacial de 320x160 volúmenes de control y 1140000 pasos temporales. Paralelizando el problema en 8 máquinas AMD k7 XP 2600+ (ver Tabla 1.2) el tiempo computacional necesario para obtener la solución transitoria ha sido de 48 días.

Una de las ventajas de la utilización de subdominios para la resolución de problemas de cambio de fase sólido-líquido es que nos permite emplear diferentes tamaños de malla. Lo que hemos hecho es utilizar en la parte del dominio que sabemos que es líquida una malla de discretización espacial fina y en la parte del

dominio que sabemos que es sólida una malla más basta, para, a continuación, paralelizar el problema. El hecho de utilizar este tipo de mallado nos ha supuesto un ahorro computacional significativo (típicamente del 40%).

Finalmente hemos realizado un estudio paramétrico sobre el caso de fusión del galio. El caso que hemos tomado de referencia es el que hemos estado tratando a lo largo de este trabajo: el caso de fusión del galio con una relación de aspecto de 0.5. Los resultados que hemos utilizado para la realización del estudio paramétrico han sido esencialmente el tiempo que tarda en fundirse una cierta porción del dominio y la energía absorbida en este tiempo. Estos dos valores los daremos en su forma adimensional. En base a los resultados obtenidos se observa una clara influencia del número de Rayleigh sobre el número de Fourier: a medida que aumenta el número de Rayleigh el número de Fourier disminuirá. Por otra parte, se ha estudiado como afecta la relación de aspecto sobre el número de recirculaciones en la zona de líquido, observando que a medida que aumenta la relación de aspecto el número de bucles de convección también aumentará.

7.2 Actuaciones Futuras

Una vez alcanzados los principales objetivos planteados en esta tesis, podemos enumerar las diferentes tareas de interés a realizar en estudios posteriores:

- Resolución de casos tridimensionales mediante la utilización de subdominios. Esto nos permitiría ver la influencia que tiene la tercera coordenada espacial sobre los resultados. Además podría ser de gran interés resolver casos en coordenadas cilíndricas tridimensionales, pues es muy común utilizar en el diseño de acumuladores por calor latente un material de cambio de fase contenido en un tubo horizontal. En estos casos el fluido de transferencia de calor es típicamente el aire, que fluye a través de los tubos, que se sitúan de manera especial en su camino con el objetivo de incrementar la transferencia de calor entre el tubo y el aire.
- Utilización de mallas móviles que se ajusten en función de si el volumen de control es sólido o líquido.
- Implementación de las modificaciones necesarias en el software para que se puedan resolver situaciones en las que el cambio de fase no se produce a temperatura constante. Cuando el material que se está sometiendo a un cambio de fase es una sustancia no pura o una aleación, el cambio de fase tiene lugar en un intervalo de temperaturas. También resultaría interesante considerar aquellos casos en los que las propiedades termofísicas dependen de la temperatura.