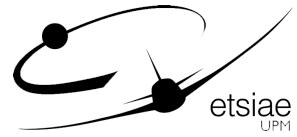




UNIVERSIDAD
POLITÉCNICA
DE MADRID



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA
AERONÁUTICA Y DEL ESPACIO
GRADO EN INGENIERÍA AEROESPACIAL

TRABAJO FIN DE GRADO

Modelización y simulación del crecimiento de hielo en superficies.

AUTOR: Rodrigo Fernández Matilla

ESPECIALIDAD: Ciencias y Tecnologías Aeroespaciales

TUTOR PROFESIONAL: Mariola Gómez López

TUTOR ACADÉMICO: Marta Cordero Gracia

Junio 2020

Agradecimientos.

Personalmente, este trabajo lo he vivido como una de esas montañas, que te impone al principio, que se escalan paso a paso sin mirar dónde está la cima, y que cuando estás cerca, y parece que ya ha terminado, aparece la última subida. Es un desafío que disfrutas simplemente dejando la mente en blanco y confiando paso a paso en que llegarás, y que, en el momento de llegar arriba, su inmensidad te hace dudar de que lo hayas conseguido, y te hace apreciar ese momento en el que decidiste comenzarla, con más ganas y fe que conocimiento de lo que te esperaba. Y el orgullo que sientes en ese momento sólo es comparable al agradecimiento que sientes por haber compartido el camino y haber sido guiado por ciertas personas.

En primer lugar, quiero dar las gracias a Mariola por el infinito apoyo, consejos, motivación y pasión que ha mostrado por mí, no sólo durante este TFG, que es lo más apreciable, sino también desde las clases de Estadística y de Ampliación de Matemáticas. Me decidí por el trabajo gracias a ella, y no me he arrepentido en ningún momento de la decisión. Ha sembrado en mí la semilla de la investigación, y espero poder devolvérselo de alguna manera algún día. Quiero agradecer también al Departamento de Matemáticas (Mancebo, Ignacio Delgado) de la ETSIAE por los excelentes docentes que me han educado desde el primer curso al último, demostrando un gran apoyo y un gran interés por el alumnado. No me puedo olvidar de todos los profesores que me han educado, todos ellos de la escuela pública, desde los tres años hasta el bachillerato. Cada vez que reflexiono sobre ello, siento un profundo orgullo del camino por el que he llegado hasta aquí.

A nivel personal, quiero agradecer infinitamente el apoyo de mis padres, Ángeles y Gonzalo, desde pequeño, cuando quería ser diseñador de coches, hasta que entré en la escuela y, como si nada, acabé la carrera. Es obvio que sin la educación y los valores que me han enseñado, ni una migaja de todo lo que conseguido habría sido posible. Por supuesto, quiero también agradecer al resto de mi familia, en particular a mi hermano, por todo el apoyo y los consejos, especialmente en mi vida universitaria. También a mi abuela, aunque piense que ahora soy piloto. A Paula, por traerme esa pizca de calma, alegría y felicidad que hace que todo funcione a las mil maravillas, más en esta época que nos tocó vivir. No me olvido de mis amigos, los de Bembibre y los de Madrid, que de más de uno y de dos aprietos me han sacado a rastras, y sin los cuales, a saber donde estaría.

Rodrigo Fernández
10 de julio de 2020

Resumen.

Son numerosos los incidentes y accidentes que, año tras año, están asociados a la formación de hielo en las aeronaves durante su vuelo. Este fenómeno, conocido como engelamiento, se produce por el impacto de gotas de agua en estado subenfriado (a una temperatura inferior al punto de fusión) sobre la aeronave, ya sea por precipitación, como es el caso de la lluvia engelante, o por atravesar una nube con una cantidad suficiente de estas gotas. Sea como fuere, los efectos sobre la aeronave son críticos, y pueden aparecer en cuestión de pocos minutos. Esto obliga a adquirir la capacidad de (a) prever, (b) detectar y (c) proteger o remediar la formación de hielo.

A fin de comprender y cuantificar los efectos plasmados sobre el desempeño de la aeronave de este fenómeno, es necesario contar con un modelo físico que represente correctamente los mecanismos que lo producen. Pese a los numerosos esfuerzos, a día de hoy la precisión de los resultados no es la que cabría desear, distando de una manera apreciable de los resultados obtenidos mediante experimentación. Un aspecto común a todos los modelos es el enfoque modular, interaccionando tres modelos: la obtención del campo fluido por el flujo del aire sobre la aeronave (a través de métodos CFD), la predicción de las trayectorias de las gotas de agua, y el análisis termodinámico del propio fenómeno de la formación y crecimiento de hielo. Una correcta compenetración entre ambos es imprescindible para simular de manera precisa el engelamiento en aeronaves.

En este proyecto, el principal objeto de interés es el desarrollo de un modelo termodinámico de la formación de hielo basado en ecuaciones diferenciales, partiendo desde la misma modelización de cada fenómeno físico que tiene lugar, pasando por la discretización del modelo mediante el método de volúmenes finitos, y acabando con una simulación del engelamiento bajo unas condiciones dadas.

Abstract.

A remarkable number of aircraft incidents and accidents are related each year with in-flight ice accretion. This phenomenon, called in short icing, is due to the impact of supercooled water droplets (i. e. which temperature is below the dew point) on a certain part of the aircraft, in particular aerodynamic surfaces. This causes an almost instant performance decline, severely damaging aerodynamic attributes such as stability or drag, but also jeopardizing the operation of the engines. In order to reduce the potential danger of this meteorological hazard, it is necessary to (a) predict, (b) detect and (c) protect and mend.

So as to understand and evaluate the effects regarding the aircraft performance as a consequence of icing, it is vital to develop a physical model which accurately portraits the procedures that ice accretion involves. Although huge and numerous efforts have been made, the correlation between the numerical results and experimentation is not as close as wished, and more work is necessary to crack the code of this phenomenon. One thing in common of all models is their modular approach, as there are three major blocks which interact with almost no exclusion. Those are (a) the numerical solution of the aerodynamic airflow around the aircraft, (b) the prediction of the water droplets' trajectories and (c) the thermodynamic ice accretion process simulation. A proper rapport between the three of them is mandatory in order to obtain realistic results.

The main focus of this project is to develop a PDE (partial differential equation) based thermodynamic module, involving the physical modeling of the process, its discretization and its simulation under a certain set of conditions.

Índice general

Agradecimientos.	III
Resumen.	V
Abstract.	VII
Nomenclatura	XI
Introducción.	XXI
1 Engelamiento en aeronaves.	1
1.1 Introducción.	1
1.2 El engelamiento atmosférico.	2
1.3 Efectos del engelamiento.	4
1.3.1 Efectos del engelamiento en aeronaves.	4
1.4 Gravedad del engelamiento y factores determinantes.	9
1.4.1 Características microfísicas.	10
1.5 Tipos de engelamiento en aeronaves.	11
1.5.1 Hielo glaseado (<i>glaze</i>).	12
1.5.2 Hielo escarcha (<i>rime</i>)	13
1.5.3 Hielo mezcla.	13
1.5.4 <i>Supercooled large droplet icing</i> (SLD).	14
1.6 El entorno engelante.	15
1.6.1 Condiciones meteorológicas y engelamiento.	15
1.6.2 Tipología de nubes y relación con el engelamiento.	16
1.7 Detección de condiciones de engelamiento.	20
1.7.1 Sensores <i>in situ</i>	20
1.7.2 Sensores remotos.	21
1.8 Predicción de condiciones de engelamiento.	21
1.8.1 Métodos actuales.	22
1.8.2 Métodos en desarrollo.	22

1.9	Defensas antihielo.	22
1.9.1	Medidas meteorológicas.	23
1.9.2	Medidas técnicas.	24
2	Simulación del engelamiento en aeronaves.	27
2.1	Introducción.	27
2.2	Flujo aerodinámico. Módulo CFD.	28
2.2.1	Generalidades.	28
2.2.2	Solver CFD TAU.	31
2.3	Impacto de gotas.	34
2.3.1	Generalidades.	34
2.4	Formación y crecimiento de hielo.	40
2.4.1	Generalidades del problema.	41
2.5	Consideraciones finales.	45
3	Conclusiones y futuros estudios.	47
A	Consistencia, estabilidad y error en esquemas numéricos.	51
A.1	Introducción.	51
A.2	Conceptos básicos.	52
A.2.1	Teorema de equivalencia de Lax.	53
A.3	Consistencia de esquemas numéricos.	54
A.3.1	Metodología básica.	54
A.3.2	Interpretación de la condición de consistencia.	56
A.4	Estabilidad de esquemas numéricos. Método de Von Neumann.	57
A.4.1	Bases del método.	58
A.4.2	Condición de estabilidad de Von Neumann.	60
A.4.3	Metodología de Von Neumann. Aplicación a la ecuación de la advección.	60
A.5	Ánálisis espectral de errores numéricos.	69
A.5.1	Manipulación de las soluciones exacta y numérica.	69
A.5.2	Errores de difusión y de dispersión.	71
A.5.3	Metodología de análisis.	72
A.5.4	Análisis de errores en la ecuación de la advección.	72

A.5.5	Resultados y discusión.	76
A.5.6	Esquema <i>FOU</i> (Método de Euler).	77
A.5.7	Esquema Runge-Kutta de 2 pasos.	77
B	Solución analítica de las ecuaciones de Euler.	83
B.1	Introducción.	83
B.2	Ecuaciones de Euler y problema de Riemann.	84
B.3	Solución analítica.	85
B.3.1	Estructura de la solución.	85
B.3.2	Solución en la región estrella.	86
B.3.3	Solución completa. Muestreo de la solución.	90
B.3.4	Resultados obtenidos.	93
C	Desarrollo de software.	99
C.1	Introducción.	99
C.2	Programa prICE_K.	99
C.2.1	Diagrama de flujo general.	100
C.2.2	Diagrama de flujo de la actualización de la solución.	100
C.2.3	Descripción de los módulos del programa.	100

Nomenclatura

Constantes físicas

γ Coeficiente de dilatación adiabática de un gas [—]

T_C Temperatura del punto triple [K]

Nomenclatura de cálculo diferencial y álgebra

Λ Matriz de autovalores de un sistema de ecuaciones diferenciales

λ_i Autovalor i -ésimo de la matriz del sistema

A Matriz del sistema de una ecuación diferencial

$F(\mathbf{U})$ Vector de flujos de una ecuación diferencial

I Matriz identidad

$K^{(i)}$ Autovector i -ésimo de la matriz del sistema

n Vector normal exterior a una superficie

R Vector de términos fuente de una ecuación diferencial

U Vector de variables dependientes de un sistema de ecuaciones diferenciales

u Vector de variables dependientes de una ecuación diferencial

W Vector de variables dependientes canónicas de un sistema de ecuaciones diferenciales

\mathbb{I} Unidad imaginaria

$\mathcal{L}(U)$ Operador diferencial espacial de una ecuación diferencial en derivadas parciales

Ω Volumen geométrico

$\partial\Omega$ Frontera del volumen Ω

ϕ Superficie característica de una ecuación diferencial en derivadas parciales

Σ Superficie geométrica

$d\gamma, d\sigma, d\omega$ Diferenciales de arco, superficie y volumen

s Parámetro de longitud de arco

Nomenclatura de cálculo numérico

\bar{u}_i^n Solución exacta de un esquema numérico

$\mathbf{F}_{i+1/2}$ Flujos numéricos en el extremo superior del volumen finito i -ésimo

\mathbf{Q} Vector de parámetros del método de Roe

$\mathbf{U}_{i+1/2}$ Solución computada en el extremo superior del volumen finito i -ésimo

$\Delta x, \Delta t$ Pasos espacial y temporal

ϵ_T Error de truncamiento de un esquema numérico

λ_j Longitud de onda del armónico j -ésimo

ω Relación de dispersión numérica

Ω_i Volumen de control i -ésimo

ϕ_j Fase del armónico j -ésimo

σ Número CFL

$\tilde{\mathbf{A}}$ Matriz promediada del sistema

$\tilde{\lambda}_i$ Autovalor i -ésimo de la matriz promediada del sistema

$\tilde{\omega}$ Relación de dispersión

$\tilde{\mathbf{K}}^{(i)}$ Autovector i -ésimo de la matriz promediada del sistema

\tilde{u}_i^n Solución exacta de un modelo matemático

G_j Factor de amplificación o ganancia del armónico j -ésimo

I_i Centroide del volumen finito i -ésimo

k_j Número de onda del armónico j -ésimo

$N(\bullet)$ Esquema numérico

S	Velocidad de propagación de una discontinuidad
S_{max}^n	Velocidad máxima de propagación de información en un problema de evolución discretizado
u_i^n	Solución computada de un esquema numérico
V_j^n	Amplitud del armónico j -ésimo en el instante n -ésimo
$x_{i+1/2}$	Extremo superior del volumen finito i -ésimo

Números característicos

Fr	Número de Froude	$Fr = \frac{U_c}{\sqrt{g_0 L_c}}$
Nu	Número de Nusselt	$Nu = \frac{h_c L_c}{k}$
Pr	Número de Prandtl	$Pr = \frac{\nu}{\alpha}$
Re	Número de Reynolds	$Re = \frac{\rho_c U_c L_c}{\mu_c}$

Sufijos

∞	Variable en el infinito sin perturbar
c	Característica
d	Gota (<i>droplet</i>)
e	Borde de la capa límite (<i>edge</i>)
f	Película de agua (<i>water film</i>)
w	Agua (<i>water</i>)

Variables termofluidodinámicas

α	Difusividad térmica	$\left[\frac{m^2}{s} \right]$
α_w	Fracción volumétrica de agua en aire	$[- --]$
\bar{U}	Vector velocidad de un cuerpo o fluido	$\left[\frac{m}{s} \right]$
\bar{u}	Vector velocidad adimensional de un cuerpo o fluido	$[- --]$

β	Coeficiente de captación	[---]
\dot{m}	Flujo másico	$\left[\frac{kg}{s} \right]$
\dot{m}'	Flujo másico por unidad de área	$\left[\frac{kg}{s} \frac{1}{m^2} \right]$
\dot{Q}	Flujo de calor [W]	
\dot{q}	Flujo de calor por unidad de área	$\left[\frac{W}{m^2} \right]$
μ	Viscosidad dinámica de un fluido	[Pa · s]
ν	Viscosidad cinemática de un fluido	$\left[\frac{m^2}{s} \right]$
τ_{wall}	Esfuerzo viscoso de un fluido sobre una pared	[Pa]
\bar{c}_f	Coeficiente de fricción viscosa sobre una pared	[---]
ρ	Densidad de un fluido	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
θ	Temperatura absoluta adimensionalizada con la del punto triple	[---]
\tilde{T}	Temperatura	[C]
C_D	Coeficiente de resistencia de un cuerpo	[---]
C_p	Calor específico a presión constante	$\left[\frac{J}{kg K} \right]$
d	Diámetro de las gotas	[μm]
f	Fracción de agua congelada	[---]
h	Espesor de una película de agua	[m]
h_c	Coeficiente de transferencia de calor por convección	$\left[\frac{W}{m^2 K} \right]$
k	Conductividad térmica de un fluido	$\left[\frac{W}{m K} \right]$
L	Calor latente de un fluido	$\left[\frac{J}{kg} \right]$
LWC	Contenido en agua líquida, <i>liquid water content</i>	$\left[\frac{kg}{m^3} \right]$
MVD	Tamaño volumétrico medio de las gotas, <i>median volumetric diameter</i>	[μm]

p	Presión de un fluido	[Pa]
$p_{v,sat}$	Presión de vapor de saturación	[Pa]
r	Factor de recuperación adiabática	[---]
T	Temperatura absoluta	[K]

Índice de figuras

1.1	Engelamiento por precipitación.	3
1.2	Características aerodinámicas de un mismo perfil limpio y engelado.	6
1.3	Formación de hielo en la entrada de aire. [?].	7
1.4	Formación de hielo en el carburador. [?].	7
1.5	Formación de hielo en el compresor. NASA Glenn Research Center [?].	8
1.6	Fotografías tras vuelo de una aeronave. NASA Glenn Research Center [?].	12
1.7	Formación de hielo <i>glaze</i>	12
1.8	Fenómeno de la lluvia engelante [?].	13
1.9	Formación de hielo <i>rime</i>	14
1.10	Formación por capas de hielo <i>glaze</i> (arriba) y <i>rime</i> (abajo).	14
1.11	Frecuencia de incidentes de engelamiento en Estados Unidos, expresada en porcentaje de tiempo de vuelo. [?].	16
1.12	Envolvente de certificación en condiciones de engelamiento continuo (nubes cumuliformes) [?].	17
1.13	Extensión de nubes cumuliformes para un <i>LWC</i> dado [?].	18
1.14	Envolvente de certificación en condiciones de engelamiento continuo (nubes estratiformes) [?].	19
1.15	Extensión de nubes estratiformes para un <i>LWC</i> dado [?].	19
1.16	Sensores <i>in situ</i> de detección de hielo.	20
1.17	Travesía correcta para atravesar un frente frío evitando condiciones de engelamiento [?].	23
1.18	Tratamiento químico antihielo en un Airbus A330 [?].	24
1.19	Sistemas de deshielo actuales.	26
2.1	Módulos implicados e interacciones entre ellos.	28
2.2	Jerarquía de los distintos métodos CFD en relación a su complejidad. [?].	29
2.3	Evolución de las herramientas CFD utilizadas por Airbus. [?].	30
2.4	Papel del CFD en el diseño del Boeing 777. [?].	31
2.5	Simulación del flujo alrededor del X-31 mediante el solver TAU. [?].	34
2.6	Esquema de la región de lanzamiento.	37

2.7	Esquema de los coeficientes de captación local y global	38
2.8	Representación esquemática del funcionamiento de los distintos métodos de simulación de crecimiento de hielo.	41
2.9	Diagramas de flujo de cada uno de los métodos de simulación de crecimiento de hielo.	42
2.10	Volumen de control utilizado en la modelización de la formación de hielo.	44
A.1	Relaciones entre consistencia, estabilidad y convergencia.	54
A.2	Representación de una onda como superposición de armónicos: longitud de onda máxima y mínima.	59
A.3	Factor de amplificación del esquema de segundo orden explícito para la ecuación de la advección.	62
A.4	Factor de amplificación del esquema de segundo orden implícito para la ecuación de la advección.	64
A.5	Factor de amplificación del esquema <i>FOU</i> explícito para la ecuación de la advección. .	65
A.6	Factor de amplificación del esquema <i>FOU</i> implícito para la ecuación de la advección. .	66
A.7	Factor de amplificación del esquema Runge-Kutta de 2 pasos para la ecuación de la advección.	67
A.8	Interpretación geométrica de la condición del CFL.	68
A.9	Errores de dispersión y difusión del método <i>FOU</i> aplicado a la ecuación de la advección. .	74
A.10	Errores de dispersión y difusión del método Runge-Kutta de 2 pasos aplicado a la ecuación de la advección.	75
A.11	Soluciones numérica (esquema <i>FOU</i>) y analítica de la ecuación de la advección.	79
A.12	Soluciones numérica (esquema Runge-Kutta-2) y analítica de la ecuación de la advección. .	81
B.1	Estructura genérica de la solución.	86
B.2	Estructuras posibles de la solución a efectos de la solución analítica.	87
B.3	Esquema de las características de cada una de las posibles discontinuidades.	88
B.4	Diagramas de flujo para el muestreo de la solución.	92
B.5	Solución analítica del test de Sod (sin modificar), con $t_f = 0.25$	94
B.6	Solución analítica del test de Sod modificado, con $t_f = 0.25$	94
B.7	Solución analítica del test 2, con $t_f = 0.25$	95
B.8	Solución analítica del test 3, con $t_f = 0.012$	96
B.9	Solución analítica del test 4, con $t_f = 0.05$	96

B.10 Solución analítica del test 5, con $t_f = 0.012$.	97
C.1 Diagrama de flujo del funcionamiento global del programa.	102
C.2 Diagrama de flujo del proceso de actualización de la solución.	103

Índice de cuadros

1.1	Severidad del engelamiento según la <i>FAA</i> [?].	9
2.1	Distribución Langmuir-D de diámetros de gota para $MVD = 16\mu m$	36
A.1	Tests para el método FOU y Runge-Kutta 2.	76
B.1	Datos para los ensayos.	93

Introducción.

El engelamiento es un fenómeno meteorológico causado esencialmente por el impacto de gotas en estado subenfriado, es decir, a una temperatura inferior al punto de fusión. Se trata de un estado metaestable, en el que una perturbación en la presión (por ejemplo mediante el impacto sobre una aeronave) es suficiente para inducir su cambio de fase, abocando a la formación de hielo sobre la aeronave. Los efectos causados por este fenómeno pueden ser críticos, al dañar seriamente el comportamiento aerodinámico del avión, el funcionamiento de los motores y de ciertos instrumentos. Es un fenómeno que causa un gran número de incidentes y accidentes aéreos al año, con una mayor incidencia en la aviación general, debido a su mayor precariedad en términos de equipamiento en relación a las aeronaves comerciales.

A fin de reducir los perjuicios del engelamiento, es necesario afrontarlo desde varios puntos. En primer lugar, la detección del hielo formado, lo cual puede realizarse *in situ* por el propio piloto o mediante instrumentos de detección. El segundo frente por el que avanzar es la predicción de las condiciones meteorológicas que inducen el engelamiento, lo cual parte de la base de que, actualmente, no existen datos explícitos acerca de ello, sino más bien correlaciones empíricas con variables con otros fines. El desarrollo de modelos numéricos meteorológicos junto a la reinterpretación de datos de satélites son la punta de lanza de esta táctica contra el engelamiento.

No obstante, las técnicas más pragmáticas contra la formación de hielo son las defensas anti-hielo. Estas se dividen en dos tipos generales: las meteorológicas, centradas en cómo evitar las condiciones que lo propicien y cómo actuar en caso de encontrarse en ellas, y las técnicas, centradas en la eliminación o prevención de hielo mediante dispositivos que actúen *in situ*. Estas últimas son numerosas y variadas, distinguiéndose las siguientes:

- Medidas mecánicas: Mediante la modificación de la forma del perfil, aprovechan la fragilidad del hielo para desprenderlo. Requieren de un espesor mínimo de hielo formado, lo que supone una desventaja frente al resto.
- Medidas térmicas: Funden el hielo mediante la utilización de diversos sistemas calefactores. Funcionan como prevención y como remedio.

- Medidas químicas: Basadas en rociar las superficies expuestas a la formación de hielo con líquidos anticongelantes.

Todo lo relativo al engelamiento como fenómeno meteorológico, así como las formas de proteger una aeronave ante él, se encuentra desarrollado en el capítulo 1.

La simulación de la formación de hielo requiere de la correcta interacción de tres módulos: un solver CFD, que proporcione la solución del flujo aerodinámico, un calculador de trayectorias de las gotas de agua, y un modelo termodinámico de la formación de hielo. La bibliografía es amplia en lo relativo a los códigos CFD, con muy diversas aproximaciones de la mecánica de fluidos, pero en este proyecto en particular se trabaja con datos obtenidos del solver TAU-Code [?], desarrollado por la agencia aeroespacial alemana *DLR*. En cuanto a la simulación de las trayectorias de las gotas de agua, existen dos enfoques físicos bastante distintos: el lagrangiano, centrado en la dinámica de cada gota, y el euleriano, que analiza en su lugar volúmenes de control y variables fluidas. El módulo utilizado en este proyecto es el módulo GOTA, desarrollado en la misma ETSIAE en años anteriores. Como se puede prever, la tarea principal es por tanto desarrollar un módulo termodinámico, basado en un enfoque diferencial mediante la aplicación de las ecuaciones de conservación de la mecánica de fluidos. La información relativa a esta estructura de resolución se introduce en el capítulo 2.

Dado el enfoque planteado para el módulo termodinámico, es conveniente realizar una pequeña introducción al modelado y discretización de sistemas físicos mediante ecuaciones diferenciales. Se tratan temas como las leyes de conservación, los tipos de problemas físicos, los métodos más habituales para la discretización de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, todo ello en el capítulo 3. Se trata de una introducción que introduce los conceptos básicos tratados a la hora de resolver en la práctica cualquier ecuación diferencial, y en particular las ecuaciones de la formación de hielo. La discretización espacial y temporal de las ecuaciones toma un papel importante, como no podía ser de otra manera. Como complemento, el capítulo 4 reúne una colección de casos crecientes en dificultad de aplicaciones del método de los volúmenes finitos, en especial del método de Godunov. Se comienza por las ecuaciones de la advección y de Burgers, de las cuales es conocida la solución analítica, para pasar a la implementación del esquema de Roe para la resolución numérica de las ecuaciones de Euler de la mecánica de fluidos. Adicionalmente, se puede encontrar un escueto desarrollo de la solución analítica de estas ecuaciones en el apéndice B. En conclusión, los capítulos 3 y 4 actúan como la base del análisis desarrollado en el capítulo 5.

En el último capítulo del trabajo se afronta la difícil tarea de la modelización, discretización e implementación de las ecuaciones de la formación de hielo. En primer lugar, se realiza un riguroso

análisis de las ecuaciones integrales de la mecánica de fluidos, particularizando para las condiciones que distinguen al problema. Una vez se han alcanzado unas ecuaciones manejables y adecuadas para la discretización mediante volúmenes finitos, se procede a ello, consiguiendo una base para el esquema numérico final. A continuación, se pormenorizan los modelos de cada uno de los fenómenos termodinámicos que aparecen en las ecuaciones, y se procede a su discretización. En última instancia, se plantea la resolución numérica de las ecuaciones con ayuda de ciertas restricciones termodinámicas, acabando en unas ecuaciones discretizadas explícitas que permiten resolver el problema, dado un conjunto de datos proveniente del solver CFD TAU y del módulo GOTA. Para los test de validación desarrollados a posteriori, se utilizan en su lugar estimaciones de estos valores, en virtud de resultados ya existentes en la bibliografía.

Adicionalmente, el anexo A presenta una visión general sobre la consistencia, estabilidad y precisión de esquemas numéricos, algo que resulta muy interesante ya que al fin y al cabo se confía constantemente en que los esquemas y la discretización permitan obtener unos resultados cercanos a la realidad. Cada uno de los tres aspectos es presentado, caracterizado y ejemplificado de manera sencilla, de modo que se pueda obtener una visión general de ellos.

A modo de resumen, los objetivos principales de este proyecto son:

- Establecer una visión general del fenómeno del engelamiento, a nivel físico y matemático.
- Plantear los conceptos básicos de la discretización de ecuaciones diferenciales y sus características.
- Desarrollar un modelo discreto de la termodinámica de la formación de hielo.

Engelamiento en aeronaves.

1.1 Introducción.

El engelamiento es un fenómeno que consiste en la formación de hielo por impacto de cristales de hielo y/o gotas de agua en estado subenfriado. Se trata de un fenómeno meteorológico que afecta a muchos sistemas, tales como aerogeneradores, pero su principal víctima son las aeronaves. El cuadro de perjuicios que el engelamiento induce en los aviones es de tal gravedad que es una de las mayores causas de siniestralidad en aeronaves. Solamente en Estados Unidos, se reportan alrededor de 20 fatalidades relacionadas con el engelamiento cada año [?], con un desenlace trágico en un porcentaje razonable de los mismos, especialmente en aviación general, que no cuentan con las defensas ni con información tan precisa con que trabaja la aviación comercial.

La fenomenología del engelamiento reviste una enorme complejidad en varios niveles. En primer lugar, la propia simulación de la formación de hielo en el ala, si bien ha progresado de manera apreciable, a día de hoy no presenta la precisión adecuada para representar ciertas condiciones, pese al éxito en otras. En segundo lugar, la predicción meteorológica de condiciones que propicien el engelamiento no está muy avanzada, aunque se estén redoblando esfuerzos en este aspecto. En numerosas ocasiones, el engelamiento se detecta cuando ya está sucediendo, y ha de ser remediado o bien huyendo de la zona o bien con métodos antihielo. Un fuerte esfuerzo está siendo realizado en este respecto, con el ensayo de nuevas tecnologías más efectivas y eficientes que permitan eliminar el hielo una vez se ha formado sobre el ala [?].

El estudio del engelamiento se realiza en tres escalas:

- La microescala (o microfísica), que analiza el impacto y crecimiento de las gotas subenfriadas en distintas superficies del avión.
- La mesoescala, que investiga la detección in-situ de las condiciones de engelamiento y la relación.
- La escala a nivel de nube, que analiza la predicción de condiciones de engelamiento, y cuya distinción con la mesoescala es difusa.

Existen distintas formas en las que la formación de hielo puede tener lugar. El fenómeno físico en sí consiste básicamente en el impacto de gotas de agua en estado subenfriado o subfundido, es decir, en un estado metaestable, al sobrepasar el punto de fusión ($T < 0C$) pero manteniéndose en estado líquido. Dicho estado se denomina metaestable, dado que un ligero aumento en la presión provoca la transformación inmediata en hielo, cosa que sucede al impactar sobre la superficie en cuestión. Los dos tipos más habituales de engelamiento son el hielo granular (*rime ice*) y el hielo glaseado o vítreo (*glaze ice*), aunque existen otros tipos menos comunes y con otra fenomenología asociada. Contrariamente a lo que podría parecer, la adhesión de hielo por precipitación no supone ningún tipo de problema, ni en vuelo (no adhiere) ni en tierra (pues se limpia sencillamente) [?].

Resulta interesante preguntarse cuánto tiempo permanece un avión en condiciones de engelamiento, también en relación a su tiempo de vida. Pese a que las condiciones de engelamiento se producen con gran asiduidad, es necesario recordar que, a nivel puntual, se encuentran confinadas en una nube, y por grande que sea, un avión en condición de crucero tarda escasos minutos en atravesarla [?]. Ello no quita que la gravedad de sus efectos sea capital, pero conviene tener en cuenta una escala temporal del problema. No obstante, según el fabricante Airbus, una aeronave comercial se encuentra en condiciones de engelamiento hasta en un 15 % de su tiempo de vida .

El objeto de este capítulo no es otro que presentar la casuística y la fenomenología del engelamiento, así como sus efectos, su predicción, su prevención y su remedio. Estos aspectos serán tratados uno por uno a continuación.

1.2 El engelamiento atmosférico.

Pese a que el asunto de interés en este trabajo es la simulación del engelamiento en aeronaves, no se trata del único escenario donde este fenómeno aparece. En este apartado, se presentará una clasificación general del fenómeno del engelamiento, que será extendido y desarrollado más adelante para los tipos más relevantes en la aeronave. De forma general, el engelamiento atmosférico puede clasificarse en:

- **Engelamiento de precipitación** (lluvia engelante o *freezing rain*): Se trata de unas condiciones en las que hay un alto contenido de agua en el aire (el denominado *Liquid Water Content* o *LWC*), oscilando entre 1 y 10 g/m^3 ; acompañado de un tamaño de gota grande, alrededor de los $100\mu m$ de diámetro. Su formación se produce cuando la nieve cae de una nube de precipitación en una capa de aire cálido, funde y progresiona hacia una zona de aire frío, subenfriándose y alcanzando

uno u otro estado, en función de la distancia recorrida en dicho ambiente frío. A su vez puede dividirse en otros dos tipos de precipitación.

- Hielo glaseado: Se trata de un escenario muy peligroso para el engelamiento en aeronaves, caracterizado por una predominancia del estado líquido de la precipitación, tras un corto tiempo en condiciones de subenfriado. Se compone por tanto principalmente de gotas de agua subenfriadas, que en el momento del impacto solidifican parcial o totalmente, pudiendo fluir posteriormente. Se trata de un hielo de tipo muy claro, casi transparente, que se forma a temperaturas altas (entre 0 y -10°C) (ver figura 1.1(a)).
- Nieve húmeda: La nieve húmeda (o aguanieve) es una precipitación en la que el agua ha pasado un largo tiempo en condiciones frías, llegando a solidificar parcialmente, y coexistiendo por tanto fase sólida y líquida. Se trata de una precipitación cuyos efectos no incluyen a las aeronaves, sino que afectan a estructuras de ingeniería en tierra. Conviene distinguirla de la nieve seca, de un contenido en agua muchísimo menor (ver figura 1.1(b)).



(a) Formación de hielo glaseado por precipitación. [?]



(b) Formación de hielo por nieve húmeda en un cable de alta tensión. [?]

Figura 1.1: Engelamiento por precipitación.

- **Engelamiento en nube**: Se trata del principal escenario estudiado del engelamiento en aeronaves. Se caracteriza por unos contenidos de agua líquida entre uno y dos órdenes de magnitud más pequeño, rondando entre 0.1 y 1 g/m³. Este tipo de formación de hielo se produce por el contacto directo entre la niebla o nube y la estructura, y en tierra suele tener lugar en zonas de elevada altitud y climas fríos. A su vez, se pueden distinguir distintos tipos de engelamiento en nube, dependiendo de cuatro parámetros principalmente: la temperatura, la cantidad de agua

líquida en la nube, el tamaño medio de gota (*Median Volume Diameter*, MVD) y la velocidad relativa entre la nube y el cuerpo. Se discutirá con más detalle más adelante, no obstante se adjunta una escueta clasificación y caracterización de los tipos:

- Hielo glaseado (glaze): Se trata de un proceso y de una formación muy similar a la modalidad de engelamiento por precipitación: Las gotas subenfriadas impactan sobre la superficie, solidificando parcialmente en general, y fluyendo hacia otros puntos de la superficie. A diferencia del engelamiento por precipitación, los tamaños de gota son bajos (un orden de magnitud inferior), pero sí que sucede en el mismo rango aproximado de temperatura (-10-0°C). Es una acreción que presenta una gran adhesión sobre la superficie, lo cual supone un problema grave en aeronaves.
- Hielo escarcha (rime): El hielo escarcha es una formación que tiene lugar a temperaturas más bajas (hasta -20°C), en la cual las gotas subenfriadas solidifican de manera total e inmediata, sin fluir (*runback*). Se trata de una formación más porosa, debido a esta última característica, y tiene por tanto una tonalidad blanquecina, en contraposición a la transparencia predominante en el hielo glaseado.

1.3 Efectos del engelamiento.

1.3.1 Efectos del engelamiento en aeronaves.

Aunque el concepto básico del engelamiento en vuelo sea sencillo, los procesos que contribuyen a la formación de hielo y sus resultados son muy complejos a la par que fascinantes, y suponen una preocupación importante de meteorólogos, ingenieros y pilotos, dados los severos efectos que se inducen sobre la aeronave. En general, el hielo se adhiere a los elementos expuestos al viento relativo así como a aquellas partes que sobresalen de la célula del avión, pudiendo dar lugar a [?]:

- Alteración de la aerodinámica del ala: Se produce un efecto dramático sobre la curva de sustentación y sobre la polar del avión, incluso con espesores del orden de milímetros.
- Pérdida de capacidad de mando y control: En el común caso de que se forme hielo en superficies estabilizadoras y de control, los efectos son críticos.
- Reducción de visibilidad.
- Interferencias en las ondas de radio.

- Errores en los instrumentos.
- Pérdida de potencia en plantas motoras (engelamiento interno).
- Vibraciones por la variación en las propiedades inerciales del ala.
- Incremento de peso: Reviste importancia únicamente en aeronaves de pequeño tamaño.

El vuelo de una aeronave en condiciones de engelamiento (*icing conditions*) está permitido, siempre y cuando esté certificado para ello. De hecho, se trata de una de las condiciones más importantes en las que el avión ha de ser certificado, estando recogido en las normas de la *Federal Aviation Administration*, las denominadas FAR (parte 25, apéndice C) (ver [?]). Para alcanzar tal certificación, suele ser común que cuenten con algún tipo de defensas antihielo, ya sean para prevenirlo o para remediarlo.

El engelamiento suelen afectar con mayor asiduidad a aviación general, en comparación con aviación comercial. Estos aviones, de menor tamaño, vuelan a altitudes más bajas, donde el engelamiento es una situación más repetida. Además, suelen carecer de equipos antihielo, así como de potencia adicional para escapar rápidamente de estas condiciones perjudiciales. La aviación comercial suele tener como protocolo ascender de manera rápida, proceso en el cual atraviesan nubes que pueden propiciar el engelamiento. En el vuelo de crucero, se encuentran a altitudes en las que el engelamiento no es posible. Entre ambos tipos de aeronave se encuentran los reactores ejecutivos, tanto por capacidad de actuación ante el engelamiento como por la altitud de vuelo. Son por tanto más susceptibles que los aviones comerciales ante estas condiciones.

1.3.1.1 Clasificación de los efectos.

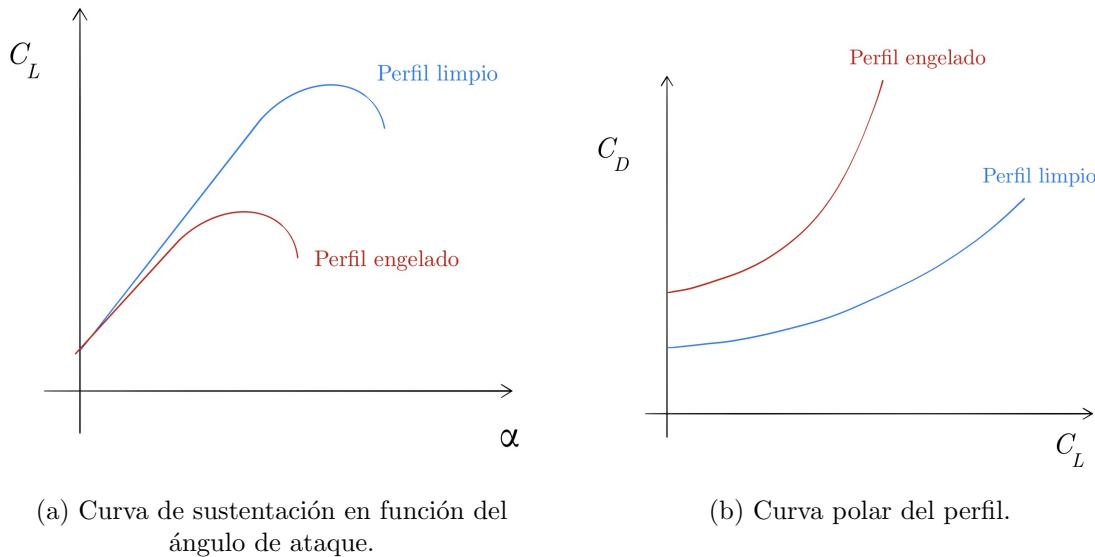
Puesto que la formación de hielo puede producirse tanto en superficies exteriores como en elementos internos (motores), los efectos se pueden clasificar de manera análoga:

Efectos estructurales.

El engelamiento estructural se produce por la acumulación de hielo en el exterior del avión, y su efecto fundamental es la alteración de las propiedades aerodinámicas de la aeronave:

- Bordes de ataque de ala y cola: La acumulación de hielo modifica los perfiles aerodinámicos, degradando el coeficiente de sustentación y el de resistencia. Por tanto, el avión tendrá que volar a mayor ángulo de ataque, acercándose con ello a la entrada en pérdida. Además, el coeficiente de sustentación máximo disminuye, por lo cual aumenta la velocidad de entrada en pérdida. De

todos modos, los efectos dependen de la morfología del hielo formado, pero en todo caso daña el comportamiento del avión. Véanse las figuras 1.2(a) y 1.2(b).



(a) Curva de sustentación en función del ángulo de ataque.

(b) Curva polar del perfil.

Figura 1.2: Características aerodinámicas de un mismo perfil limpio y engelado.

- Hélices: Tal y como sucede con los perfiles del ala, se ven deformados, y además se produce un desequilibrio másico que genera vibraciones y esfuerzos adicionales.
- Tubos de Pitot y de Venturi: Los tubos de pitot, que miden la velocidad respecto al aire del avión, pueden verse obstruidos por el hielo, proporcionando lecturas erróneas y causando que el piloto actúe como si volara en otras condiciones (subiendo el ángulo de ataque por ejemplo). No ocurrió a consecuencia del engelamiento, pero el accidente Birgenair 301 (1996) tuvo como motivo potencial la obstrucción de un tubo de pitot (por una avispa en este caso).
- Antenas: La acumulación de hielo en las antenas puede generar vibraciones que dificultan o incluso impiden las comunicaciones.
- Cristales del parabrisas en cabina: Se produce un descenso en la visibilidad por la acumulación de hielo.
- Tren de aterrizaje y flaps: Se puede perder eficacia y, en un caso extremo, pueden llegar a bloquearse.

El engelamiento en la cola (*tailplane icing*) constituye un fenómeno que difiere bastante del que tiene lugar en las alas. La configuración aerodinámica de la cola, así como el comportamiento con formación de hielo, es notablemente distinto al que sucede en un perfil típico de ala. Una cuestión relacionada con este problema es la pérdida del plano de cola, un problema gravísimo de las aeronaves, pues desaparece el momento aerodinámico que equilibra el cabeceo del avión así como el método básico de corregirlo. Más información al respecto puede ser encontrada en la referencia [?].

Efectos internos.

Los efectos internos hacen referencia a la operación de los motores, incluyendo el engelamiento por impacto en las entradas de aire y el engelamiento en el carburador. El efecto principal es la pérdida de potencia parcial o total. Desde 1988, se han reportado más de 150 pérdidas de potencia sensibles por motivo de la formación de hielo en motores [?].

- Formación de hielo en las entradas de aire: El concepto es igual que en el caso de las alas, solo que la superficie de análisis es la góndola y el difusor del motor (*inlet*). Una reducción de su área a consecuencia de esto implica una progresiva reducción de potencia entregada por el motor. (ver figura 1.3)
- Formación de hielo en el carburador: La entrada de aire húmedo en el motor puede provocar la formación de hielo en el carburador (ver figura 1.4), que puede llegar a obstruirse, y generar serios problemas en el funcionamiento del motor.



Figura 1.3: Formación de hielo en la entrada de aire. [?]

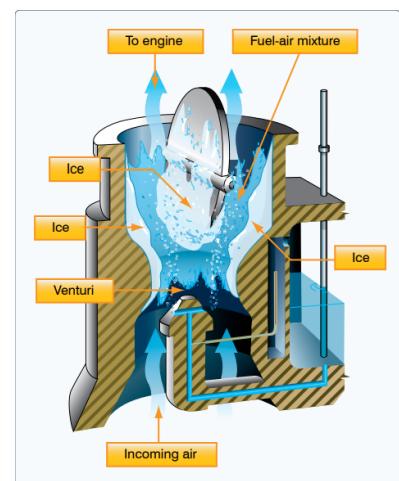


Figura 1.4: Formación de hielo en el carburador. [?]

- Formación de hielo en el compresor: Abundantes cristales de hielo y gotas subenfriadas entran en el compresor, impactando y acumulándose en el estator. Llegado un punto, el hielo se separa del componente al que estuviera adherido, alcanzando fases posteriores del motor y eventualmente generando problemas graves, como entradas en pérdida (*surge*) con las consecuentes inversiones de flujo. (ver las figuras 1.5(a), 1.5(b) y 1.5(c))



(a) Primeras etapas.



(b) Acumulación.



(c) Desprendimiento.

Figura 1.5: Formación de hielo en el compresor. NASA Glenn Research Center [?].

1.4 Gravedad del engelamiento y factores determinantes.

La severidad del engelamiento se encuentra actualmente clasificada en cuatro categorías, crecientes en gravedad: perceptible (*trace*), débil (*light*), moderada (*moderate*) y grave (*severe*). La severidad se evalúa como una combinación del estado objetivo del entorno meteorológico, la respuesta de la aeronave y la opinión del piloto al respecto de dicha respuesta. La *FAA* [?] tiene caracterizaciones para cada uno de los anteriores estados, recogidos en la tabla 1.1.

Categoría	Descripción
<i>Trace</i>	El hielo se vuelve perceptible. La acumulación es ligeramente superior a la sublimación. No resulta peligroso aún no contando con equipos antihielo, salvo si se encuentra durante $t > 1h$
<i>Light</i>	El ritmo de acumulación de hielo puede causar problemas si el vuelo se extiende en el entorno ($t > 1h$). El uso ocasional de defensas antihielo es efectivo.
<i>Moderate</i>	El ritmo de crecimiento de hielo es tal que pequeños períodos de tiempo en la región resultan potencialmente peligrosos. El uso de defensas antihielo o la evasión son necesarias.
<i>Severe</i>	El ritmo de acumulación de hielo es de tal magnitud que el equipamiento antihielo es inefectivo. Es necesario una maniobra de evasión inmediata.

Tabla 1.1: Severidad del engelamiento según la *FAA* [?].

Pese a la descripción anterior, es necesario establecer unos parámetros que caractericen las condiciones de engelamiento de una manera cuantitativa. De entre los que afectan al engelamiento, los más importantes son **el contenido de agua líquida** (*LWC*, *Liquid Water Content*), **la temperatura exterior** (T_∞) y **el tamaño de las gotas**, caracterizado por el diámetro de las gotas promediado en volumen (*MVD*, *Median Volume Diameter*). La velocidad relativa entre el flujo y el cuerpo (también denominada velocidad de impacto) es también un factor relevante, pero en una escala inferior.

El contenido de agua líquida favorece la formación de hielo, puesto que pone más masa a disposición para su congelación. Por tanto, unos valores altos de *LWC* están directamente asociados con condiciones más severas de engelamiento. La temperatura ambiente T_∞ , por su parte, controla lo que le sucede a las gotas al impactar: ya sea una congelación inmediata (para temperaturas suficientemente bajas) o un flujo posterior hacia otras posiciones (*runback*), que podrían no tener protección antihielo. En consecuencia, una temperatura mayor (pero negativa) está relacionada con una severidad mayor del engelamiento. El tamaño de las gotas controla la denominada eficiencia de colección (β), es decir, la distribución del agua al impactar sobre la estructura. Globalmente, el efecto de este parámetro no es

tan determinante como el de los dos anteriores hasta que se alcanzan tamaños de salpicadura (*drizzle*), rondando los $50\mu m$, a partir del cual el impacto provoca en casi todos los casos una dispersión del agua, con el efecto de alcanzar zonas desprotegidas.

En consecuencia, las condiciones que agravarían de forma particular el engelamiento en aeronaves sería un alto contenido de agua líquida, con una temperatura alta y negativa, y un tamaño de gota grande. Se verá que en función de estos parámetros es posible definir los tipos más generales de la formación de hielo: *glaze* y *rime*. A modo de nota, el efecto de la velocidad de impacto es un tanto complejo de analizar. Por un lado, facilita el flujo hacia zonas desprotegidas, por contar con mayor energía cinética; pero por otra parte, una mayor velocidad implica un flujo de entalpía positivo en la superficie, disipando más energía en el impacto y, por tanto, elevando la temperatura de la misma.

1.4.1 Características microfísicas.

Una vez han sido mostradas las tendencias de los parámetros determinantes, es interesante establecer en qué rangos se mueven en situaciones habituales.

A. Contenido de agua líquida.

El contenido de agua líquida en condiciones de engelamiento suele ser bastante baja. En nubes de tipo convectivo, alrededor del 90 % de los valores está por debajo de $0.7g/m^3$, y en el caso de nubes estratiformes, el valor baja hasta los $0.5g/m^3$. Los valores máximos pueden oscilar en torno a $1.2g/m^3$, en nubes convectivas profundas. Una característica a tener en cuenta es la distancia en que un valor de *LWC* se mantiene por encima de un cierto límite. Como parece lógico, al aumentar el límite, disminuye la distancia en que aparecen estas condiciones. Por ejemplo, un valor de *LWC* superior a $0.5g/m^3$ se ha encontrado de manera consistente en distancias inferiores a $13km$; mientras que si el límite se reduce a $0.1g/m^3$, la distancia crece a $83km$ de vuelo.

B. Temperatura ambiente.

En general, se pueden establecer los límites superior e inferior para el engelamiento en aeronaves en $0C$ y $-25C$, con una media en torno a los $-10C$. A temperaturas inferiores a $-20C$ no es común encontrar incidentes relacionados con el engelamiento; y a temperaturas superiores a $-5C$, la compresión del aire que se produce en el perfil sitúa las temperaturas en los bordes de ataque por encima del punto de congelación, al suponer un incremento de $1 - 2C$ en aviones pequeños pero de hasta $6 - 8C$ en aviones comerciales.

C. Tamaño de las gotas.

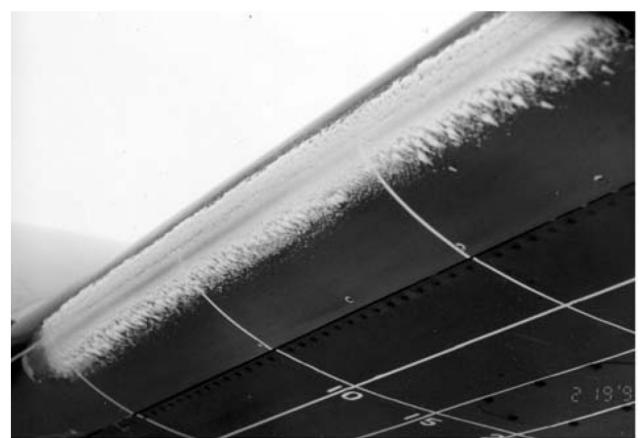
El tamaño de las gotas es típicamente pequeño (entre 10 y 20 micras de diámetro). Los máximos valores que se encuentran en general alcanzan las 50 micras (a excepción de los *SLDs*, ver apartado siguiente). Las tendencias generales muestran que las nubes de tipo cumuliforme contienen gotas de mayor diámetro en comparación con las estratiformes y, además, las nubes marítimas presentan también gotas de mayor tamaño (en relación a las continentales). Al igual que sucede con el *LWC*, el tamaño de las gotas crece con la altura en nubes de una sola capa, siendo el comportamiento de nubes multicapa de mayor complejidad.

1.5 Tipos de engelamiento en aeronaves.

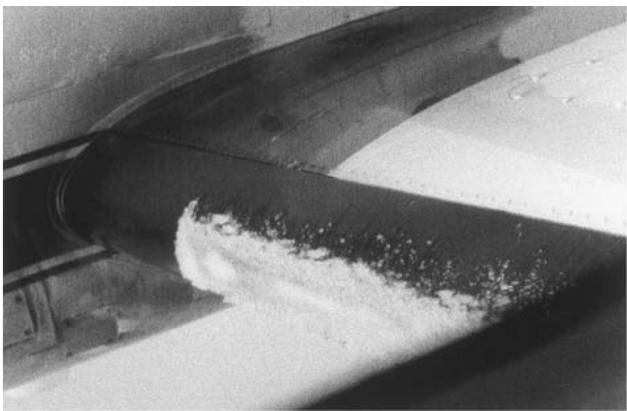
De todos los tipos de engelamiento atmosférico enunciados anteriormente, en el escenario particular de las aeronaves solamente se consideran dos tipos de formaciones principales: el hielo glaseado o transparente (*glaze*) y el hielo escarcha o granulado (*rime*). En el caso del primero, se pueden distinguir dos situaciones derivadas: la denominada lluvia engelante (el engelamiento por precipitación de hielo glaseado) y el engelamiento en nube de hielo glaseado. Adicionalmente, existe la posibilidad de que ambas formas (*glaze* y *rime*) se combinen en un modo intermedio entre ambos; y también es necesario tener en cuenta el fenómeno de impacto de *SLD*. Respectivamente, cada una de las situaciones mencionadas se pueden observar en las figuras 1.6(a), 1.6(b), 1.6(c) y 1.6(d) [?].



(a) Hielo *glaze* de gravedad severa.



(b) Hielo *rime* de gravedad leve.



(c) Hielo mezcla de gravedad moderada.

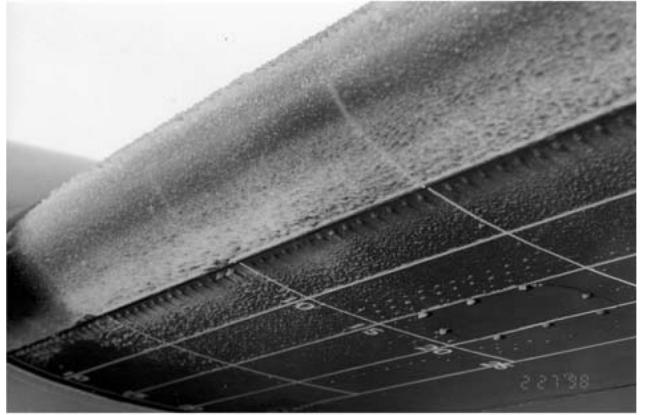
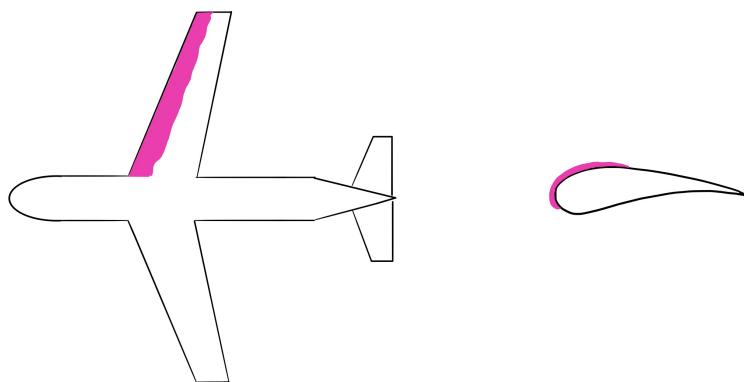
(d) Hielo de *SLDs*.

Figura 1.6: Fotografías tras vuelo de una aeronave. NASA Glenn Research Center [?].

1.5.1 Hielo glaseado (*glaze*).

El hielo *glaze* o transparente (figura 1.7) se forma a unas temperaturas no muy bajas, puesto que el modo en que se genera es mediante la congelación parcial de las gotas subenfriadas durante el impacto, para extenderse a zonas posteriores y ahí solidificar de manera definitiva. El rango oscila entre los $-2C$ y $-15C$, aunque esto depende de la fuente consultada, al no existir un límite físico objetivo. Habitualmente está asociado a gotas de tamaño moderado a grande, cuyo volumen permite su extensión tras el impacto. El contenido de agua líquida es también grande en estos casos. El proceso de congelación del hielo glaseado es lento, y resulta en un hielo con una gran capacidad de adhesión a la superficie por adaptarse a su forma (ver figura 1.10). Esto, unido al mayor perjuicio aerodinámico por su mayor extensión, hacen que sea uno de los tipos más peligrosos de engelamiento en aeronaves. De todas maneras, una cuantificación de los efectos de este tipo de formación requiere de un análisis de la aeronave, a nivel aerodinámico, de condición de vuelo y de equipamiento antihielo.

Figura 1.7: Formación de hielo *glaze*.

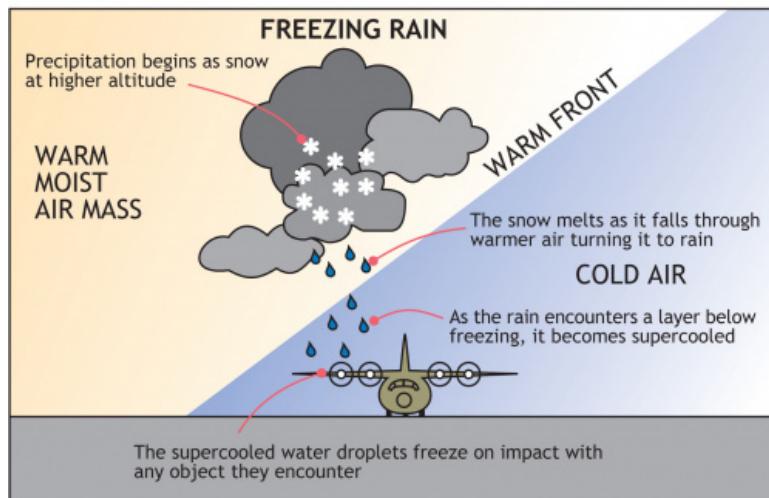


Figura 1.8: Fenómeno de la lluvia engelante [?].

Un caso particular de la formación de hielo glaseado es la denominada lluvia engelante, explicada esquemáticamente en la figura 1.8. Resulta especialmente peligrosa ya que, a la condición de hielo transparente, se une la uniformidad con que afecta a toda la aeronave.

1.5.2 Hielo escarcha (*rime*)

El hielo granular o *rime* (ver figura 1.9) se forma por el congelamiento directo e instantáneo de las gotas que impactan sobre el perfil. Como parece normal, está asociado a temperaturas más bajas, generalmente inferiores a $-10C$, aunque de nuevo existen distintos criterios en función de las referencias consultadas. Está relacionado también con un tamaño de gota menor, capaz de congelarse de manera inmediata tras el impacto. Dado que no tiene tiempo de cambiar su forma, el hielo toma un aspecto más rugoso y blanquecino, recordando a la nieve. La adherencia es inferior a la del hielo glaseado, y el efecto aerodinámico es comparativamente inferior. Dada su tonalidad, es más fácil de detectar desde cabina, lo que supone un aspecto a su favor.

1.5.3 Hielo mezcla.

El hielo mezcla aparece generalmente por la intercalación de capas de hielo transparente y granular. Sus características suelen estar entre un tipo y otro, presentando una notable adhesividad pero con una cierta fragilidad.

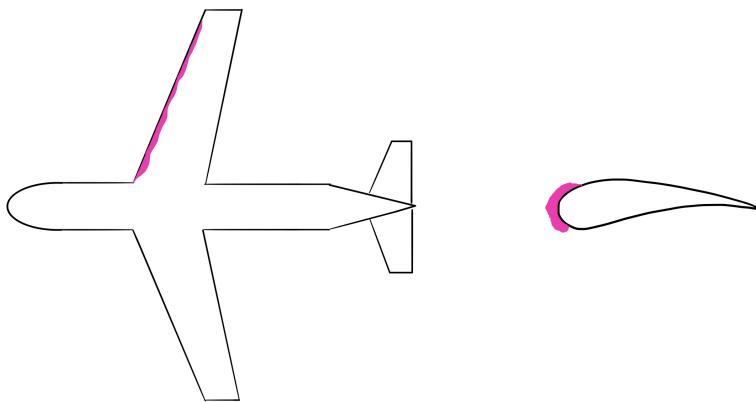


Figura 1.9: Formación de hielo *rime*.

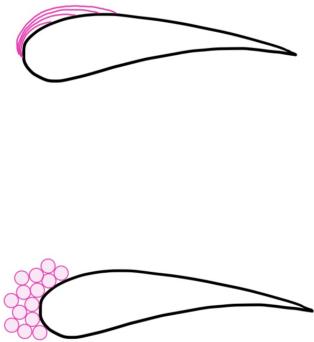


Figura 1.10: Formación por capas de hielo *glaze* (arriba) y *rime* (abajo).

1.5.4 *Supercooled large droplet icing* (SLD).

El fenómeno de impacto de gotas grandes subenfriadas (*supercooled large droplet icing*) se analiza prácticamente como un caso aparte, dada la severidad que conlleva así como la forma en que se generan. No obstante guarda una cierta similaridad con el hielo *glaze*, pero con numerosos matices. Sus efectos son muy perjudiciales, ya que dado su gran tamaño (diámetros que superan los $50\mu\text{m}$), son capaces de alcanzar zonas del avión que de otra manera permanecerían impasibles. Además, la formación de hielo en zonas avanzadas del perfil genera una rugosidad con un influjo mucho más grave sobre la aerodinámica del perfil que la formada en el borde de ataque.

Existen dos situaciones generales que inducen la formación de *SLDs*. La primera de ellas es el fenómeno de la lluvia engelante (ya descrita anteriormente), que se puede predecir de una forma más o menos sencilla, dado lo específico del perfil termodinámico que tiene que tener lugar. La segunda situación es la coalescencia de gotas más pequeñas, mucho más difícil de detectar. Está causada por

esfuerzos cortantes del viento (*wind shear*), es decir, diferencias en velocidad del viento en las partes superiores de las nubes, pero conviene aclarar que no se han detectado los mecanismos exactos mediante los cuales sucede este fenómeno. Sí se ha estimado que el contenido en agua líquida debe oscilar entre $0.2 - 0.25 g/m^3$ en nubes continentales y $0.1 g/m^3$ en nubes oceánicas.

1.6 El entorno engelante.

Aunque ya se han sentado las bases sobre los parámetros que afectan al engelamiento, es necesario establecer una relación con el conjunto de condiciones meteorológicas que conforman el entorno engelante. En primer lugar, se introducirán las condiciones meteorológicas que más comúnmente vienen relacionadas con el engelamiento, para posteriormente realizar un análisis geográfico de los reportes de sucesos de formación de hielo. Finalmente, se describirá ligeramente la relación entre el engelamiento y los tipos de nubes que lo producen.

1.6.1 Condiciones meteorológicas y engelamiento.

Dado que están ligados a nubes húmedas o de precipitación, los sucesos de engelamiento están asociados a meteorologías que produzcan esas condiciones. La mayor parte de los reportes de pilotos (*PIREPs, pilot reports*) de condiciones de engelamiento tienen lugar en zonas cercanas a frentes cálidos cercanos a la superficie, al sustentar aire húmedo desde capas más bajas. No obstante, aunque menos habitual, los frentes fríos también generan estas condiciones.

Las masas de aire marítimo contienen una mayor cantidad de humedad, y están más frecuentemente asociadas a *PIREPs* que las masas de aire continental, especialmente aquellas más alejadas de las zonas polares. La topografía también ejerce una influencia sobre las condiciones de engelamiento, al producir fuentes locales de elevación de masas de aire. Tomando el ejemplo de Estados Unidos, las Montañas Rocosas inducen la elevación de masas de aire húmedo en el centro de la nación, induciendo condiciones favorables para sucesos de engelamiento lejos de la costa.

Pese a lo que pueda parecer, las condiciones meteorológicas en tierra no son de mucha utilidad para estimar la posibilidad de sucesos engelantes: los *PIREPs* se reparten prácticamente a partes iguales entre precipitación de agua o nieve en la superficie y condiciones secas. Sin embargo, la sinistralidad sí se concentra en zonas frías y nubosas. En la figura 1.11 se observa una representación de la frecuencia de los sucesos de engelamiento en los Estados Unidos. La tendencia es bastante clara: Los

incidentes se concentran en las latitudes más altas, multiplicándose casi por diez entre las zonas más septentrionales respecto a las meridionales. La siniestralidad media al año oscila los treinta incidentes sólo en este país, concentrándose en los meses del invierno.



Figura 1.11: Frecuencia de incidentes de engelamiento en Estados Unidos, expresada en porcentaje de tiempo de vuelo. [?].

En lo que respecta a la altitud en que suceden estos reportes, la media de estos se encuentra alrededor de los 3000 m , existiendo muy escasos sucesos en altitudes superiores a 6000 m . Ello resulta tranquilizador en cierto modo, puesto que la altitud de crucero de un avión comercial se sitúa bastante por encima de dicho nivel. En cuanto al reparto de *PIREPs* a lo largo de un día, éste obedece básicamente a la frecuencia de vuelos, cayendo durante las horas nocturnas. Una prueba que reafirma este comportamiento es que a lo largo de una semana, de nuevo obedecen a los días de mayor tráfico (de Martes a Jueves).

1.6.2 Tipología de nubes y relación con el engelamiento.

Existen dos tipos principales de nubosidad que albergan condiciones engelantes [?]:

A. Nubes cumuliformes.

Las nubes de tipo cumuliforme se forman por fuertes corrientes de aire ascendente, lo cual les dota de la forma alargada verticalmente. Este tipo de nube incluye muchos otros tipos, pero las que provocan engelamiento generalmente son los cumulonimbos (*Cb*), denominadas coloquialmente nubes de tormenta, y los *cumulus congestus*, especialmente alargadas verticalmente. El contenido en agua

líquida de estas nubes es notablemente alto (alrededor de 3 g/m^3), lo cual las convierte en un tipo de nube peligrosa en estas condiciones. La ventaja que juega a su favor es su corta extensión, sin sobrepasar los 10km , toda vez que puede ser una distancia más que suficiente para que la formación de hielo sea severa. A continuación se adjuntan dos gráficas, extraídas de las normas *FAR* [?], que muestran respectivamente 1.12 la envolvente de las condiciones engelantes para las nubes cumuliformes, en las cuales el avión ha de ser capaz de volar con seguridad para ser certificados y 1.13 la extensión de las nubes para un contenido de agua líquida dado. Se observa que la certificación abarca desde los 0°C hasta los -40°C , con unos valores de *LWC* notablemente altos. Asimismo, el *MVD* alcanza las 50 micras, valor al que las nubes estratiformes no llegan. Por tanto, la formación de hielo en estas nubes es habitualmente hielo transparente (el más peligroso).

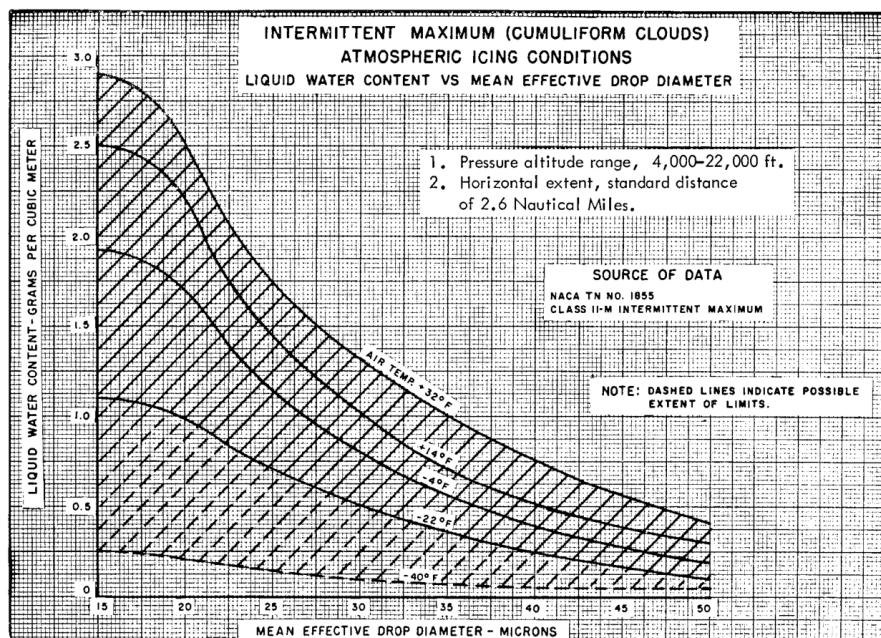


Figura 1.12: Envolvente de certificación en condiciones de engelamiento continuo (nubes cumuliformes) [?].

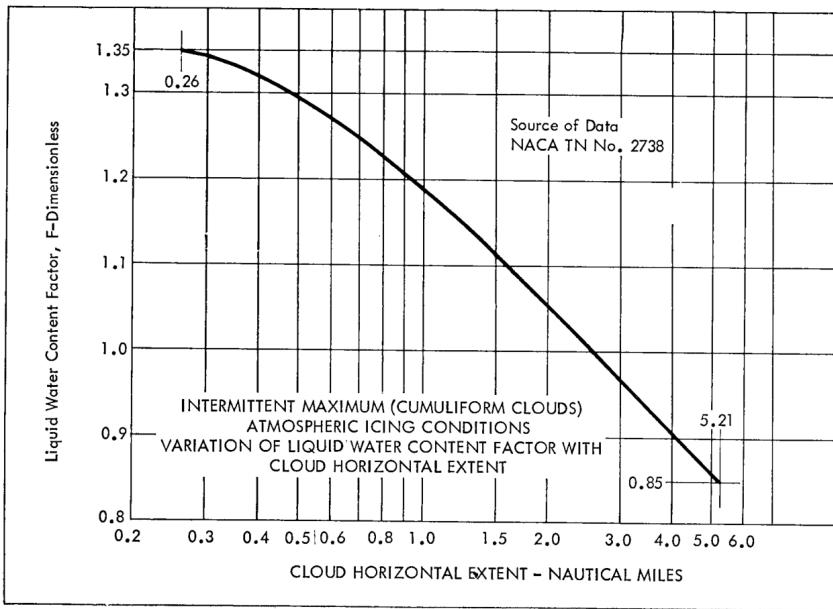


Figura 1.13: Extensión de nubes cumuliformes para un *LWC* dado [?].

B. Nubes estratiformes.

Las nubes estratiformes se generan a partir de corrientes de aire que ascienden de una forma más débil, lo que provoca una forma más aplanada y alargada en sentido horizontal. Se trata de nubes de una gran extensión, que pueden superar los 300 kilómetros (aunque no sea lo común); mientras que su contenido en agua líquida en la envolvente de certificación es sensiblemente inferior al de las nubes cumuliformes ($< 1 \text{ g/m}^3$). El tamaño de gota es también inferior, por debajo de las 40 micras. En las figuras 1.14 y 1.15 se pueden observar las mismas envolventes y curvas que se han mostrado para las nubes cumuliformes. Merece mención el título que reciben para la *FAA*, denotando como *continuous maximum* a las estratiformes (por la necesidad de exposición prolongada) y *intermitent maximum* a las cumuliformes. En dichas envolventes además se indica la exposición a la que debe someterse el avión para ser certificado, siendo 2.6 millas náuticas para las cumuliformes y 17.4 para las estratiformes.

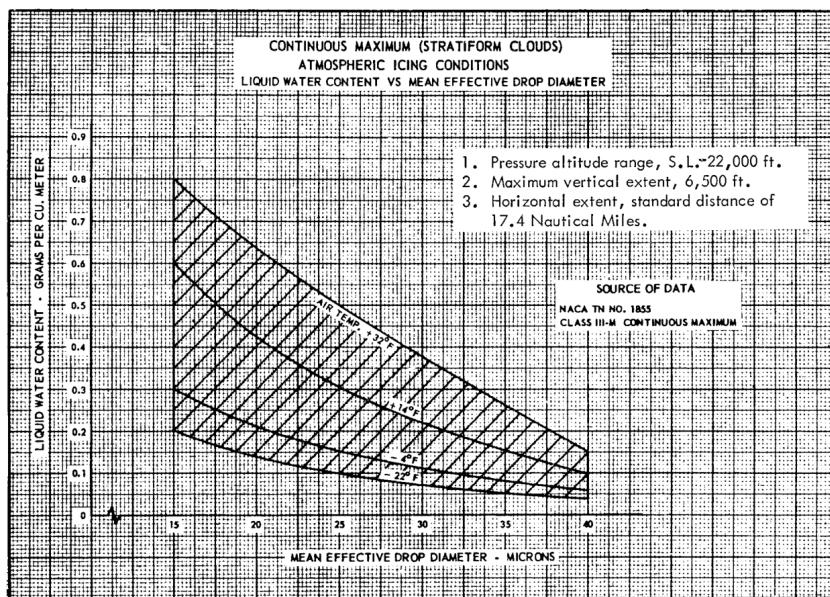


Figura 1.14: Envoltorio de certificación en condiciones de engelamiento continuo (nubes estratiformes) [?].

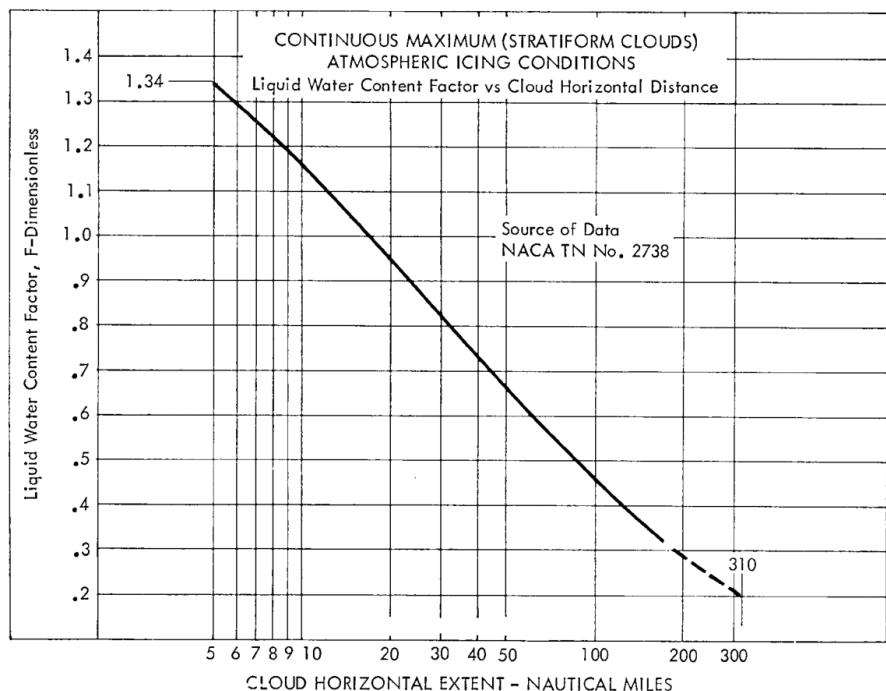


Figura 1.15: Extensión de nubes estratiformes para un *LWC* dado [?].

1.7 Detección de condiciones de engelamiento.

1.7.1 Sensores *in situ*.

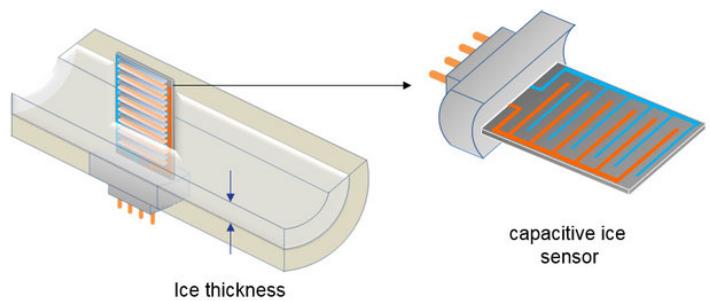
La detección *in situ* del engelamiento se puede realizar o bien visualmente o bien a través de algún tipo de instrumentos. En general, los pilotos cuentan con una vista bastante impedida de las alas del avión, de modo que se suele evaluar en vista de la formación de hielo en el parabrisas o en tubos de pitot en el morro del avión. Además, y de acuerdo a la tabla 1.1, el piloto puede detectar variaciones en el comportamiento del avión que le sirvan para evaluar la condición del mismo.

Sin embargo, los métodos más eficaces para detectar el engelamiento en ciertas partes del avión son los instrumentales. Los detectores de hielo avisarán al piloto de la formación de hielo en ciertas partes del avión. Habitualmente, estos instrumentos proporcionan un aviso temprano mucho antes de que el piloto pueda observar visualmente el hielo. Existen numerosos tipos de detectores, destacando los siguientes:

- Sensores de capacitancia: Montados en la superficie del ala, detectan diferencias en la capacitancia de la superficie, la cual varía según avanza el engelamiento.
- Varillas de vibración (vibrating rod): Se trata de una varilla expuesta al flujo que detecta la variación de las frecuencias naturales de la misma al formarse hielo. (figura 1.16(a), [?])
- Cámaras infrarrojas: Actualmente en desarrollo, analizan radiación infrarroja reflejada por el ala, y detectan con ello variaciones en su superficie.(figura 1.16(b), [?])



(a) Varilla vibratoria [?].



(b) Sensor de capacitancia [?].

Figura 1.16: Sensores *in situ* de detección de hielo.

La ventaja de los sistemas de detección *in situ* es que proporcionan una descripción definida de las condiciones de engelamiento. Sin embargo, presentan una gran desventaja, y es que el avión debe encontrarse en tales condiciones, y ello no es algo para nada deseable.

1.7.2 Sensores remotos.

Los sensores remotos de condiciones de engelamiento se encuentran en fases muy tempranas de su desarrollo. De hecho, en la actualidad, no existe ningún instrumento que permita la detección precisa y suficientemente remota de agua subenfriada en la atmósfera. La metodología usada combina información de diversas fuentes, como lo son radares aeroportuarios (como el *TDWR* o el *NEXRAD*) que si bien no fueron diseñados para ello, pueden dar algún tipo de información relevante acerca de las condiciones en un entorno razonable del avión. Esto, con ayuda de modelos numéricos de predicción meteorológica, imágenes satélite o condiciones en tierra, puede dar pistas sobre la existencia de condiciones de engelamiento. Otra estrategia que se considera es la actualización de radares, que mediante pequeñas modificaciones, pueden resultar de gran utilidad.

Un problema de la detección con sensores remotos es la imposibilidad de distinguir entre agua líquida y hielo con el uso de la reflectividad. Una posible estrategia en desarrollo es la implementación de sensores de polarización, que ayuden a determinar la forma del meteoro. En otro respecto, los satélites geoestacionarios operacionales ambientales (*GOES*) muestran resultados prometedores como detectores de condiciones engelantes. Su funcionamiento se basa en la detección de radiación en el espectro visible combinada con el infrarrojo, que permite la localización de nubes con agua subenfriada en su parte superior. Aun así, por sí solos no resultan suficientes, necesitando una vez más de otros datos y sensores para poder dar una detección lo suficientemente precisa.

1.8 Predicción de condiciones de engelamiento.

La predicción de condiciones de engelamiento es análoga a la de la existencia de agua subenfriada en las nubes, lo que supone una tarea muy complicada. En general, se suele realizar un proceso de predicción progresivamente restrictivo, contando con los pasos siguientes:

Nubes/precipitación → Temperaturas favorables $[-20, 0]^\circ\text{C}$ →
→ Aire ascendente que produzca líquido → Ausencia de hielo que pueda inducir solidificación

1.8.1 Métodos actuales.

Pese a la gran variedad de métodos de predicción que existen en la actualidad, todos ellos tienen una serie de aspectos en común: requieren mucho personal y tiempo, tienen un cierto grado de subjetividad y los resultados finales suelen ser difíciles de interpretar. El mayor inconveniente existente en la actualidad es que se trabaja con unos datos recogidos para otros fines, es decir, hay que extrapolar en cierto modo datos implícitos. Una metodología habitual es la interpretación de datos de temperatura y humedad relativa de modelos meteorológicos numéricos, que proveen de una precisión del 75 % (entendiendo como precisión el número de reportes de engelamiento en zonas donde estaba prevista su existencia).

1.8.2 Métodos en desarrollo.

Con la llegada de modelos numéricos avanzados de predicción meteorológica, de la mano de la detección del contenido de agua líquida en nubes, se abre un nuevo potencial de detección *real* del engelamiento, en lugar de la inferencia llevada a cabo hasta ahora. Ejemplos de los mencionados modelos son el *MM5* o el *RAMS*, ambos desarrollados en los Estados Unidos. Un impedimento de su implementación es la demanda de tiempo, potencia y almacenamiento computacional. De todos modos, el rastreo del contenido de agua líquida es la única vía hacia la detección certera de condiciones de engelamiento.

Ninguna fuente de información es suficiente por sí sola para predecir dónde se encuentran condiciones propicias para el engelamiento, o aspectos como su severidad o su tipo. Los meteorólogos combinan la información de varias fuentes para construir la historia completa, y poder determinar con seguridad todos estos aspectos. Su gran valor y su enormes requerimientos de tiempo sugieren y justifican el hecho de desarrollar algoritmos que automáticamente alcancen esos resultados. La clave para una predicción efectiva de condiciones engelantes reside en un entendimiento profundo de (A) los procesos que resultan en la formación de agua subenfriada, (B) el modo en que estos procesos se relacionan con fenómenos observables y (C) cómo combinar la información de todas las fuentes posibles para obtener la imagen más precisa de la situación.

1.9 Defensas antihielo.

A fin de protegerse ante los efectos que el engelamiento provoca sobre la aeronave, aquellas cuya vida incluya el vuelo en estas condiciones han de estar equipadas con algún tipo de defensa antihielo.

En una aeronave, en general, hay tres tipos de zonas: las zonas provistas de sistemas antihielo (*anti-ice*), las que han sido desheladas (*de-ice*) y las que están desprotegidas. Para evitar la formación de hielo y sus muy peligrosos efectos, hay dos líneas de actuación. O bien se previene la formación de hielo, o bien se elimina una vez ha sido depositado.

1.9.1 Medidas meteorológicas.

Las medidas meteorológicas simplemente marcan actitudes a la hora de volar en ciertas regiones, es decir, cómo evitar las condiciones de engelamiento (al menos en su variante severa). Para ello, se debe evitar volar en las siguientes condiciones [?]:

- Zonas con frentes temporales fríos particularmente severos.
- Zonas con nubosidad cumuliforme de gran desarrollo vertical o simplemente densa.
- Zonas de precipitación de un frente temporal dado.
- Nieblas densas.
- Nubes estratiformes densas con gran contenido de agua.
- En zonas montañosas, evitar nubosidad de tipo convectivo.

En caso de encontrarse con alguna situación de las anteriores, lo correcto es modificar la ruta como sea necesario para minimizar o anular la distancia recorrida en tales condiciones. Este comportamiento se encuentra ilustrado en la figura 1.17.

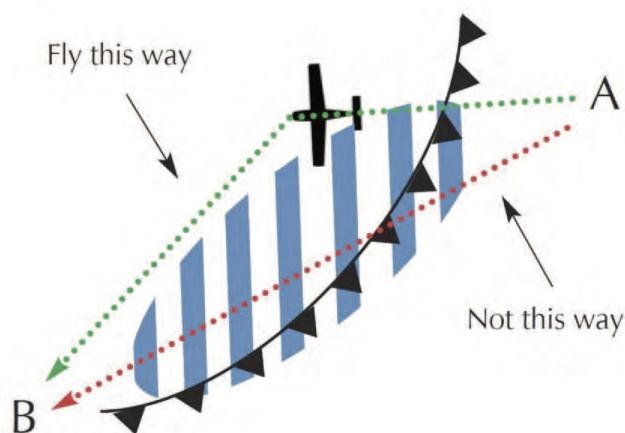


Figura 1.17: Travesía correcta para atravesar un frente frío evitando condiciones de engelamiento [?].



Figura 1.18: Tratamiento químico antihielo en un Airbus A330 [?].

1.9.2 Medidas técnicas.

Pese a evitar en la medida de lo posible las condiciones que propicien el engelamiento, existe la posibilidad que de todos modos acabe formándose hielo en la aeronave; o también es posible necesitar de una protección por pura precaución. Las medidas que están destinadas a eliminar (deshielo) o prevenir (antihielo) el hielo formado en la aeronave se denominan medidas técnicas, que generalmente están diseñadas en varias líneas:

- **Medidas químicas:** Se basan en rociar ciertas superficies de la aeronave antes del despegue con un líquido anticongelante, cuyo principio físico es disminuir el punto de congelación del agua. Se trata de un tratamiento que generalmente se aplica en zonas geográficas frías y con precipitación abundante y frecuente, buscando además eliminar posibles acumulaciones de hielo preexistentes.
 - **Medidas mecánicas:** Se basan en la modificación mecánica de la superficie sobre la cual hay hielo, a fin de desprenderlo por fragilidad. Existen distintas medidas dentro de este conjunto:
 - Botas neumáticas: El hielo formado es eliminado mediante el inflado cíclico de *botas* (cámaras de aire) internas al borde de ataque. provocando la deformación del borde de ataque, y la rotura del hielo por su inherente fragilidad, desprendiéndose de manera bastante sencilla. Cuentan con el inconveniente de ser incapaces de eliminar capas pequeñas de hielo.
 - Sistemas de impulso neumático: Están basados en el mismo principio que el sistema anterior, pero tienen la capacidad de eliminar capas pequeñas de hielo al contar con varios tubos inflables en lugar de uno solo más grande (figura 1.19(a)).

- Electroimpulsos: Una serie de electroimanes son excitados de manera cíclica, deformando la superficie metálica. Su mayor inconveniente es la fatiga que generan sobre el metal.
 - Electro-expulsión: Se hace correr una corriente eléctrica sobre unos alambres de cobre en la superficie, generando un campo magnético que permite romper el hielo en pequeños fragmentos que fácilmente caen del avión.
- **Medidas térmicas:** El hielo se funde por calentamiento de la superficie. En el caso de que el calor sea suficiente para evitar la congelación de las gotas subenfriadas, se denomina antihielo, mientras que si el hielo se elimina una vez formado, se denomina deshielo. Existe una serie de tecnologías actuales dentro de este grupo:
 - Sangrado de aire del motor: Se extrae aire del motor (de la primera etapa de compresor en particular), y se redirige hacia el ala, donde calienta el borde de ataque mediante los denominados tubos de *piccolo* (ver figura 1.19(b)). Otra variante es el uso de conductos S o D, que permiten el calentamiento de los bordes de ataque de las góndolas, evitando el engelamiento en el difusor. También es común su utilización para evitar el congelamiento de los carburadores.
 - Panel electrotérmico: Se trata de calentadores eléctricos embebidos en la superficie a deshelar, basados en el efecto Joule.

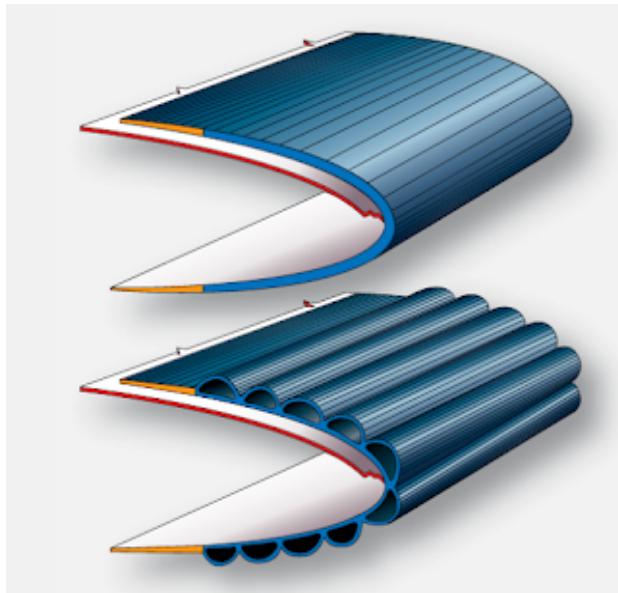
Es necesario destacar que el deshielo mediante medidas térmicas provoca que el agua fluya hacia zonas posteriores, pudiendo volver a congelar y haciéndolo además en una zona desprotegida a priori. Por tanto, hay que ser cuidadosos con la aplicación de estos sistemas. También se debe remarcar que estos métodos suponen una pérdida de potencia notoria, que en muchas situaciones puede no ser importante, pero en aviones pequeños, que adicionalmente, se encuentren ascendiendo, puede ser algo a tener muy en cuenta.

1.9.2.1 Medidas técnicas en desarrollo.

Actualmente existen numerosas investigaciones sobre métodos más efectivos y eficientes de deshielo y antihielo. A continuación se enumeran algunas de las más importantes [?]:

I. Capa de nanotubos de carbono.

Desarrollado por el *Battelle Memorial Institute* en Ohio, EE.UU., consiste en aplicar una capa de nanotubos de carbono en las superficies a proteger de la aeronave, y utilizarlos como un panel



(a) Sistema de deshielo neumático [?].

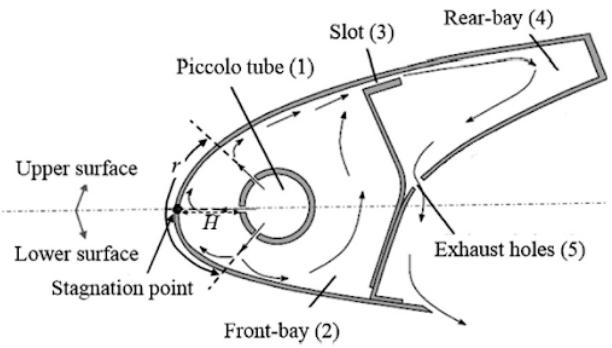


Fig. 1. Schematic of typical wing hot-air anti-icing cavity.

(b) Sistema de deshielo térmico (tubo de piccolo) [?].

Figura 1.19: Sistemas de deshielo actuales.

electrotérmico, es decir, se calienta por el flujo de corriente eléctrica. Se trata de un sistema realmente eficiente, pero sobre todo, muy ligero, rondando el 1% de cualquier equipo antihielo actual [?].

II. Recubrimiento de partículas hidrófugas.

Obra de científicos japoneses, se trata de un recubrimiento superhidrófugo que impide que el agua se adhiera a la superficie del avión, compuesto por politetrafluoroetileno (PTFE), que reduce la energía necesaria para separar una gota de una superficie dada. Se está estudiando su implementación en todo el avión a modo de una capa de pintura.

III. Recubrimiento con plasma.

Llevada a cabo en el centro CICATA de Querétaro, México, se trata de un método que planea cubrir con una película de plasma las superficies expuestas de la aeronave. Los polímeros que componen dicho plasma inducen un aumento de la tensión superficial del agua, incitándola a formar gotas de mayor tamaño que acaban por escurrirse.

Simulación del engelamiento en aeronaves.

2.1 Introducción.

La simulación numérica del proceso de formación de hielo en vuelo sobre una superficie es un proceso realmente complejo, en el que varias cuestiones entran en juego. Se trata de una aproximación modular del problema, en la que se distinguen tres bloques fundamentales:

- La simulación del flujo aerodinámico sobre una geometría dada (en adelante **Módulo CFD**).
- La simulación del impacto de las gotas de agua subenfriada, y su distribución sobre la geometría dada (en adelante **Módulo de impacto de gotas**).
- La simulación de la formación y crecimiento de hielo (en adelante **Módulo termodinámico**)

El funcionamiento completo del código requiere de un módulo que transfiera el efecto de la formación de hielo sobre la geometría original. Dado el coste computacional y la falta de una total automatización del proceso de generación de malla, actualmente se prefiere la transferencia de deformaciones de los nodos superficiales al resto de la malla fluida. La complejidad no reside sólo en la división en módulos del mismo, sino en el modo en que estos interactúan y trabajan de manera conjunta. En primer lugar, la relación entre los módulos CFD y de impacto de gotas parece lógica. Los campos de velocidades y de densidades del fluido determinarán cómo las gotas de agua subenfriada se desplazan hasta impactar con la superficie. En segundo lugar, el módulo termodinámico requiere información de los otros dos. Del módulo CFD, los campos de temperaturas y presiones (aguas arriba y sobre la superficie), así como el esfuerzo viscoso y el flujo convectivo sobre la superficie; y del módulo de impacto de gotas, los datos de impacto, es decir, cantidad, velocidad y temperatura. Más adelante se verá cómo se puede cuantificar cada una de las magnitudes termodinámicas enumeradas. Por último, y cerrando este ciclo de realimentación, la propia formación de hielo causará un desplazamiento

de los nodos del módulo CFD, de modo que el ciclo deberá ser repetido tras actualizar la posición de los nodos de la malla computacional, y así sucesivamente. Una representación de estas interacciones puede verse en la figura 2.1

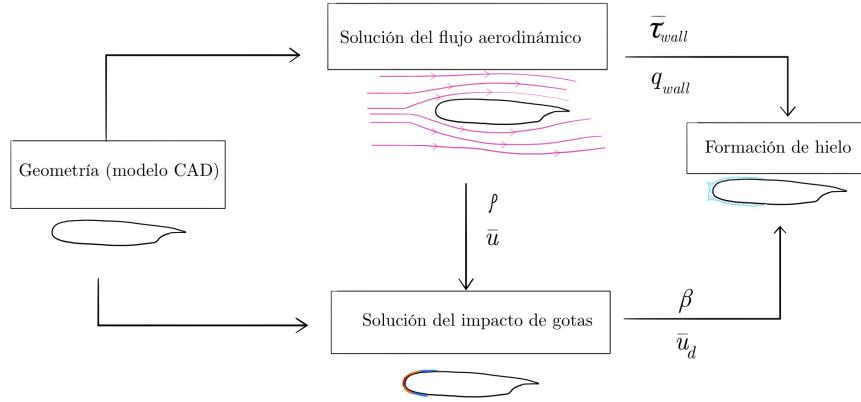


Figura 2.1: Módulos implicados e interacciones entre ellos.

A continuación, se expondrán unas pinceladas sobre cada uno de los módulos, a fin de dar una visión general sobre su funcionamiento y su modelización de cada uno de los fenómenos que tratan de analizar.

2.2 Flujo aerodinámico. Módulo CFD.

2.2.1 Generalidades.

Un solver CFD (*Computational Fluid Dynamics*) tiene como misión discretizar un campo fluido alrededor de una geometría dada (sea bidimensional o tridimensional), y simular la dinámica del movimiento de dicho campo fluido bajo unas ciertas condiciones e hipótesis. Se trata de una parte muy compleja y de muy alto consumo de recursos de cualquier simulación, y en particular del problema de la formación de hielo. Sin embargo, desde el punto de vista computacional, es la generación de una nueva malla CFD la parte que más recursos consume del proceso completo. Los métodos numéricos que permiten resolver las ecuaciones de la mecánica de fluidos son amplios, numerosos y muy distintos en simplicidad, hipótesis, precisión y coste computacional. Con gran generalidad, la práctica totalidad de la mecánica de fluidos está descrita de forma exacta por las ecuaciones de Navier-Stokes, ecuaciones de las que sin embargo no se conoce la solución analítica. Para un estudio detallado sobre los distintos

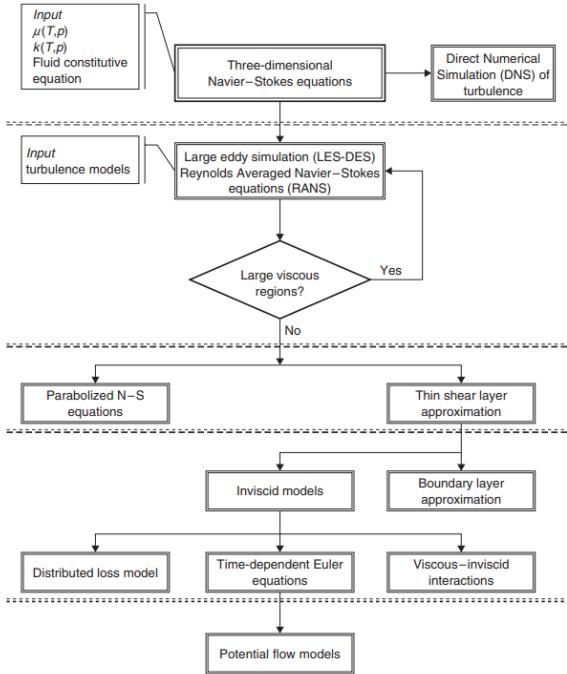


Figura 2.2: Jerarquía de los distintos métodos CFD en relación a su complejidad. [?]

planteamientos y su complejidad, se recomienda consultar [?] (en particular, el capítulo 2).

En la figura 2.2 se muestra la jerarquía de los distintos niveles de aproximación de la solución numérica del campo fluido. En general, se trata de tres conceptos o hipótesis los que diferencian unos modelos de otros: la turbulencia, la viscosidad y la compresibilidad, en orden decreciente de complejidad. Partiendo de las ecuaciones de Navier-Stokes, la sustitución de modelos de viscosidad y conductividad por un modelo directo de turbulencia deriva en las llamadas ecuaciones RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*). Un nivel posterior de simplicidad aparece si se desprecian grandes zonas de flujo viscoso, apareciendo las ecuaciones de Navier-Stokes parabolizadas y los modelos de capa límite, en los cuales el campo fluido se separa en un campo externo, donde el flujo puede aproximarse por ideal (sin viscosidad y mucho más sencillo) y un campo interno, la denominada capa límite, donde la viscosidad no puede ser despreciada. Los modelos no viscosos se refieren fundamentalmente a las denominadas ecuaciones de Euler, mientras que las capas límite son modelizadas de muy variadas formas. En un último nivel de simplicidad se encuentran los modelos de flujo potencial, donde se considera un flujo ideal en todas las regiones del campo fluido. Es interesante remarcar que, dado un solver de unas ciertas características, es razonablemente sencillo adaptarlo para simulaciones de menor complejidad: Un solver tridimensional puede funcionar como bidimensional, uno que simule la compresibilidad puede despreciarla, etc.

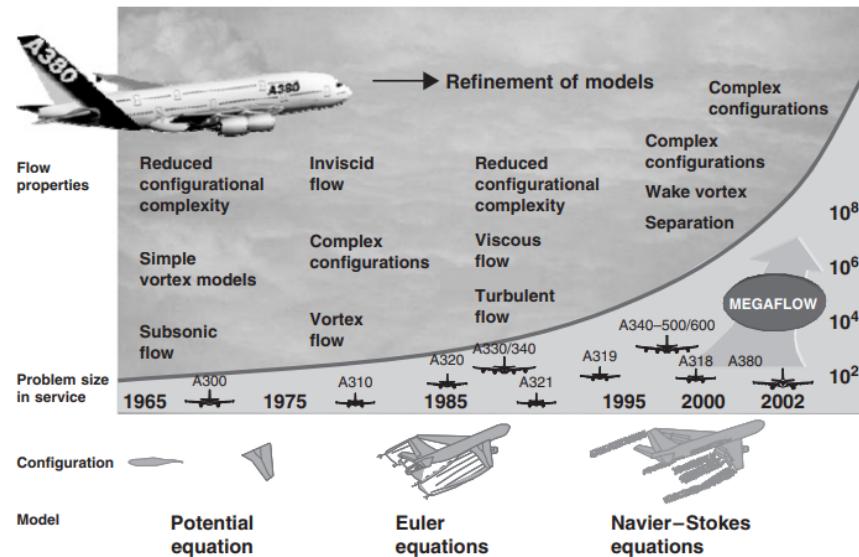


Figura 2.3: Evolución de las herramientas CFD utilizadas por Airbus. [?]

Desde las primeras herramientas CFD, que comenzaron a aplicarse en la aeronáutica en los años 60, se ha producido un enorme desarrollo y refinado de las mismas, escalando en la jerarquía descrita anteriormente. En la figura 2.3 se puede ver el avance de los métodos utilizados [?]. Uno de los aspectos que más destaca de esta evolución es cómo se ha pasado de únicamente analizar la aerodinámica de alas (de perfiles originalmente), de geometría razonablemente regular, a analizar un gran número de partes de la aeronave. Por otra parte, en la figura 2.4 se puede observar cada una de las partes del Boeing 777 diseñadas esencialmente a través de métodos CFD. Pese a lo costoso de su desarrollo, han supuesto un valioso recurso en muchas dimensiones. Podría parecer que el ahorro en ensayos aerodinámicos de alas, tanto en fases tempranas de desarrollo como en el diseño de detalle, podría ser la mayor de las ventajas. Pese a lo significativo de dichas mejoras, existe un impacto estratégico muchísimo más crítico: el ahorro de tiempo en las fases de desarrollo. En el mercado aeronáutico, el tiempo empleado en desarrollar y certificar aeronaves es de un valor incalculable, y el CFD ha permitido (aún teniendo margen de crecimiento) recortar este trámite de manera significativa.

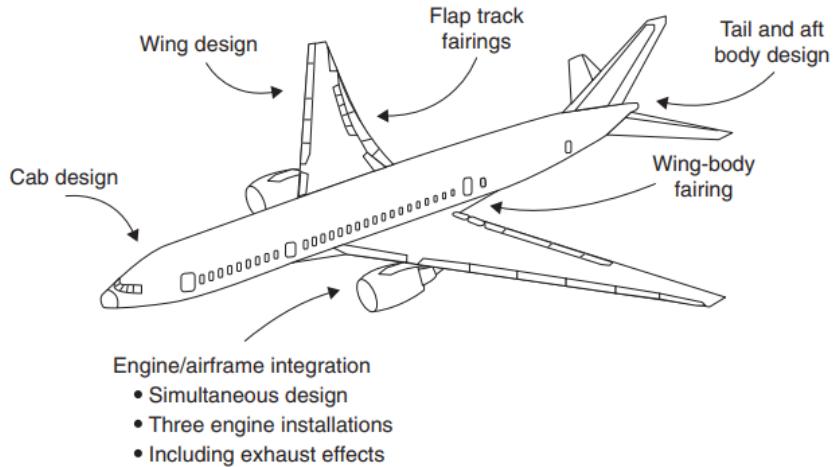


Figura 2.4: Papel del CFD en el diseño del Boeing 777. [?]

2.2.2 Solver CFD TAU.

El solver utilizado para simular los flujos aerodinámicos es el TAU-Code [?], desarrollado inicialmente por el *DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt)*. Se trata de un código de predicción de flujos viscosos y no viscosos alrededor de geometrías complejas, desde el régimen subsónico bajo hasta el hipersónico, empleando mallas híbridas no estructuradas. Realmente, el TAU-Code es más bien un sistema de software, compuesto por un conjunto de módulos y librerías, un enfoque que facilita su desarrollo, mantenimiento y reutilización. Cada uno de sus módulos puede ser utilizado como una herramienta independiente, mediante ficheros de entrada y salida o bien haciendo uso del lenguaje Python, que permite la comunicación intermodular y la simplificación en cuanto a la manipulación de archivos.

Una gran ventaja del TAU-Code es su muy alta eficiencia cuando se aplica la computación en paralelo, una habilidad casi imprescindible en cualquier tipo de simulación que requiera una cierta potencia computacional. Mientras que la aplicación principal del TAU es la simulación de flujos complejos en aeronaves, existen extensiones del código que permiten aplicarlo para flujos de reentrada, donde la química del gas toma un papel de gran importancia.

El desarrollo del código TAU, conceptualizado inicialmente en la década de los 90 en Göttingen, ha sido posible gracias a numerosos proyectos de investigación a nivel nacional e internacional, siendo los núcleos principales los institutos del *DLR* en Göttingen y en Braunschweig. Desde sus primeras etapas de desarrollo, se decidió que los recursos no eran suficientes como para incluir una herramienta de generación de mallas no estructuradas. No se hizo por despreciar su importancia, ya que supo-

ne un aspecto crítico de toda simulación, sino por reconocer que había sistemas en el mercado más que capaces de realizar dicha función. Se establecieron para ello colaboraciones estratégicas para facilitar la compatibilidad y la aplicabilidad del TAU. Prueba de ello son el software CENTAUR (de *CentaurSoft*), dedicado a la generación de mallas de tipo híbrido, y el software SOLAR, orientado exclusivamente a mallas no estructuradas.

A continuación pasan a describirse brevemente cada uno de los módulos básicos que constituyen el sistema de software TAU:

I. Fraccionamiento de mallado.

Esta herramienta tiene como función la división inicial de un mallado dado en varios dominios. Es posible que, en función de los resultados, sea necesario un refraccionamiento.

II. Pre-proceso.

El pre-proceso es una parte fundamental de cualquier simulación. Se trata de un proceso que convierte el mallado geométrico en algo con sentido físico, con las métricas específicas, las conectividades y la numeración de cada uno de los volúmenes de control resultantes del mallado.

III. Solver.

El solver del TAU-Code utiliza un tipo de esquema para los términos viscosos y otro diferente para el resto de términos, manteniendo la precisión de segundo orden en el espacio. En cuanto a la integración temporal del problema, durante mucho tiempo (y hasta la actualidad) se utiliza un método explícito de Runge-Kutta, con algunos retoques que aceleran la convergencia del esquema. Sin embargo, un problema importante de este esquema es la restricción existente sobre el número CFL (cuya definición se verá más adelante), que en términos sencillos implica que el paso de tiempo está seriamente limitado por arriba. Por tanto, el número de pasos temporales es indeseablemente alto, o por lo menos recordable. A consecuencia de esto, se desarrolló e implementó un nuevo método de tipo *LU-SGS* (*Lower-Upper Symmetric Gauss-Seidel*), que incluye un escaso requerimiento de memoria, un bajo número de operaciones necesarias y además facilita la computación en paralelo. Numéricamente, se trata de un esquema virtualmente incondicionalmente estable, permitiendo un paso temporal mayor que el Runge-Kutta. La mejora del rendimiento conseguida con este método puede plasmarse con el ahorro en tiempo de cálculo, reduciendo el valor total de éste en un factor de 2.5 respecto al método Runge-Kutta.

IV. Adaptación del mallado.

A fin de resolver zonas detalladas del flujo, un algoritmo de adaptación de mallados híbridos basado en el refinado local fue incluido entre los módulos del sistema TAU. Este algoritmo fue extendido también para lo contrario, es decir, reducir el refinado de la malla en zonas donde la complejidad del flujo haya disminuido con respecto a instantes anteriores. Este método de refinado local alivia el consumo de memoria, a costa de un incremento del tiempo de computación. En el caso de usar métodos de refinado local, el coste computacional y de memoria sería ingentemente mayor.

V. Deformación del mallado.

Una herramienta fundamental del código en vistas de su aplicación a la aeronáutica es la asimilación de cambios en la geometría, debidos por ejemplo a la actuación de fuerzas aerodinámicas sobre la estructura estudiada. Pese a que esto entra en el campo de la elasticidad, bien es cierto que una aproximación sencilla a la par que precisa es la elasticidad lineal.

VI. Implementación de CHIMERA.

La técnica CHIMERA es una prestación del código cuya principal aplicación es el análisis de aeronaves en maniobra, donde superficies de control en movimiento entran en juego.

VII. Modelización de la turbulencia y la transición.

Los modelos de turbulencia implementados en el TAU-Code incluyen formas funcionales que aproximan la viscosidad de forma tanto lineal como no lineal, con una o dos ecuaciones dependiendo del modelo exacto. Por defecto, el modelo de turbulencia es el de Spalart-Allmaras con la modificación de Edwards. No se entra en mayores discusiones acerca de este tema por lo complejo del mismo y por no ser relevante en este estudio.

2.2.2.1 Aplicaciones y validación del solver TAU.

El espectro de aplicación del sistema TAU-Code es razonablemente amplio, extendiéndose desde el análisis bidimensional en subsónico bajo de perfiles aerodinámicos hasta la computación de simulaciones tridimensionales de vehículos espaciales en flujos hipersónicos. Entre medias se encuentra por supuesto el análisis de aviones de transporte y militares, así como helicópteros. Las simulaciones más típicas llevadas a cabo sin embargo son sobre los aviones de transporte, simulándose condiciones de crucero, alta sustentación (aterrizaje y despegue) así como situaciones fuera de diseño. Los resultados derivados de los análisis son coeficientes de fuerzas y momentos, aspectos de la mecánica del vuelo y

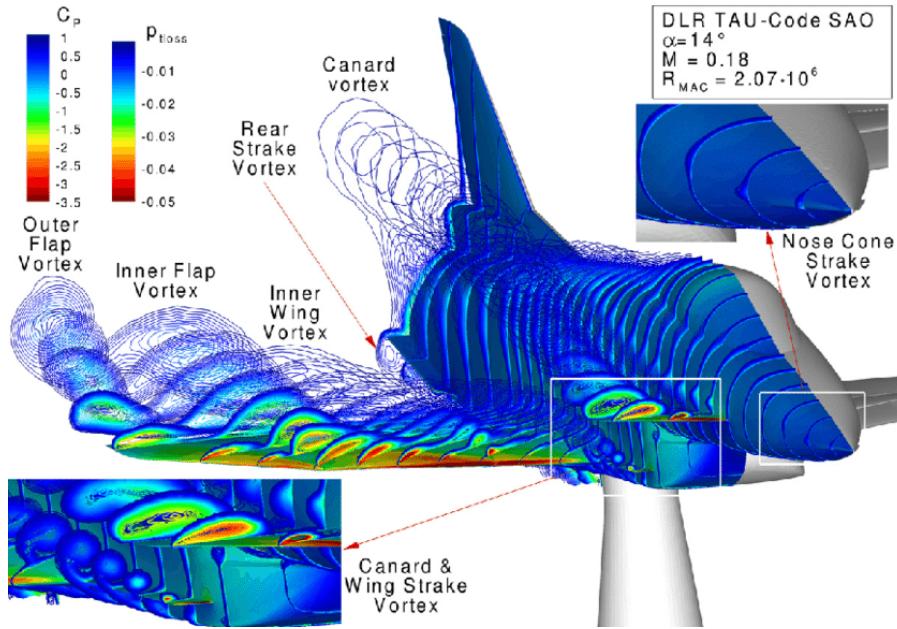


Figura 2.5: Simulación del flujo alrededor del X-31 mediante el solver TAU. [?]

respuesta estructural; a fin de estudiar la respuesta de sistemas de control, la integración del motor, la optimización de las configuraciones de alta sustentación y la validación con resultados experimentales preexistentes. Un ejemplo de la aplicación del TAU puede verse en la figura 2.5, donde se observa una simulación del flujo sobre el X-31, con detalles sobre la morfología del flujo [?].

2.3 Impacto de gotas.

2.3.1 Generalidades.

El cálculo de la trayectoria e impacto de las gotas es una característica imprescindible de la simulación de la formación y crecimiento de hielo, pues son las gotas subenfriadas las que realmente inducen la existencia de una masa de agua congelada sobre el cuerpo estudiado. Los resultados que se necesitan son una cuantificación del impacto de las gotas a lo largo del cuerpo, así como la velocidad con que dicho impacto se realiza en cada punto, mediante los cuales se consigue obtener la masa de agua y la entalpía que entra en el volumen de control.

Las ecuaciones que rigen el movimiento del fluido no varían por la presencia de las gotas, dada la muy escasa cantidad de las mismas en comparación con el volumen de aire estudiado; por lo tanto, es válida (y necesaria) la utilización de los resultados volcados por el solver CFD que se utilice (el TAU-Code en este caso). Para el análisis de la dinámica de las gotas, existen dos planteamientos

fundamentales: el enfoque lagrangiano, que se centra en cada una de las gotas y las acompaña en su movimiento, y el enfoque euleriano, que estudia un cierto volumen de control que constantemente es atravesado por las gotas. Se trata de dos puntos de vista muy diferentes, pero que en el caso de resolverse de forma adecuada, derivan en unos resultados idénticos. Destacar que el enfoque euleriano es el empleado en la mecánica de los fluidos, mientras que un enfoque lagrangiano es más adecuado para la dinámica de partículas.

Tanto en un modelo como otro, el objetivo es obtener dos distribuciones: la eficiencia o parámetro de colección β , definido físicamente como la cantidad de agua que impacta sobre una cierta región en comparación a la que impactaría si estuviera expuesta directamente a la corriente sin perturbar, es decir [?]:

$$\beta \equiv \frac{\left(\frac{\dot{m}_\beta}{A} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_\beta}{A} \right)_\infty}$$

Dependiendo de la formulación, se obtiene una expresión funcional distinta. La segunda magnitud a calcular es la velocidad de impacto de las gotas. Se verá que todas las ecuaciones planteadas se resuelven para un diámetro de gota particular, d , pero como resulta natural, las nubes contienen una cierta distribución de tamaño de gotas. Para computar el impacto de gotas de distinto tamaño, es útil plantear particiones del intervalo de diámetros presentes en un tipo de nube dada, y resolver cada una de las clases derivadas como un problema independiente. Denotando el porcentaje de la clase i -ésima presente en una nube como p_i y el coeficiente de captación para dicha clase como β_i y considerando un conjunto de N clases de gotas, el parámetro de captación total de una región dada resulta:

$$\beta = \sum_{i=1}^N p_i \beta_i$$

Un modelo muy ampliamente utilizado de una nube típica de engelamiento es la distribución Langmuir-D. Dado un *MVD* (*Mean Volumetric Diameter*), el modelo da los valores de probabilidad p_i y de los diámetros de cada clase d_i , centrados en torno al valor del *MVD*, como parece lógico. En la tabla 2.1 se muestra la distribución de Langmuir-D para un valor de $MVD = 16\mu m$.

Una vez han sido tratados los conceptos básicos del impacto de gotas, se pasa a estudiar cada una de las aproximaciones enunciadas: la lagrangiana y la euleriana.

Porcentaje del LWC (%)	Diámetro de gota (μm)
0.05	5
0.1	8.3
0.2	11.4
0.3	16
0.2	21.9
0.1	27.8
0.05	35.5

Tabla 2.1: Distribución Langmuir-D de diámetros de gota para $MVD = 16\mu m$

2.3.1.1 Enfoque lagrangiano.

Las hipótesis generales tomadas en el enfoque lagrangiano son las siguientes [?]:

- La influencia de las gotas sobre el campo fluido es despreciable.
- Las gotas son perfectamente esféricas, sin deformación ni ruptura.
- No hay colisión ni coalescencia de gotas.
- Las únicas fuerzas que aparecen son la resistencia, la gravedad y la flotación (que generalmente es despreciable)

El tamaño de la gota determinará el equilibrio entre las fuerzas de inercia y las de resistencia. Las gotas pequeñas seguirán casi perfectamente las líneas de corriente hasta el impacto, mientras que las más grandes seguirán su propia inercia hasta dicho instante. La ecuación a aplicar es la ecuación de Newton a cada gota. Considerando como únicas fuerzas sobre la misma la gravedad y la resistencia aerodinámica, se obtiene:

$$m_d \bar{\gamma}_d = \frac{1}{2} \rho_a A_d |\bar{V}_r| \bar{V}_r C_d + m_d \bar{g}$$

Donde m_d es la masa de la gota (*droplet*), $\bar{\gamma}_d$ su aceleración, A_d su área frontal (círculo), y \bar{V}_r su velocidad relativa al aire. Asimismo, C_d es el coeficiente de resistencia, que depende del número de Reynolds de la gota ($Re_d = \frac{|\bar{V}_r| d}{\nu}$), ρ_a la densidad del aire y \bar{g} el vector de la gravedad.

Para calcular las trayectorias de manera numérica, se resuelve la ecuación diferencial anterior mediante su integración numérica, generalmente utilizando un esquema Runge-Kutta. Para ello, es necesario decidir la posición de lanzamiento, que en un caso bidimensional, viene dado por una coordenada x en el sentido del flujo y una coordenada y perpendicular a él. La primera de ellas se escoge de forma que la velocidad del flujo en dicho punto sea prácticamente la del fluido en el infinito sin

perturbar, a lo largo del rango en y escogido, es decir:

$$\left| 1 - \frac{U(x_0, y)}{U_\infty} \right|_{y_{0,min}}^{y_{0,max}} \leq \varepsilon, \quad \forall y \in [y_{0,min}, y_{0,max}]$$

Donde ε , $y_{0,min}$ y $y_{0,max}$ son parámetros que, junto a x_0 , definen la región de lanzamiento de las gotas. Una representación la estructura mencionada se encuentra en la figura 2.6. Los valores extremos de la coordenada y se obtienen tras sucesivas iteraciones, imponiendo que sean los puntos desde los cuales una gota presenta una trayectoria tangente al cuerpo (perfil en este caso). Para determinar, por ejemplo, el límite superior, el programa *LEWICE* [?] opera del siguiente modo. En primer lugar, el usuario especifica unos valores iniciales (al alza en principio), $y_{0,min}$ e $y_{0,max}$, de modo que en ambos casos las trayectorias no impacten sobre el perfil. Hecho esto, se calcula la trayectoria para una coordenada intermedia $y_{0/1}$, definido como el punto medio entre $y_{0,min}$ y $y_{0,max}$. Si la trayectoria sigue sin impactar, se calcula el punto medio entre éste último punto y el límite inferior $y_{0,min}$ (buscando el impacto); mientras que si impacta, se calcula el punto medio entre $y_{0/1}$ e $y_{0,max}$. De este modo, se busca limitar el dominio en el que se pasa de no haber impacto a haberlo, utilizando básicamente el método de la bisección.

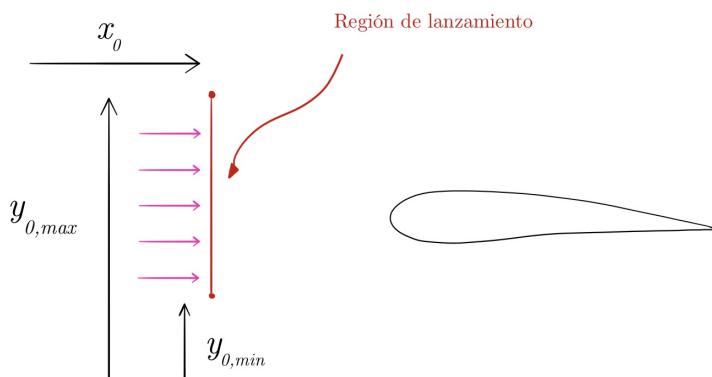


Figura 2.6: Esquema de la región de lanzamiento.

Una vez se ha obtenido la región de lanzamiento, se calculan las trayectorias para un número de puntos dentro de dicha región, así como el punto donde impacta y su velocidad al alcanzarlo. En

particular, para obtener el valor del coeficiente de captación local β , se acude a su definición, es decir:

$$\beta(s) \equiv \frac{\left(\frac{\dot{m}_\beta}{A}\right)}{\left(\frac{\dot{m}_\beta}{A}\right)_\infty} = \frac{A_\infty}{A} = \frac{dy_0}{ds}$$

Donde dy_0 es la amplitud de la región de lanzamiento donde están previamente las gotas que impactan en el segmento ds . A nivel global, por tanto, el coeficiente de captación resulta:

$$\beta_{TOT} = \frac{1}{H} \int_{s_L}^{s_U} \beta(s) ds = \frac{y_0}{H}$$

Donde s_L y s_U son la posición, medida como arco de la curva que representa el perfil, de los límites de impacto inferior y superior. El cálculo anterior es análogo para unos límites discretos s_i y s_j , obteniéndose el promedio en una hipotética celda. Asimismo, y_0 es la amplitud total de la región de lanzamiento, y H es la proyección ortogonal del perfil sobre la región de lanzamiento (ver figura 2.7).

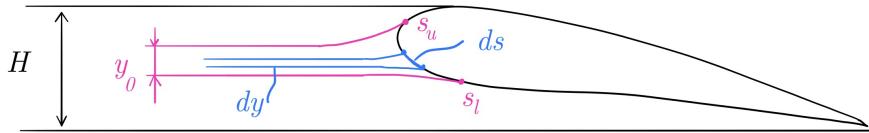


Figura 2.7: Esquema de los coeficientes de captación local y global

Los métodos de tipo lagrangiano son muy efectivos en problemas en dos dimensiones, pero requieren de un gran esfuerzo computacional para el paso a problemas tridimensionales, debido a la tediosa tarea de la determinación de la región de lanzamiento.

2.3.1.2 Enfoque euleriano.

En los modelos de tipo euleriano hay una serie de hipótesis simplificativas [?]:

- Se considera un medio continuo (las gotas están uniformemente distribuidas).
- Las gotas son perfectamente esféricas, sin deformación ni ruptura.
- No hay colisión ni coalescencia de gotas.
- No hay intercambio de calor ni masa entre las gotas y el entorno.

- Se desprecian efectos de la turbulencia sobre las gotas.
- Las únicas fuerzas que aparecen son la resistencia, la gravedad y la flotación (que generalmente es despreciable).

Las variables físicas a determinar en este método son el volumen de agua en relación al volumen total de fluido $\alpha(\bar{x}, t)$ y el campo de velocidades adimensional de las gotas $\bar{u}_d(\bar{x}, t)$. Para ello, se integran las ecuaciones de continuidad y de cantidad de movimiento, expresadas de manera conveniente en las variables anteriores como:

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \bar{u}_d) = 0 \\ \frac{\partial \bar{u}_d}{\partial t} + \bar{u}_d \cdot \nabla \bar{u}_d = \frac{C_D Re_d}{24K} (\bar{u}_a - \bar{u}_d) + \left(1 - \frac{\rho_a}{\rho_w}\right) \frac{1}{Fr^2} \bar{g} + \frac{\rho_a}{\rho_w} \left(\frac{\partial \bar{u}_a}{\partial t} + \bar{u}_a \cdot \nabla \bar{u}_a \right) \end{cases}$$

donde \bar{u}_a es el campo de velocidades adimensional del aire (conocido a través del solver CFD) y ρ_w es la densidad del agua. Las constantes involucradas en la segunda ecuación son:

- Fr : Número de Froude, que expresa el cociente fuerzas de inercia-fuerzas másicas, y responde a:

$$Fr = \frac{U_\infty}{\sqrt{l g_0}}$$

siendo l la longitud característica del problema (cuerda del perfil).

- K : Parámetro de inercia, definido como:

$$K = \frac{\rho_w d^2 U_\infty}{18 l \mu}$$

siendo d el diámetro de las gotas y μ la viscosidad dinámica del agua.

- C_D : Coeficiente de resistencia, generalmente función del n° de Reynolds, que en este caso responde a: $Re_d = \frac{\rho_w d U_\infty |\bar{u}_a - \bar{u}_d|}{\mu}$.

Una posible aproximación para la resolución de las ecuaciones anteriores (la escogida por Beaugendre et al, [?]) es el método de Galerkin. Una vez calculados los valores de las variables α y \bar{u}_d en el campo

fluido, los valores requeridos para la computación del crecimiento de hielo se obtienen como sigue:

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta \equiv \frac{\left(\frac{\dot{m}_\beta}{A} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_\beta}{A} \right)_\infty} = \frac{\bar{U}_d \cdot \bar{n}}{U_\infty} \frac{LWC}{LWC_\infty} = -\alpha \bar{u}_d \cdot \bar{n} \\ \bar{U}_d = U_\infty \bar{u}_d \end{array} \right.$$

Este tipo de planteamiento supone una complejidad a priori mayor, pero es fácilmente extrapolable a problemas en tres dimensiones, en contraposición a la formulación lagrangiana

2.4 Formación y crecimiento de hielo.

El módulo termodinámico es el encargado de la simulación de la formación y crecimiento de hielo en un cuerpo dado. Su concepto básico de funcionamiento es, en virtud de ciertos datos obtenidos de los otros dos módulos, aplicar las ecuaciones de conservación de la termofluidodinámica a un cierto volumen de control apoyado sobre la superficie del cuerpo. El resultado principal que se deriva de este módulo es la distribución de la masa de hielo formada sobre el cuerpo simulado, pudiendo realizarse la simulación en un solo paso (*one-shot*) o bien con sucesivos ciclos de simulación CFD-impacto de gotas-termodinámica (*multi-step*). Además, existen dos enfoques generales a la hora de resolver las ecuaciones termodinámicas sobre una superficie dada: por un lado el método de Messinger [?], de enfoque algebraico, en el que se plantea directamente el equilibrio termodinámico, y, por otro, el método basado en el planteamiento de las ecuaciones de conservación de la mecánica de fluidos en el volumen de control en cuestión, que conducen a la resolución de un sistema de ecuaciones en derivadas parciales (*EDPs*) [?].

Métodos *one-shot* y métodos *multi-step*.

Los métodos *one-shot* presentan como ventaja la sencillez de su proceso de resolución, ya que no requieren la interacción explícita entre los módulos termodinámicos y de CFD. En su contra está que la convergencia de los resultados no es total, puesto que, en cierto modo, se desprecian los efectos de la formación de hielo sobre el flujo aerodinámico.

Por su parte, los métodos *multi-step* presentan una mayor complejidad pero los resultados son, como cabe esperar, más precisos y consistentes con la realidad. En el presente proyecto, y debido a la falta de manejo del código TAU, se ha optado por un método de tipo *one-shot*, pese a lo cual el módulo en sí no difiere mucho de lo que sería un planteamiento *multi-step*. En particular, sería necesario ajustar

los datos de salida y crear un código que calcule los desplazamientos nodales asociados. En la figura 2.8 se encuentran representados conceptualmente ambos tipos de métodos, y en la figura 2.9, se muestra un diagrama de flujo en cada caso.

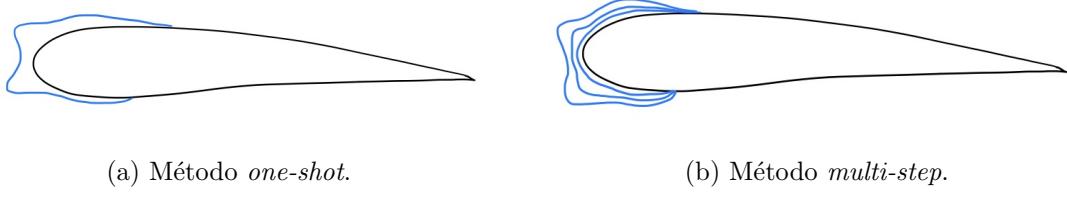


Figura 2.8: Representación esquemática del funcionamiento de los distintos métodos de simulación de crecimiento de hielo.

2.4.1 Generalidades del problema.

El primer paso, previo al planteamiento de las diferentes metodologías enumeradas, es fijar la termodinámica del problema, es decir, a cada uno de los fenómenos que entran en juego. Supóngase un perfil aerodinámico sometido en un flujo aerodinámico con condiciones propicias para el engelamiento. En tales condiciones, se producen los siguientes flujos másicos y energéticos:

- **Flujos másicos:**

- Impacto de gotas (\dot{m}_β).
- Evaporación y/o sublimación de agua (\dot{m}_{evap}).
- Formación de hielo (\dot{m}_{ice}).
- Flujo de agua líquida sobre el perfil ($\dot{m}_{l,in/out}$).

- **Flujos energéticos:**

- Energía cinética de las gotas ($\dot{Q}_{\beta,k}$).
- Energía térmica de las gotas (estado subenfriado) ($\dot{Q}_{\beta,T}$).
- Evaporación y/o sublimación de agua (\dot{Q}_{evap}).
- Calentamiento aerodinámico por fricción viscosa ($\dot{Q}_{conv,\mu}$).
- Flujo de calor por formación de hielo (\dot{Q}_{ice}).
- Flujo de calor por el flujo de agua líquida sobre el perfil ($\dot{Q}_{l,in/out}$).
- Flujo de calor por convección (\dot{Q}_{conv}).

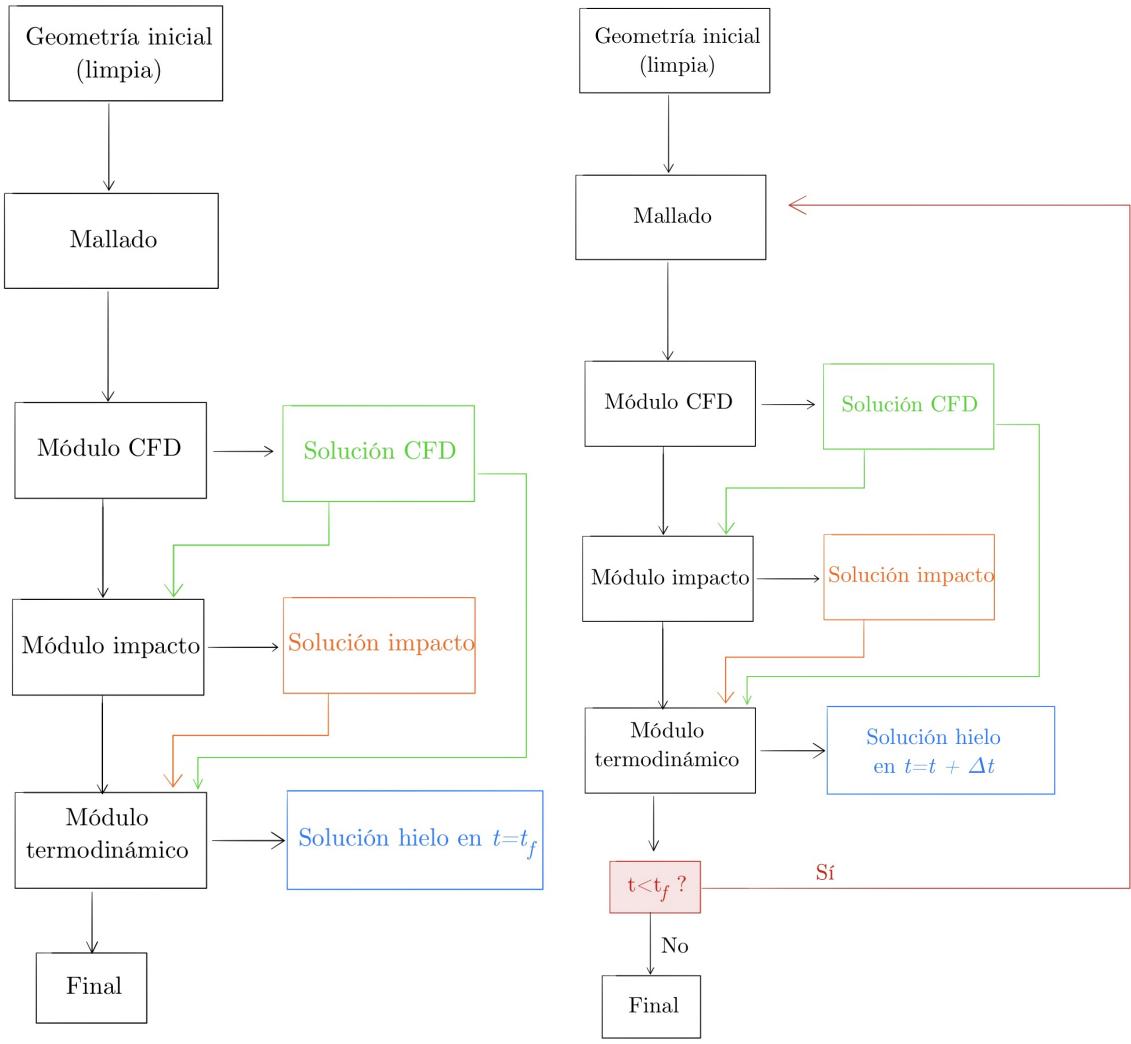


Figura 2.9: Diagramas de flujo de cada uno de los métodos de simulación de crecimiento de hielo.

- Flujo de calor por radiación (\dot{Q}_{rad}).
- Flujo de calor por conducción (contacto con el perfil) (\dot{Q}_{cond}).

De entre los anteriores términos, un análisis preliminar indican que los flujos de calor por radiación y por conducción resultan despreciables frente al resto de términos. También es cierto que ciertos términos desaparecen bajo determinadas condiciones (por ejemplo, en caso de que todo el impacto de gotas se convierta en hielo, no hay flujo de agua líquida). A partir de ahora, surgen dos formas de plantear las ecuaciones de la termodinámica: el enfoque de Messinger y el enfoque basado en ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (*PDE based*).

2.4.1.1 Modelización de Messinger.

El planteamiento de Messinger (ver [?]) presenta un tratamiento algebraico del problema, resolviendo el equilibrio termodinámico como un conjunto de términos fuente y sumidero en las ecuaciones de la masa y de la energía. Considérese el volumen de control Ω (véanse las figuras 2.10(a) y 2.10(b)), de una forma arbitraria pero apoyado sobre la superficie del ala (o del hielo en caso de existir previamente). De la aplicación de la ecuación de conservación de la masa al mismo se deriva:

$$\dot{m}_{l,in} - \dot{m}_{l,out} + \dot{m}_{imp} - \dot{m}_{evap} - \dot{m}_{ice} = 0$$

Se define la fracción de hielo formada, f , como la cantidad de masa de hielo formada en relación la masa total que entra en el volumen de control, es decir

$$f \equiv \frac{\dot{m}_{ice}}{\dot{m}_\beta + \dot{m}_{l,in}}$$

resultando la ecuación de conservación de la masa:

$$\dot{m}_{l,out} = (1 - f) (\dot{m}_\beta + \dot{m}_{l,in}) - \dot{m}_{evap}$$

La aplicación de la ecuación de la energía a dicho volumen de control resulta en:

$$\dot{Q}_{l,in} - \dot{Q}_{l,out} + \dot{Q}_{imp} - \dot{Q}_{evap} - \dot{Q}_{ice} - \dot{Q}_{conv} = 0$$

donde se han agrupado los términos de convección y fricción viscosa en \dot{Q}_{conv} . La ecuación anterior se puede modificar, introduciendo expresiones y modelos para los flujos de entalpía. La resolución de las dos ecuaciones resultantes se encuentra desarrollado en [?], pormenorizando cada uno de los casos.

2.4.1.2 Planteamientos basados en ecuaciones en derivadas parciales.

Los métodos basados en ecuaciones diferenciales se fundamentan en las ecuaciones de conservación de la mecánica de fluidos a un volumen de control extendido desde la superficie del ala (hielo si lo hubiere) hasta la superficie libre del líquido (mostrado anteriormente en las figuras 2.10(a) y 2.10(b)). Para un desarrollo más en detalle, se recomienda acudir al capítulo quinto, donde se encuentran plasmadas con mayor detalle. A efectos de este apartado, se adjuntan a continuación, comenzando por la

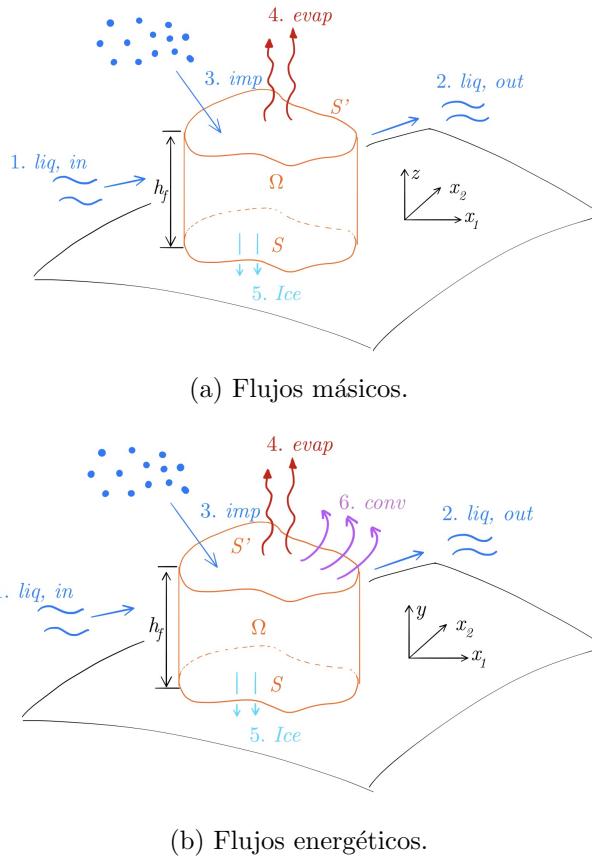


Figura 2.10: Volumen de control utilizado en la modelización de la formación de hielo.

ecuación de conservación de la masa:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{S_i} \int_{\partial\Omega_i} (\bar{\mathbf{U}}_f h) \mathbf{n} d\sigma = \frac{1}{S_i} \frac{\dot{m}}{\rho_w}$$

donde S_i es el área de la superficie del volumen de control apoyada sobre el ala o cuerpo en cuestión, h es el espesor de la película líquida y $\bar{\mathbf{U}}_f$ es la velocidad del agua promediada en el espesor. El término fuente de flujos másicos \dot{m} agrupa las siguientes aportaciones:

$$\dot{m} \equiv \dot{m}_{imp} - \dot{m}_{evap} - \dot{m}_{ice}$$

Por otra parte, la ecuación de la conservación de la entalpía en el volumen de control Ω_i resulta, tras unas ciertas modificaciones, en:

$$\frac{\partial hT}{\partial t} + \frac{1}{S_i} \int_{\partial\Omega_i} (\mathbf{U}_f hT) \mathbf{n} d\sigma = \frac{1}{S_i} \frac{\dot{Q}}{\rho_w}$$

donde T hace referencia a la temperatura de la película de agua líquida, y \dot{Q} es el término fuente de la ecuación, de expresión:

$$\dot{Q} \equiv \dot{Q}_{imp} - \dot{Q}_{evap} + \dot{Q}_{ice} + \dot{Q}_{conv}$$

Las ecuaciones desarrolladas hasta ahora cuentan con un serio problema. Si bien son dos ecuaciones, involucran tres incógnitas: el espesor h , la temperatura T y el flujo másico de hielo \dot{m}_{ice} . Para resolver este inconveniente, se imponen una serie de restricciones termodinámicas, como se verá más adelante, restricciones que concluyen en una superficie matemática que supone la condición de cierre del problema. El método planteado en este proyecto para la resolución de las ecuaciones anteriores se basa en la utilización de una variable y una ecuación de cierre (la mencionada superficie); esto es, en función de una hipótesis inicial, se supone conocida una de las variables, y con ella se resuelven las ecuaciones diferenciales una vez han sido convenientemente discretizadas. Todo esto se encuentra pormenorizado en el capítulo quinto del trabajo.

2.5 Consideraciones finales.

El problema de la formación de hielo en vuelo tiene una gran dificultad inherente, tanto a nivel global por la interacción de sus módulos involucrados, como por la complejidad de cada uno de ellos por separado. El enfoque modular permite hasta cierto punto variar cada componente de manera independiente (sea el solver CFD, el cálculo de las trayectorias de las gotas o el módulo termodinámico). De su interacción surge la primera gran dificultad: el mallado del problema. Si bien lo ideal sería un mallado para cada módulo, optimizado para su funcionamiento individual, esto resulta una tarea inabordable y, dado que el más restrictivo en este respecto es el solver CFD, se utilizará su mallado para todos los problemas. Toda esta complejidad se vuelve aún más acusada al considerar un problema tridimensional, a nivel modular y a nivel sistemático. Remarcando por último que el principal objeto de este trabajo es desarrollar un módulo termodinámico eficiente y robusto (en principio para un problema bidimensional), basado en el enfoque diferencial mediante la aplicación de las ecuaciones de conservación de la mecánica de fluidos. Para ello, se analizarán en el siguiente capítulo los diferentes métodos numéricos de modelización y discretización de problemas físicos basados en ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.

Conclusiones y futuros estudios.

Una vez desarrollado por completo el proyecto, es de obligado cumplimiento realizar un análisis de las conclusiones que se puedan extraer al respecto. Resulta de especial valor hacerlo en referencia a los objetivos planteados al principio del documento, y evaluando en qué grado han sido satisfechos cada uno de ellos:

- En primer lugar, el fenómeno del engelamiento ha sido estudiado e investigado de manera apropiada, a un nivel más que adecuado para los efectos del trabajo en su conjunto. Se han cubierto aspectos relativos a la fenomenología meteorológica, sus efectos y la prevención de los mismos, desde un enfoque predictivo, de detección y de actuación al respecto.
- Por otra parte, se han introducido con un cierto rigor los conceptos básicos de la simulación del crecimiento de hielo en su conjunto, con una descripción preliminar de cada módulo que toma cartas en el proceso global y el modo en que interactúan. Asimismo, se han mostrado las características básicas de cada uno de los módulos auxiliares (no propiamente desarrollados) del problema: el solver TAU-Code y el módulo GOTA. Se han presentado también los distintos enfoques posibles en el modelo físico de cada uno de los bloques.
- Con respecto al establecimiento de las bases del método de los volúmenes finitos, se puede afirmar que ha sido un éxito, implementando y validando métodos para problemas cada vez más complejos, pasando de la sencilla ecuación de la advección a las ecuaciones de Euler, con una física y una discretización más compleja.
- El desarrollo de un módulo termodinámico para la formación de hielo basado en ecuaciones diferenciales ha resultado realmente complicado, como es normal con un problema del que se desconoce la solución y para el que no hay unas ecuaciones generales completamente establecidas, conocidas y asumidas por la comunidad científica. Ello ha dado lugar a múltiples enfoques, consideraciones e hipótesis, que han acabado en el desarrollo de un código que vierte unos

resultados razonablemente coherentes. Bien es cierto que carece de una cierta generalidad o de un modo automatizado de compenetrarse con los otros módulos, pero establece la base de un modelo sólido que desarrollar más adelante.

- Un aspecto negativo acerca de los resultados obtenidos es la ausencia de aplicaciones prácticas, en tanto en cuanto no se han realizado simulaciones con campos fluidos y datos de captación reales. Es sin duda un aspecto que queda pendiente, pero una vez más, conviene remarcar que el modelo termodinámico es ciertamente sólido, o por lo menos prometedor.

En todo caso, no hay que olvidar el incalculable valor del proyecto más allá del documento o de los resultados finales: el valor didáctico. El aprendizaje obtenido alcanza no solo al nivel físico, numérico o informático, sino al proceso de investigación, de problemas y soluciones, y de, al fin y al cabo, resolución de algo nuevo. En opinión del autor, este es el mayor resultado de todos.

Futuros estudios.

Seguidamente se enumeran posibles puntos de mejora y futuros desarrollos que extiendan y prolonguen el camino avanzado por este proyecto:

- Como se indicó en las conclusiones, un primer paso sería observar los resultados que muestra el modelo al introducir datos reales, obtenidos del solver TAU-Code y el módulo GOTA. Ahí es donde se verá el potencial del modelo.
- Al igual que cualquier otro código, será útil un replanteamiento y mantenimiento del mismo, tanto limpiando pequeñas erratas o acciones innecesarias, como generalizando ciertos subprogramas. Resultaría también muy interesante la automatización (en la medida de lo posible) de la interacción de este módulo los demás, así como un posible enfoque *multi-step* del proceso completo en sustitución del *one-shot* utilizado en este caso.
- Con respecto a cuestiones termodinámicas, existen varios puntos de gran margen de mejora. Las condiciones termodinámicas de compatibilidad pueden requerir un segundo estudio y un replanteamiento, y la modelización de los flujos másicos por evaporación y sublimación han resultado realmente complejas, con grandes variaciones entre unos códigos usados de referencia y otros (LEWICE [?] y ONERA [?]).
- En cuanto al aspecto numérico del problema, una vez se hayan dominado y validado las ecuaciones, puede ser interesante la implementación de métodos de segundo orden en el tiempo, dado

el gran hincapié que Hirsch [?] realiza así como los resultados obtenidos para los métodos de primer orden de Euler y Runge-Kutta. Un análisis de la estabilidad y precisión de los hipotéticos métodos implementados resultaría básico, pudiendo tomar como referencia el procedimiento realizado en el anexo A.

- Como última fase del desarrollo del código puede establecerse la resolución de problemas 3D, cuya complejidad crece a nivel físico (trayectorias de la película) y computacional (mallado, flujos numéricos ...). Esto se plantea más a largo plazo, dada la complejidad añadida sobre los otros módulos.

Consistencia, estabilidad y error en esquemas numéricos.

A.1 Introducción.

Una lectura de los resultados numéricos obtenidos a lo largo del trabajo y su comparación con soluciones analíticas conocidas induce ciertas preguntas acerca de con qué grado de bonanza una solución numérica aproxima la realidad, además de la procedencia de errores y discrepancias entre ambas. Estas cuestiones pueden resumirse en tres:

- ¿Qué condiciones han de ser impuestas a un esquema numérico para obtener una representación aceptable del problema diferencial?
- ¿Por qué distintos esquemas numéricos tienen comportamientos notablemente diferentes, y cómo es posible predecir su **estabilidad**?
- Para un cálculo estable, ¿de qué manera se puede obtener información cuantitativa sobre la **precisión** del esquema numérico?

Para responder a estas preguntas, resulta imprescindible definir un conjunto de requisitos a cumplir por un esquema numérico, que en orden respectivo a las preguntas formuladas, serán la consistencia, la estabilidad y la convergencia del mismo. Tales características cubren distintos aspectos de las relaciones existentes entre las ecuaciones diferenciales analíticas y sus homólogas discretizadas. En este anexo, en primer lugar se establecerán unas definiciones básicas pero estrictas de los conceptos mencionados. A continuación, se pormenorizará el concepto de consistencia de un esquema numérico, para seguidamente, mostrar unas nociones básicas sobre el método más ampliamente usado para evaluar un esquema numérico en términos de estabilidad, el denominado método de Von Neumann. Finalmente, se tratarán los conceptos de error de dispersión y de difusión en esquemas numéricos. El objeto de

esta sección no es otro que establecer unos marcos en los que evaluar, a nivel numérico, los resultados que se muestren a lo largo del trabajo.

A.2 Conceptos básicos.

Tal y como se ha enunciado, existen tres criterios principales para la evaluación de esquemas numéricos, representando cada uno un aspecto de la relación entre este y el modelo matemático analítico. Estos criterios adicionalmente se encuentran íntimamente relacionados, tal y como se mostrará a través del teorema de equivalencia de Lax.

A. Consistencia.

La condición de **consistencia** de un esquema numérico implica que el esquema numérico ha de tender a la ecuación diferencial al tender los pasos espacial y/o temporal a cero. Se trata de una condición sobre el esquema numérico y no sobre la solución numérica, donde intervienen otros actores.

B. Estabilidad.

La condición de **estabilidad** quiere decir que todo error en la obtención de la solución numérica (a través de la discretización pero también de los errores de redondeo del ordenador) debe permanecer acotado al avanzar el proceso iterativo de resolución del esquema numérico. Para valores dados del paso espacial y temporal, el error (definido como la diferencia entre la solución numérica y la solución exacta del esquema numérico) ha de permanecer acotada, cuando el número de pasos temporales tiende a infinito.

Matemáticamente, considerando el error $\bar{\varepsilon}_i^n$ como la diferencia entre la solución calculada de hecho u_i^n y la solución exacta de la ecuación discretizada \bar{u}_i^n , a saber:

$$\bar{\varepsilon}_i^n = u_i^n - \bar{u}_i^n$$

la condición de estabilidad se puede establecer como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\bar{\varepsilon}_i^n| \leq K \quad \text{para } \Delta t \text{ fijo}$$

Conviene remarcar que esta condición no depende en ningún caso de la ecuación diferencial, a diferencia de la condición de consistencia.

C. Convergencia.

La condición de **convergencia** se encuentra establecida sobre la solución numérica, e implica que el resultado de la simulación numérica es una representación correcta del modelo matemático a resolver, esto es, que la solución numérica ha de tender a la solución exacta del modelo matemático cuando el paso temporal y espacial tienden a cero. La formulación matemática de esta condición se puede plasmar como que la solución numérica calculada u_i^n debe aproximarse a la solución analítica $\tilde{u}(x, t)$ particularizada en el punto (x_i, t_n) cuando los pasos temporal y espacial tienden a cero, es decir, al refinar el mallado. En este caso, se define el error $\tilde{\varepsilon}_i^n$ como la diferencia entre la solución numérica calculada u_i^n y la solución exacta del modelo analítico $\tilde{u}_i^n = \tilde{u}(x_i, t_n)$:

$$\tilde{\varepsilon}_i^n = u_i^n - \tilde{u}_i^n$$

Un error que debe satisfacer la siguiente condición de convergencia:

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ \Delta x \rightarrow 0}} |\tilde{\varepsilon}_i^n| = 0 \quad \text{para } x_i = i\Delta x \text{ y } t_n = n\Delta t \text{ fijos}$$

Nótese que las condiciones de convergencia y de estabilidad no se refieren al mismo error.

A.2.1 Teorema de equivalencia de Lax.

Resulta claro que las tres condiciones mostradas anteriormente están interrelacionadas entre sí, y la forma precisa se encuentra recogida en el **Teorema de equivalencia de Lax**, que dicta lo siguiente:

Para un problema de condiciones iniciales bien determinado y con una discretización consistente, la estabilidad del esquema es condición necesaria y suficiente para la convergencia del esquema.

Algo que se deriva inmediatamente de este teorema es que, para analizar un problema de condiciones iniciales, dos tareas han de ser realizadas:

1. Análisis de la condición de consistencia, que lleva a la determinación del orden de precisión del esquema y su error de truncamiento.
2. Análisis de la estabilidad del esquema.

Una conclusión vital de este teorema es que no es necesario conocer la solución analítica explícita del modelo matemático, la cual en gran cantidad de casos es desconocida. Únicamente es necesario

conocer la ecuación diferencial. Una representación gráfica de esta condición puede verse en la figura A.1.

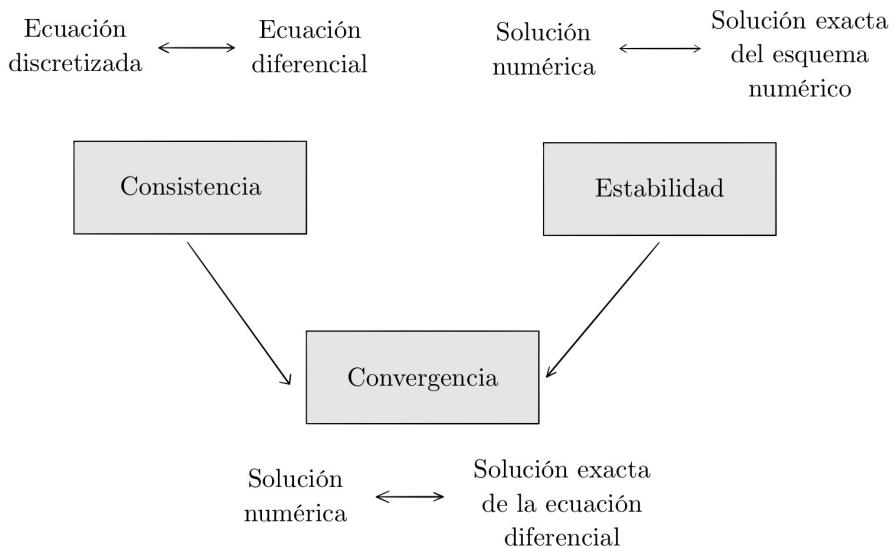


Figura A.1: Relaciones entre consistencia, estabilidad y convergencia.

A.3 Consistencia de esquemas numéricos.

Un esquema numérico consistente presenta la característica de tender a la ecuación diferencial que discretiza al tender a cero los pasos espacial y temporal. Este concepto, que de base resulta bastante simple, lleva a la definición de dos propiedades fundamentales de discretizaciones numéricas: el error de truncamiento y la ecuación diferencial equivalente (*equivalent differential equation, EDE*). Un aspecto que hay que considerar desde un principio es que las soluciones obtenidas, debido a los errores inherentes a la discretización, no pueden satisfacer el modelo matemático, sino que en su lugar satisfacen la ecuación diferencial equivalente. El error de truncamiento surge como la diferencia formal entre ambas ecuaciones, la diferencial original (el modelo matemático) y la ecuación discretizada (EDE). La condición de consistencia se basará en este error, como se verá más adelante.

A.3.1 Metodología básica.

Para analizar la consistencia de un esquema numérico, se considera la solución de la ecuación discretizada en un cierto punto, caracterizado por u_i^n . El esquema numérico que permite su obtención

requerirá del conocimiento de la solución en una serie de puntos adicionales, tanto en distintos niveles espaciales ($i+j$) como temporales ($n+k$). Con la forma explícita del esquema numérico ya conseguida (en forma de ecuación en diferencias finitas), se calcula el error de truncamiento mediante la sustitución de los desarrollos en serie de Taylor de los valores descentrados con respecto a u_i^n en el tiempo y en el espacio, para posteriormente restar la ecuación diferencial original. Hecho esto, se obtendrá un cierto polinomio en Δx y Δt , que será de un cierto orden p y q en ellos (respectivamente), y se dirá que el esquema es de orden p en el espacio y q en el tiempo. Para plasmar todo esto de una manera más nítida, a continuación se realizará el análisis de la consistencia para una ecuación y un esquema en particular.

Considérese la ecuación de la advección unidimensional, escrita matemáticamente como:

$$u_t + au_x = 0 \quad (\text{A.1})$$

Se selecciona un esquema de discretización temporal de tipo Euler (explícito, primer orden y adelantado) y una discretización espacial de diferencias finitas de segundo orden y centradas (ver ??). El esquema resultante es el siguiente:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{a}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) = 0 \quad (\text{A.2})$$

Primer paso: Se desarrolla en serie de Taylor cada uno de las soluciones $u_{(\bullet)}^{(\bullet)}$ que aparezcan en el esquema discretizado:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} u_i^{n+1} & = & u_i^n + \Delta t(u_t)_i^n + \frac{\Delta t^2}{2}(u_{tt})_i^n \frac{\Delta t^3}{6}(u_{ttt})_i^n + \dots \\ u_{i+1}^n & = & u_i^n + \Delta x(u_x)_i^n + \frac{\Delta x^2}{2}(u_{xx})_i^n + \frac{\Delta x^3}{6}(u_{xxx})_i^n + \dots \\ u_{i-1}^n & = & u_i^n - \Delta x(u_x)_i^n + \frac{\Delta x^2}{2}(u_{xx})_i^n - \frac{\Delta x^3}{6}(u_{xxx})_i^n + \dots \end{array} \right.$$

Segundo paso: Se introducen estas expresiones en el esquema numérico (A.2), y se resta la ecuación analítica (A.1), de modo que resulta lo siguiente:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{a}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) - (u_t + au_x)_i^n = \frac{\Delta t}{2} (u_{tt})_i^n + \frac{\Delta x^2}{6} a (u_{xxx})_i^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4) \quad (\text{A.3})$$

El miembro derecho de esta relación de consistencia representa y define el **error de truncamiento**.

miento ε_T , que en este caso resulta:

$$\varepsilon_T \equiv \frac{\Delta t}{2} (u_{tt})_i^n + \frac{\Delta x^2}{6} a (u_{xxx})_i^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

y que se define, como se puede observar, como la diferencia entre el esquema numérico y la ecuación diferencial. Se observa a simple vista que el error desaparece al tender a cero los pasos temporal y espacial, por lo que se puede afirmar sin ninguna duda que el esquema (A.2) es un esquema consistente con la ecuación (A.1).

A.3.2 Interpretación de la condición de consistencia.

La condición de consistencia (A.3) puede ser interpretada de varias formas. Sin embargo, la más interesante consiste en realizar los desarrollos en serie alrededor de la solución exacta del esquema numérico \bar{u}_i^n . De este modo, la condición de consistencia puede reescribirse en términos de dicha solución, tomando la forma siguiente:

$$(\bar{u}_t + a\bar{u}_x)_i^n = -\frac{\Delta t}{2} (\bar{u}_{tt})_i^n - a \frac{\Delta x^2}{6} (\bar{u}_{xxx})_i^n - O(\Delta t^2, \Delta x^4) \equiv -\bar{\varepsilon}_T$$

Esta relación muestra que la solución exacta de la ecuación discretizada no satisface la ecuación diferencial original para valores finitos de los pasos espacial y temporal (como sucede en todos los cálculos computacionales). Sin embargo, sí que satisface la ecuación diferencial equivalente, que difiere de la ecuación original únicamente en el error de truncamiento del miembro derecho. La EDE, sin embargo, se construye con ciertas consideraciones, como lo es la eliminación de las derivadas temporales y su sustitución por derivadas espaciales a través de la propia ecuación diferencial original. En este caso, de la aplicación repetida de (A.1) al error de truncamiento, se sigue:

$$\bar{\varepsilon}_T = a^2 \frac{\Delta t}{2} (\bar{u}_{xx})_i^n + a \frac{\Delta x^2}{2} (\bar{u}_{xxx})_i^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

Hecho esto, se considera únicamente la derivada espacial de menor orden, despreciándose el resto. Así, la ecuación diferencial equivalente resulta:

$$\bar{u}_t + a\bar{u}_x = -\frac{\Delta t}{2} a^2 \bar{u}_{xx} + O(\Delta t^2, \Delta x^2)$$

Que difiere de la ecuación original, siendo de hecho una representación de la ecuación de la advección-difusión, con una difusión numérica negativa. Esto implica que el esquema es inestable, como se razonará más adelante, pero resulta una conclusión fácilmente deducible: la discretización introduce un factor que amplifica de forma indefinida la solución, lo cual resulta en una solución completamente divergente.

Considérese la misma ecuación de la advección, pero aplicando un esquema espacial de primer orden atrasado (*first order upwind, FOU*), es decir:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{a}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n) = 0$$

Ejecutando el mismo procedimiento que con el otro esquema:

$$\bar{u}_t + a\bar{u}_x = \frac{a\Delta x}{2} \left(1 - \frac{a\Delta t}{\Delta x} \right) \bar{u}_{xx} + O(\Delta t^2, \Delta x^2)$$

En este caso, la estabilidad resulta condicional, puesto que si el producto es positivo, se produce un amortiguamiento de la solución asociado a un comportamiento estable. Ello requiere que el valor de a sea positivo, así como que el paréntesis lo sea también, es decir:

$$0 \leq \frac{a\Delta t}{\Delta x} < 1$$

donde se ha definido el número de *Courant* o de *Courant-Friedrichs-Lowy* (CFL). Esto tiene un gran significado físico, que será analizado más adelante.

A.4 Estabilidad de esquemas numéricos. Método de Von Neumann.

Una vez ha sido verificada la consistencia del esquema, el siguiente y último paso es evaluar la estabilidad del esquema. Un gran número de métodos han sido desarrollados para este fin, la mayoría de ellos restringidos a problemas lineales. Sin embargo, se trata de una empresa muy compleja, dificultada aún más por la modelización de las condiciones de contorno. Para aliviar este problema del análisis de la estabilidad, se puede considerar un problema ligeramente diferente en el que las condiciones de contorno son periódicas. Ésta es la base del método de Von Neumann para el análisis de la estabilidad, que se ha establecido como el método más ampliamente utilizado de todos los existentes. Aunque un segundo análisis sobre condiciones de contorno no periódicas resulta viable, no suele ser necesario. Un análisis del efecto de las condiciones de contorno sobre la estabilidad del sistema se puede encontrar

en la referencia de Hirsch [?], en el punto 9.1.

El método de Von Neumann, desarrollado en Los Alamos durante la Segunda Guerra Mundial, tiene como clave el desarrollo en serie de Fourier del error y de la solución, a lo largo de un dominio espacial finito, que se extiende por conveniencia desde $-L$ hasta L . Este desarrollo en serie además permitirá estimar los errores de dispersión y difusión, tal y como se verá en una sección posterior.

A.4.1 Bases del método.

Considérense la solución exacta de la ecuación discretizada y la solución calculada mediante dicho esquema, denotándose por \bar{u}_i^n y u_i^n respectivamente. La diferencia entre ambos valores, debida en general a errores de redondeo y truncamiento, se denota por $\bar{\varepsilon}_i^n$, y se define implícitamente a través de la siguiente expresión:

$$u_i^n = \bar{u}_i^n + \bar{\varepsilon}_i^n$$

Por definición, tanto la solución exacta del esquema como la solución calculada satisfacen el esquema numérico, lo cual, dado que se trata de un operador lineal, implica que el error también satisface el esquema. Esto resulta fácilmente demostrable. Si se denota $N(\bullet)$ al esquema, se tiene que:

$$N(u_i^n) = N(\bar{u}_i^n + \bar{\varepsilon}_i^n) = N(\bar{u}_i^n) + N(\bar{\varepsilon}_i^n) = N(\bar{\varepsilon}_i^n) = 0$$

De aquí se puede derivar que si, como es habitual, la solución exacta se encuentra uniformemente acotada, el comportamiento del error se verá reflejado en el comportamiento de la solución numérica. Por tanto, se puede analizar indistintamente el comportamiento del error o el de la solución numérica.

Considerando unas condiciones de contorno periódicas con período $2L$, se puede desarrollar la solución u_i^n en una serie finita de Fourier, que pueda ser representada en un mallado predispuesto. En un desarrollo normal, se trabaja con números de onda, que abarcan un rango de 2π , pero en este caso no está del todo claro cuáles son los límites superiores e inferiores de los números de onda. La mayor longitud de onda que se puede representar es el dominio completo, es decir, $\lambda_{max} = 2L$. Sin embargo, la duda surge con la mínima longitud de onda que se puede representar con un mallado dado. Suponiéndolo equiespaciado, la mínima longitud de onda que permite efectuar cálculos es $\lambda_{min} = 2\Delta x$, puesto que si se toma un valor inferior, podría darse el caso de no encontrar puntos sobre los que evaluar la solución. Esta morfología puede verse reflejada en la figura A.2.

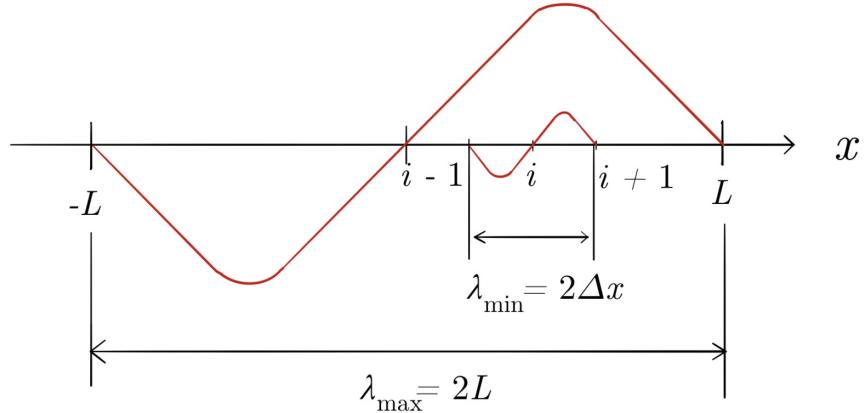


Figura A.2: Representación de una onda como superposición de armónicos: longitud de onda máxima y mínima.

Cada longitud de onda lleva asociado un número de onda $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, que toma su valor mínimo con la máxima longitud de onda, es decir, $k_{\min} = \frac{\pi}{L}$; y su valor máximo, como no puede ser de otra manera, para el mínimo valor de longitud de onda: $k_{\max} = \frac{\pi}{\Delta x}$. Todos los demás armónicos (con su número de onda asociado) serán proporcionales al valor k_{\min} a través de:

$$k_j = j k_{\min} = j \frac{\pi}{L} = j \frac{\pi}{N \Delta x} \quad j = 0, \dots, N$$

Adicionalmente, se define el ángulo de fase como el producto $\phi_j = k_j \Delta x = j \frac{\pi}{N}$, que cubre el dominio $]-\pi, \pi]$ en pasos equiespaciados de valor $\frac{\pi}{N}$. Así, las frecuencias bajas estarán asociadas a ángulos de fase bajos y viceversa. Dependiendo del esquema, el error puede concentrarse en unas frecuencias u otras.

En conclusión, es posible desarrollar la solución numérica u_i^n en serie de Fourier como:

$$u_i^n \equiv \sum_{j=-N}^{j=N} V_j^n \exp(i k_j x_i) = \sum_{j=-N}^{j=N} V_j^n \exp(i k_j i \Delta x) = \sum_{j=-N}^{j=N} V_j^n \exp\left(i j \frac{\pi}{N}\right) \quad (\text{A.4})$$

siendo $i = \sqrt{-1}$ y V_j^n representa la amplitud del armónico j -ésimo. Conviene notar que esta descomposición separa la dependencia espacial de la temporal, recogiendo la amplitud del armónico la evolución con el tiempo y el término exponencial la distribución espacial. Al igual que sucedía con el error y la solución numérica exacta, la linealidad de la ecuación discretizada asegura que cada uno de los armónicos por separado satisface el esquema numérico. A partir de este desarrollo inicial, puede ya imponerse la condición de estabilidad de Von Neumann.

A.4.2 Condición de estabilidad de Von Neumann.

Considérese el factor de amplificación o ganancia de la amplitud del armónico j -ésimo, del cual no se indica el subíndice por simplicidad, y definido como:

$$G = \frac{V^{n+1}}{V^n}$$

La condición de estabilidad de Von Neumann establece que ninguna de las amplitudes de los $2N$ armónicos puede crecer de manera indefinida. Esto, plasmado sobre la definición de ganancia, se conoce como la Condición de Von Neumann para la estabilidad:

$$|G| \leq 1 \quad \forall \phi_j = j \frac{\pi}{N}, \quad j = -N, \dots, N$$

Nótese que el factor de amplificación depende únicamente de parámetros del esquema y del ángulo de fase ϕ , pero en ningún caso depende de n . Seguidamente se pormenoriza la metodología para evaluar de forma pragmática la condición de estabilidad.

A.4.3 Metodología de Von Neumann. Aplicación a la ecuación de la advección.

El primer paso para evaluar la estabilidad según este método consiste en sustituir en todos los términos de la forma u_{i+m}^{n+k} del esquema numérico el desarrollo en serie de Fourier de dicha solución, es decir:

$$u_{i+m}^{n+k} \longrightarrow V^{n+k} \exp(i(i+m)\phi)$$

Hecho esto, se elimina el término exponencial común $\exp(i\phi)$ de todos los términos. A continuación, se deriva la forma explícita del factor de amplificación G , mediante la aplicación de su definición. Dado que se ha eliminado el índice j de las expresiones, ahora se toma un valor de ϕ que simplemente se supone contenido en $]-\pi, \pi]$, de manera que la condición de estabilidad de Von Neumann se reformula como:

$$|G| \leq 1 \quad \forall \phi =]-\pi, \pi]$$

A continuación se realiza este análisis para la ecuación de la advección, utilizando diversos esquemas para estudiar sus propiedades.

A. Diferencias finitas centradas de segundo orden en el espacio y esquema explícito de primer orden en el tiempo.

Se trata del mismo esquema ya mostrado anteriormente, que escrito de manera explícita resulta:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad (\text{A.5})$$

Donde se ha introducido la definición del ya mencionado número CFL:

$$\sigma \equiv \frac{a\Delta t}{\Delta x}$$

Nótese que se trata del único parámetro del esquema, y por tanto el comportamiento de la solución no depende de Δx o Δt por separado, sino de esta magnitud. Si sobre este esquema se introduce el desarrollo en serie de Fourier de la solución, se obtiene:

$$V^{n+1} \exp(\mathbb{I}i\phi) = V^n \exp(\mathbb{I}i\phi) - \frac{\sigma}{2} [V^n \exp(\mathbb{I}(i+1)\phi) - V^n \exp(\mathbb{I}(i-1)\phi)]$$

Simplificando el término en $\exp(\mathbb{I}i\phi)$:

$$V^{n+1} = V^n - V^n \frac{\sigma}{2} [\exp(\mathbb{I}\phi) - \exp(-\mathbb{I}\phi)]$$

Determinándose con gran sencillez la ganancia:

$$G \equiv \frac{V^{n+1}}{V^n} = 1 - \mathbb{I}\sigma \sin(\phi)$$

y expresándose la condición de estabilidad acaba como:

$$|G|^2 = G \cdot G^* = 1 + \sigma^2 \sin^2 \phi \geq 1 \quad \forall \phi$$

Como se puede observar, su valor es mayor o igual que uno, sea cual sea el CFL y el ángulo de fase. Por tanto, se puede enunciar que el esquema (A.5) es **incondicionalmente inestable**. Una representación gráfica de la condición de estabilidad se puede apreciar en la figura A.3.

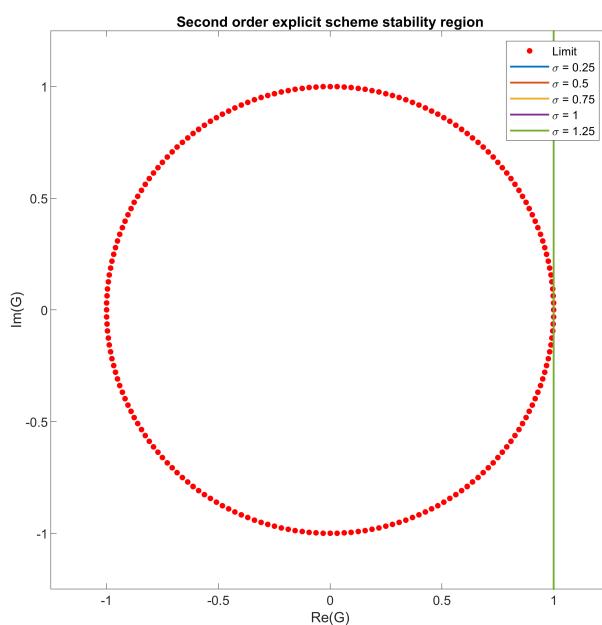


Figura A.3: Factor de amplificación del esquema de segundo orden explícito para la ecuación de la advección.

B. Diferencias finitas centradas de segundo orden en el espacio y esquema implícito de primer orden en el tiempo.

El esquema resultante es muy similar al anterior, salvo que el término de la derivada espacial está expresada ahora en el instante $n + 1$:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\sigma}{2} (u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) \quad (\text{A.6})$$

Una vez sustituido el desarrollo y simplificados los términos pertinentes:

$$V^{n+1} = V^n - V^{n+1} \frac{\sigma}{2} [\exp(\mathbb{I}\phi) - \exp(-\mathbb{I}\phi)]$$

culminando con la determinación del factor de amplificación, que resulta:

$$G = \frac{1}{1 + \mathbb{I}\sigma \sin \phi}$$

y por último, su módulo, que refleja la estabilidad como esquema, vale:

$$|G|^2 = \frac{1}{1 + \sigma^2 \sin^2 \phi} \leq \forall \phi$$

Lo que permite afirmar que el esquema (A.6) es **incondicionalmente estable**. Una representación gráfica de la condición de estabilidad de este esquema se muestra en la figura A.4.

C. Esquema *FOU* explícito (*first order upwind*)

Este esquema, también conocido como *upwind* o esquema CIR atrasadas, puede escribirse de manera explícita como:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma (u_i^n - u_{i-1}^n) \quad (\text{A.7})$$

Repetiendo los mismos pasos que en los anteriores esquemas, se alcanza:

$$G = 1 - \sigma [1 - \exp(-\mathbb{I}\phi)] = 1 - \sigma + \sigma \cos \phi - \mathbb{I}\sigma \sin \phi = 1 - 2\sigma \sin^2(\phi/2) - \mathbb{I}\sigma \sin \phi$$

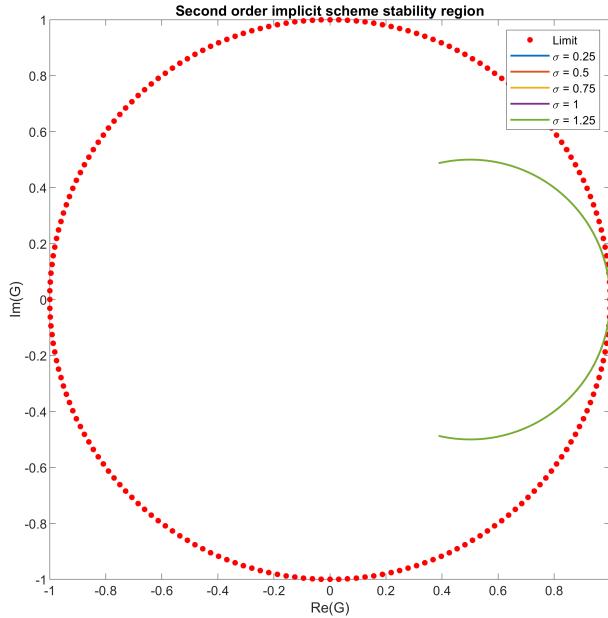


Figura A.4: Factor de amplificación del esquema de segundo orden implícito para la ecuación de la advección.

Para evaluar la estabilidad de este esquema, se realiza un análisis de tipo geométrico, plasmando en el plano complejo cada uno de las partes del número complejo que es el factor de amplificación:

$$\begin{cases} \xi \equiv \operatorname{Re}(G) = (1 - \sigma) + \sigma \cos \phi \\ \eta \equiv \operatorname{Im}(G) = -\sigma \sin \phi \end{cases}$$

que pueden considerarse como unas ecuaciones paramétricas de una curva con ϕ como parámetro. La estructura de la curva es, como se deduce con sencillez, una circunferencia con centro en el eje real, en el punto $1 - \sigma$. Para que el sistema sea estable, debe suceder que toda la curva esté contenida en la región de estabilidad. Como se puede observar en la figura A.5, esta condición es análoga a afirmar que el valor de σ (el número CFL) sea menor que la unidad y positivo. Por tanto, el esquema *FOU* (A.7) es **condicionalmente estable**.

D. Esquema *FOU* implícito

Se trata de un esquema casi idéntico al anteriormente mostrado, salvo por el índice temporal del término de la derivada espacial:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \sigma (u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) \quad (\text{A.8})$$

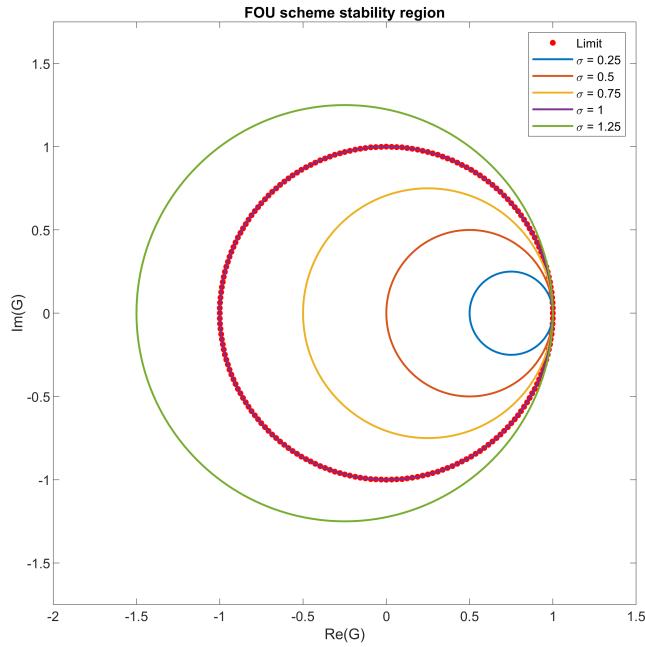


Figura A.5: Factor de amplificación del esquema *FOU* explícito para la ecuación de la advección.

Aplicando los pasos ya familiares ahora:

$$G = \frac{1}{1 + \sigma [1 - \exp(-\mathbb{I}\phi)]}$$

Llevando la condición de estabilidad a:

$$|G|^2 = \frac{1}{(1 - \sigma + \sigma \cos \phi)^2 + \sigma^2 \sin^2 \phi} \leq 1 \quad \forall \phi$$

Comprobándose que el esquema (A.8) es incondicionalmente estable.

E. Esquema Runge-Kutta de 2 etapas.

Un esquema de tipo Runge-Kutta, como se observó en el capítulo 4, se basa en la utilización de varios pasos intermedios entre la solución entre el instante n y el $n + 1$. Recuérdese que la estructura básica del esquema es:

$$u^{n+1} = u^n + \frac{\Delta t_n}{2} (k_1 + k_2)$$

Donde k_1 y k_2 son:

$$\begin{cases} k_1 = F(u^n, t_n) \\ k_2 = F(u^n + \Delta t_n k_1, t_n + \Delta t_n) \end{cases}$$

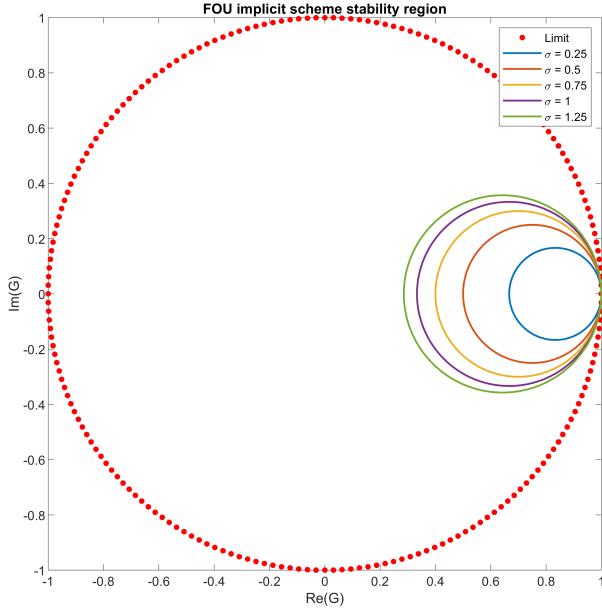


Figura A.6: Factor de amplificación del esquema *FOU* implícito para la ecuación de la advección.

Siendo $F(u^n, t_n)$ la parte derecha del la ecuación diferencial del problema de condiciones iniciales, que en el caso de un esquema de diferencias finitas atrasadas o *upwind* resulta:

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{a}{\Delta x} (u_{i-1}(t) - u_i(t))$$

Para obtener la expresión explícita del esquema, es necesario calcular las constantes anteriormente definidas:

$$k_{1,i} = F(u^n, t_n)_i = \frac{a}{\Delta x} (u_{i-1}^n - u_i^n) \quad i = 1, \dots, N$$

Siendo el cálculo de la constante k_2 más delicado, al tener que manipular ciertos índices:

$$\begin{aligned} k_{2,i} &= F(u^n + \Delta t k_1, t_n + \Delta t)_i = \frac{a}{\Delta x} [u_{i-1}^n + \Delta t k_{1,i-1} - (u_i^n + \Delta t k_{1,i})] = \\ &= \frac{\sigma}{\Delta t} \left\{ \left[u_{i-1} + \frac{a \Delta t}{\Delta x} (u_{i-2}^n - u_{i-1}^n) \right] - \left[u_i^n + \frac{a \Delta t}{\Delta x} (u_{i-1}^n - u_i^n) \right] \right\} \end{aligned}$$

Resultando el esquema final:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\sigma}{2} [(2 - \sigma) (u_{i-1}^n - u_i^n) + \sigma (u_{i-2}^n - u_{i-1}^n)] \quad (\text{A.9})$$

A partir de aquí, el proceso es idéntico al seguido anteriormente, por lo que se pasa directamente a la expresión del factor de amplificación:

$$G = 1 + \frac{\sigma}{2} \{ (2 - \sigma) (\cos \phi - 1 - \mathbb{I} \sin \phi) + \sigma [\cos 2\phi - \cos \phi + \mathbb{I} (\sin \phi - \sin 2\phi)] \}$$

A fin de representarlo en el plano complejo, se ha de separar las partes real e imaginaria:

$$\begin{cases} \xi \equiv \operatorname{Re}(G) = 1 + \frac{\sigma}{2} [(2 - \sigma) (\cos \phi - 1) + \sigma (\cos 2\phi - \cos \phi)] \\ \eta \equiv \operatorname{Im}(G) = \frac{\sigma}{2} [\sigma (\sin \phi - \sin 2\phi) - (2 - \sigma) \sin \phi] \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

La representación gráfica de las ecuaciones paramétricas anteriores en el plano complejo puede encontrarse en la figura A.7. Como se puede observar, la restricción en el número de Courant para la condición de estabilidad es idéntica a la del esquema *FOU*. En conclusión, el esquema (A.9) es un esquema **condicionalmente estable**.

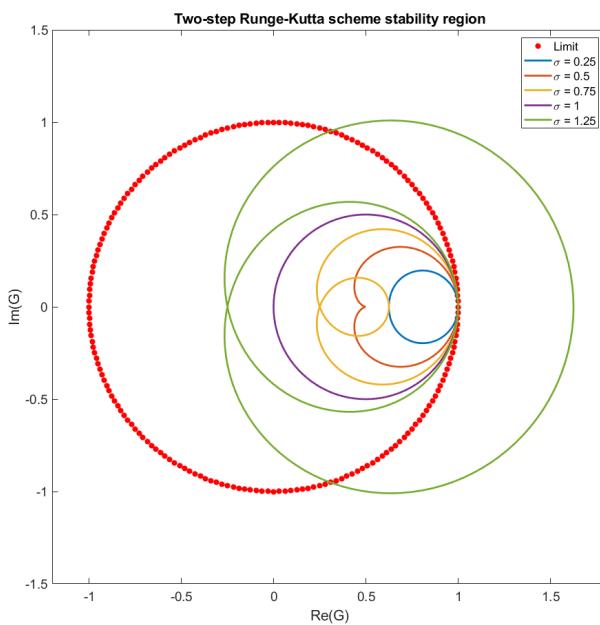


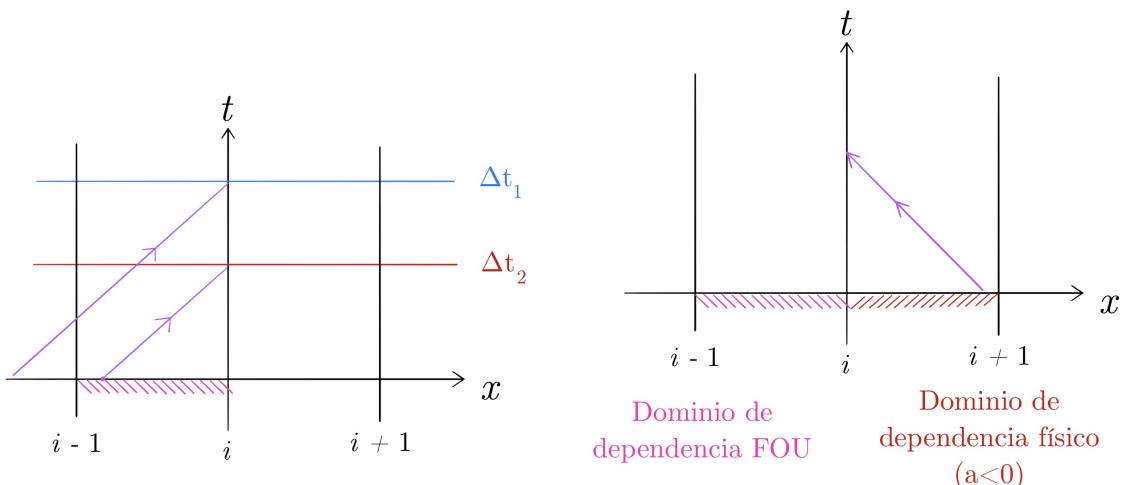
Figura A.7: Factor de amplificación del esquema Runge-Kutta de 2 pasos para la ecuación de la advección.

A.4.3.1 Comentarios sobre la condición del CFL.

La condición principal impuesta sobre la gran mayoría de los esquemas numéricos estudiados (si la hubiere) establece que el número CFL no puede ser superior a la unidad. Esto contiene un trascendental significado físico, que a fin de cuentas expresa que el tamaño de la malla (en particular

el parámetro $\Delta t / \Delta x$) debe ser escogido de tal forma que el dominio de dependencia de la ecuación diferencial ha de estar contenido de forma completa y en todo momento en el dominio numérico de dependencia de las ecuaciones discretizadas. Dicho de otra manera, la distancia cubierta por una onda de velocidad de propagación a en un lapso de tiempo Δt no debe superar la mínima distancia entre dos puntos del mallado Δx (ver figura A.8(a)). De otra forma, un cambio en las condiciones físicas podría no verse plasmado en el esquema numérico, y por tanto el error entre la solución analítica y la numérica puede tornarse arbitrariamente grande.

Adicionalmente, una condición que el esquema *FOU* impone es que la velocidad de propagación



(a) Relación entre el paso espacial y temporal y la condición del CFL.

(b) Dominios de dependencia físico y computacional para el esquema *FOU* y $a < 0$.

Figura A.8: Interpretación geométrica de la condición del CFL.

tiene que ser positiva. De nuevo, esto cobra sentido, puesto que el dominio de dependencia para este esquema está a la izquierda del punto en cuestión (nodo $i-1$). Por tanto, si la velocidad de propagación fuera negativa, la información avanzaría hacia la izquierda, mientras que el esquema estaría en cierto modo trabajando con una propagación hacia la derecha (ver figura A.8(b)). El esquema se volvería razonablemente inestable en tal caso, como parece lógico.

A.5 Análisis espectral de errores numéricos.

Hasta ahora, el único error sobre el que se ha discutido es el de truncamiento, pero su definición no permite una discusión sobre el error de las soluciones. En particular, el error con que se va a tratar es el definido como la diferencia entre la solución analítica del modelo matemático y la solución numérica de las ecuaciones discretizadas, es decir;:

$$\tilde{\varepsilon} = u_i^n - \tilde{u}_i^n$$

Mediante el método de Von Neumann, es posible aislar la dependencia temporal de la solución numérica en las amplitudes V^n para cada armónico que constituye la solución. Para poder analizar con un cierto rigor la solución, se va a proceder de una forma similar con la solución analítica, obteniéndose así las amplitudes de sus armónicos. Hecho esto, se podrán definir los errores de dispersión y difusión, tal y como se verá más adelante.

A.5.1 Manipulación de las soluciones exacta y numérica.

El primer paso para describir y caracterizar los errores de dispersión y difusión es expresar ambas soluciones (analítica y numérica) en términos de un desarrollo en serie de Fourier.

Solución analítica.

La solución analítica puede ser desarrollada en el espacio en una serie de Fourier, de manera similar al método de Von Neumann con la solución numérica. En relación a la física de la propagación de ondas planas que para un armónico dado k , es posible definir una función de pulsación $\tilde{\omega} = \tilde{\omega}(k)$, denominada relación de dispersión. La forma explícita de tal relación depende de cada ecuación, y en el caso de la advección, resulta ser $\tilde{\omega} = a(k)$. En general, un armónico k de la solución analítica, en un punto $x_i = i\Delta x$ y un instante $t_n = n\Delta t$, tiene la forma siguiente:

$$(\tilde{u}_i^n)_k = \hat{V}(k) \exp(\mathbb{I}\tilde{\omega}n\Delta t) \exp(\mathbb{I}ki\Delta x)$$

La estructura del armónico anterior se puede interpretar como una amplitud $\hat{V}(k)$, con una morfología espacial independiente del tiempo y determinada por el término exponencial $\exp(\mathbb{I}ki\Delta x)$,

y cuya evolución con el tiempo queda completamente definida por la exponencial $\exp(\tilde{\omega}n\Delta t)$, cuya interpretación es una amplificación o amortiguamiento de la onda. Por tanto, la amplitud $\hat{V}(k)$ no depende en ningún caso del tiempo, y se calcula a través de la condición inicial del problema de condiciones iniciales ($u(x, 0) = u^{(0)}(x) = f(x)$) mediante el cálculo del coeficiente de la serie de Fourier asociado como:

$$\hat{V}(k) = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) \exp(-\tilde{\omega}kx) dx$$

de modo que la caracterización de la solución analítica en un punto dado (\tilde{u}_i^n) queda completamente determinada.

Solución numérica.

Tal y como se procedía en el método de Von Neumann, la forma en serie de Fourier del armónico k de la solución numérica se puede escribir como:

$$(u_i^n)_k = V^n \exp(\tilde{\omega}ki\Delta x)$$

Asumiendo que la condición inicial se representa de manera exacta a través del esquema numérico (salvo errores de redondeo), se puede afirmar que la amplitud del armónico de la solución analítica $\hat{V}(k)$ se representa también de manera exacta en el mallado espacial. Por tanto, es posible relacionar la amplitud numérica V^n con la amplitud analítica $\hat{V}(k)$ con ayuda de un término exponencial, como:

$$V^n = \hat{V}(k) \exp(-\tilde{\omega}n\Delta t) = \hat{V}(k) (\exp(-\tilde{\omega}\Delta t))^n \quad (\text{A.11})$$

donde aparece la relación de dispersión numérica $\omega = \omega(k)$, que se derivará del factor de amplificación del esquema $G(k)$. Mediante la misma definición del factor de amplificación (o matriz de amplificación en términos precisos), al ser independiente del instante de tiempo (de n), se puede escribir:

$$V^n = GV^{n-1} = (G)^2V^{n-2} = \dots = (G)^nV^0 = (G)^n\hat{V}(k) \quad (\text{A.12})$$

Se ha utilizado $(G)^n$ para indicar la potencia n -ésima de G , en contraposición al valor de G en el instante n -ésimo (absurdo). Si esta última relación (A.12) se compara con la ecuación (A.11), resulta muy sencillo deducir la relación entre $\omega(k)$ y G :

$$G = \exp(-\tilde{\omega}\Delta t) \quad (\text{A.13})$$

Modificaciones finales.

Resulta interesante reescribir la solución analítica en una forma similar a como se ha expresado la solución numérica, es decir:

$$\hat{V}^n = \hat{V}(k) (\exp(\mathbb{I}\tilde{\omega}\Delta t))^n \equiv \left(\tilde{G}\right)^n \hat{V}(k)$$

definiéndose implícitamente el factor de amplificación exacto como:

$$\tilde{G} = \exp(-\mathbb{I}\tilde{\omega}\Delta t) \quad (\text{A.14})$$

A.5.2 Errores de difusión y de dispersión.

Con las definiciones de los factores de amplificación numérico (A.13) y exacto (A.14), es posible analizar la naturaleza y el espectro de frecuencias de los errores numéricos. Dado que las relaciones de dispersión numérica y analítica son funciones definidas en el campo complejo, es posible expresar los factores de amplificación en forma polar como:

$$G = |G| \exp(-\mathbb{I}\Phi), \quad \tilde{G} = |\tilde{G}| \exp(-\mathbb{I}\tilde{\Phi})$$

Expresados de esta forma, se puede ver que el módulo de G afectará a la amplitud de la solución, mientras que la fase de G afectará a la fase de la solución.

El error de amplitud o **error de difusión** se define como el cociente entre las amplitudes numérica y exacta:

$$\varepsilon_D = \frac{|G|}{|\tilde{G}|} \quad (\text{A.15})$$

Y el error en la fase de la solución, denominado **error de dispersión**, se puede definir como el cociente entre las fases de ambas soluciones:

$$\varepsilon_\phi = \frac{\Phi}{\tilde{\Phi}} \quad (\text{A.16})$$

En el caso particular de los problemas de tipo hiperbólico (como lo son todos los tratados en este trabajo), la solución exacta de la fase es una onda propagándose a una cierta velocidad.

A.5.3 Metodología de análisis.

Para analizar los errores de dispersión y difusión, se ha de proceder como sigue:

Primer paso: Obtención del factor de amplificación, tal y como se indica en el apartado A.4.3.

Segundo paso: Expresión del factor de amplificación en forma polar, es decir:

$$|G| = \sqrt{(Re G)^2 + (Im G)^2}, \quad \tan(\Phi) = \frac{-Im G}{Re G}$$

Tercer paso: Atender a las definiciones de los errores e introducir la expresión del factor de amplificación. Se analizan tales magnitudes en función del ángulo de fase ϕ .

A.5.4 Análisis de errores en la ecuación de la advección.

Es necesario primeramente establecer y calcular el valor del factor de amplificación exacto asociado a la ecuación de la advección. Es de sobra conocido que la solución analítica es la propagación de la onda a una velocidad a constante, sin ningún tipo de amortiguamiento. La relación de dispersión exacta es, por tanto:

$$\tilde{\omega} = ak$$

De modo que el factor de amplificación exacto se reduce a:

$$|\tilde{G}| = 1, \quad \tilde{\Phi} = ak\Delta t = \frac{a\Delta t}{\Delta x}k\Delta x = \sigma\phi$$

En conclusión:

$$\tilde{G} = \exp(-\mathbb{I}\sigma\phi)$$

En base a la definición del error de difusión, este resulta sencillamente:

$$\varepsilon_D = |G|$$

Definiendo una velocidad de advección numérica a_{num} como:

$$a_{num} = \frac{\Phi}{k\Delta t} = \frac{a\Phi}{\sigma\phi}$$

Resulta un error de dispersión de la siguiente forma:

$$\varepsilon_\phi = \frac{\Phi}{ak\Delta t} = \frac{\Phi}{\sigma\phi} = \frac{a_{num}}{a}$$

Comentarios.

Con respecto al error de difusión de un esquema, se produce un conflicto con la condición de estabilidad. La precisión del esquema requiere un módulo de G lo más cercano posible a la unidad, mientras que la estabilidad por su parte requiere un valor dicho módulo inferior a uno. Por tanto, una mayor estabilidad implica un mayor error de difusión.

En cuanto al error de dispersión, si este es superior a la unidad, sucede que la solución calculada se propaga con una velocidad superior a la física. En caso opuesto, la solución numérica se propaga de manera más lenta que la real.

A.5.4.1 Errores de dispersión y difusión de distintos esquemas.

Por ser los esquemas más ampliamente utilizados en este trabajo, se analizarán los errores de dispersión y difusión del método de Euler (esquema *FOU* explícito) y el método de Runge-Kutta de 2 pasos:

A. Esquema *FOU*.

Tomando el factor de amplificación del esquema *FOU* y deduciendo el módulo y fase del mismo, se alcanza:

$$\left\{ \begin{array}{l} |G| = [1 - 4\sigma(1 - \sigma)\sin^2\phi/2]^{1/2} \\ \Phi = \tan^{-1}\left(\frac{\sigma\sin\phi}{1 - \sigma + \sigma\cos\phi}\right) \end{array} \right.$$

En consideración de la forma del factor de amplificación exacto para la ecuación de la advección, se deducen los errores de difusión y dispersión asociados al esquema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_D = [1 - 4\sigma(1 - \sigma)\sin^2\phi/2]^{1/2} \\ \varepsilon_\phi = \frac{\tan^{-1}\left(\frac{\sigma\sin\phi}{1 - \sigma + \sigma\cos\phi}\right)}{\sigma\phi} \end{array} \right. \quad (\text{A.17})$$

Seguidamente se puede observar la representación en el espectro de frecuencias del error de difusión (A.10(a)) y el de dispersión (A.10(b)). La tendencia básica observada en el error de difusión es una disminución del amortiguamiento al aumentar el número de Courant σ . Se observa en todo caso un rápido descenso en el valor del módulo de G , lo cual es una característica común en esquemas de primer orden. Por su parte, el error de dispersión presenta un comportamiento un tanto curioso. Para valores del número CFL inferiores a 0.5, se tiene un error de dispersión inferior a la unidad, lo que representa un retraso en la solución numérica respecto a la analítica. En el caso de que supere dicho valor, se observa el comportamiento contrario: un adelanto en fase con respecto a la solución analítica. En el caso puntual en que $\sigma = 0.5$, el error de dispersión es nulo, y si bien existe un amortiguamiento de la amplitud, la solución numérica está perfectamente en fase con la analítica.

Conviene realizar unos ciertos comentarios acerca del significado físico de la fase, en función de la cual se representan ambos errores. Si se observa, como en este caso, que el error para frecuencias altas (fases altas) es grande, significa que a la hora de representar un modelo en el cual existen variaciones significativas en distancias cortas (dominando longitudes de onda λ pequeñas), el error al representarlo será grande. En otras palabras, suponiendo que se representa una onda senoidal, al incrementarse la frecuencia de la misma, aumenta la predominancia de armónicos de más alta frecuencia en la solución numérica, y al ser donde es más alto el error de dispersión, la representación numérica será menos precisa.

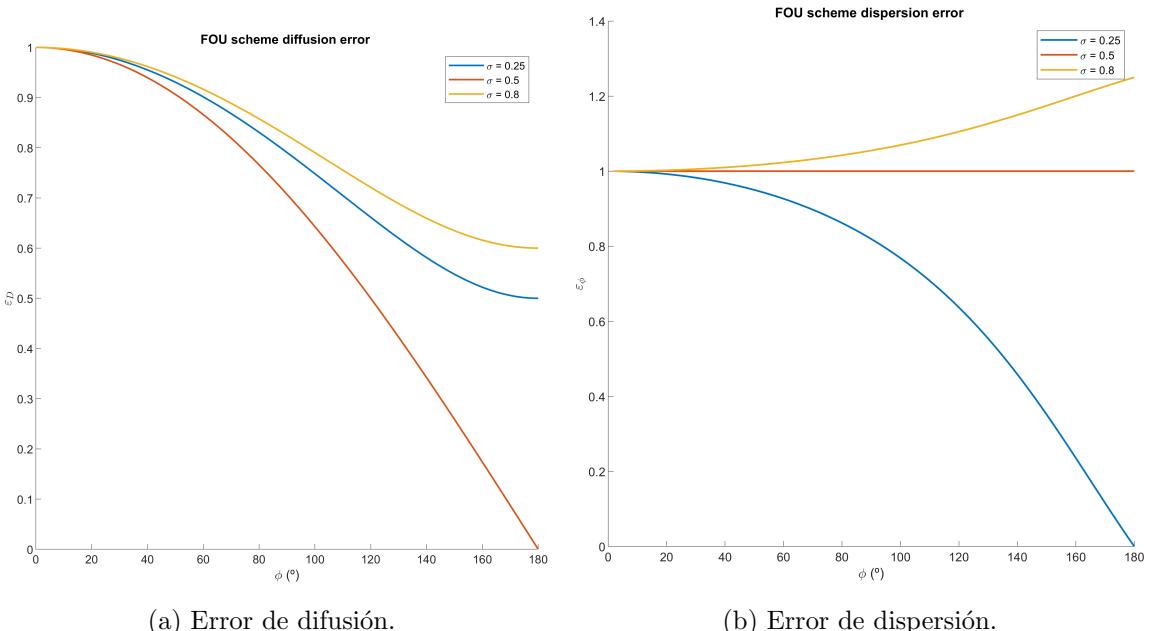


Figura A.9: Errores de dispersión y difusión del método *FOU* aplicado a la ecuación de la advección.

B. Esquema Runge-Kutta de 2 pasos.

Operando con el factor de amplificación obtenido anteriormente, se deducen su módulo y fase. No se indican los resultados finales por lo farragoso de su expresión, bastando aplicar el cálculo del módulo y fase a las expresiones (A.10). Los resultados obtenidos pueden observarse en las figuras A.10(a) y A.10(b). En el error de difusión los resultados son un tanto particulares. El amortiguamiento del sistema, a diferencia de lo que sucedía con el esquema *FOU*, decrece en principio al hacerlo el número CFL. Sin embargo, a diferencia de lo que sucedía con el esquema *FOU*, el máximo error (mínimo ε_D) se encuentra en una frecuencia intermedia, tanto más baja como alto sea el CFL. En el caso de $\sigma = 0.8$, se alcanza un error de 0.2, lo cual supone un error inaceptable.

En cuanto al error de dispersión, se produce en todo caso un retraso en la señal numérica respecto de la analítica. Además, este error desaparece para frecuencias muy bajas (longitudes de onda altas, relacionadas con funciones de carácter constante) y se hace nulo (máximo en cierto sentido) para frecuencias altas.

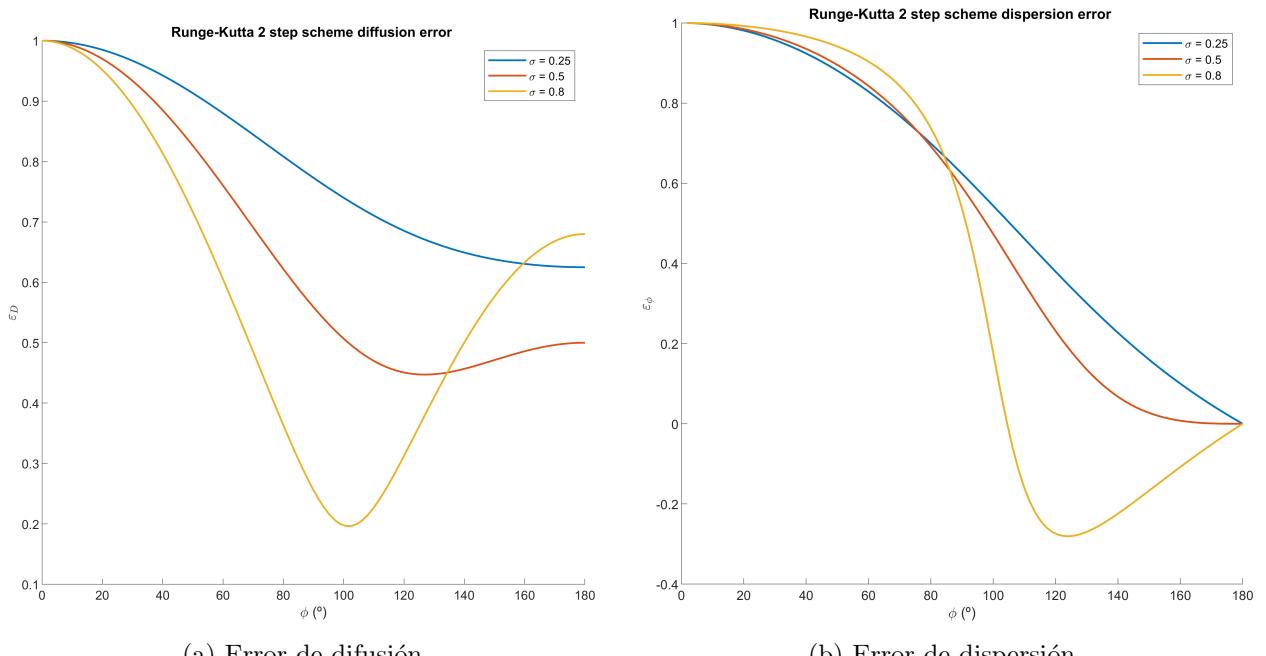


Figura A.10: Errores de dispersión y difusión del método Runge-Kutta de 2 pasos aplicado a la ecuación de la advección.

A.5.5 Resultados y discusión.

Para validar las conclusiones deducidas en el apartado anterior, se va a resolver numéricamente la ecuación de la advección para los dos esquemas estudiados. La onda a representar será una de tipo seno ($u^{(0)}(x) = \sin(kx)$), y se modificará su frecuencia k a través de la fase ϕ (al ser $\phi = k\Delta x$), además del parámetro principal la discretización, el CFL. Se tienen los siguientes parámetros del problema comunes a todos los ensayos:

- Velocidad de propagación (advección): $a = 1$
- Dominio computacional: $x \in [0, 2\pi[$
- Número de celdas: $N = 100$
- Número de pasos temporales: $N_t = 100$

El efecto de tamaño de celda Δx , si bien reviste interés, no será analizado, por ser en cierto modo equivalente a modificar la fase. Bien es cierto que si se tratara de un problema físico dado, y no un análisis del desempeño del método, la frecuencia reducida de la condición inicial vendría dada, y un cambio del tamaño de celda tendría como consecuencia una modificación de la fase ϕ y, por tanto, de la respuesta del esquema. El enfoque planteado en estos ensayos no es otro que corroborar las tendencias obtenidas de los errores de difusión y dispersión, razón por la cual se variará sólo el valor de ϕ y de σ .

En virtud de las figuras A.9(a) y A.10(a), es posible determinar el valor del error de difusión para distintos valores de la fase y del número CFL, valor que se mantiene constante en el tiempo. Para validar los resultados, se van a plantear 4 tests para cada método:

Test	$\phi^{(0)}$	σ
1	20	0.25
2	20	0.8
3	40	0.25
4	40	0.8

Tabla A.1: Tests para el método FOU y Runge-Kutta 2.

En caso de tener interés en esquemas de segundo orden, su análisis se realiza de forma muy detallada en la referencia [?], abordando el estudio de los esquemas de Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff o Leap-Frog, por ejemplo, de gran interés, pero que escapan del enfoque del trabajo en su conjunto.

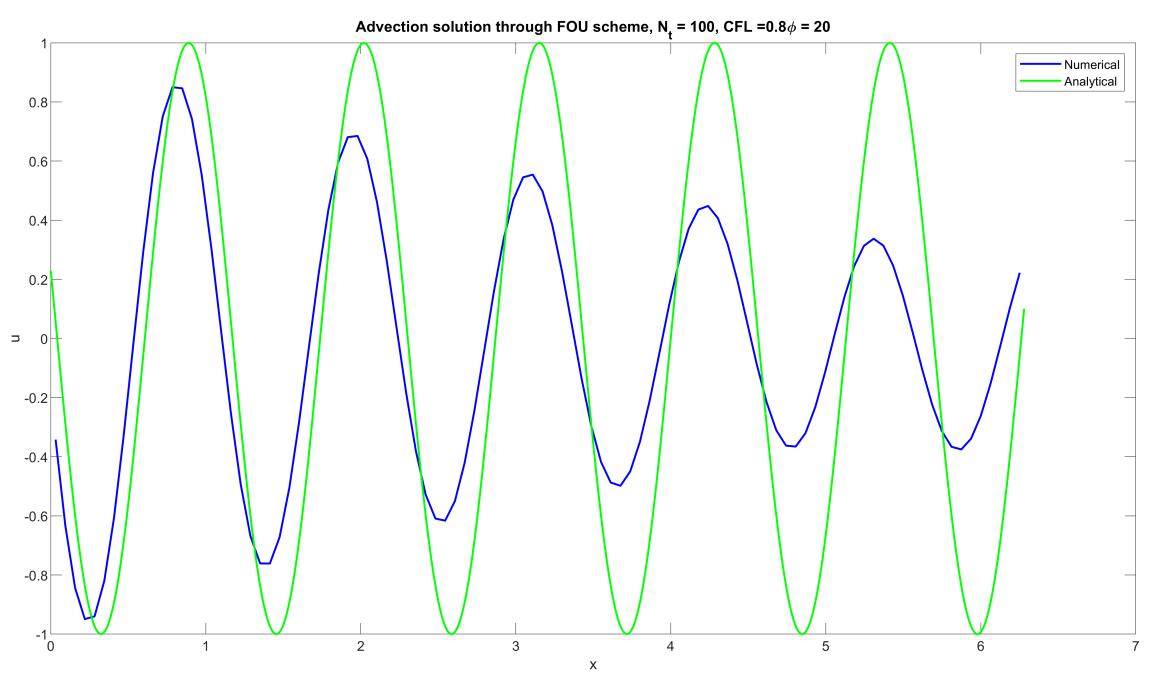
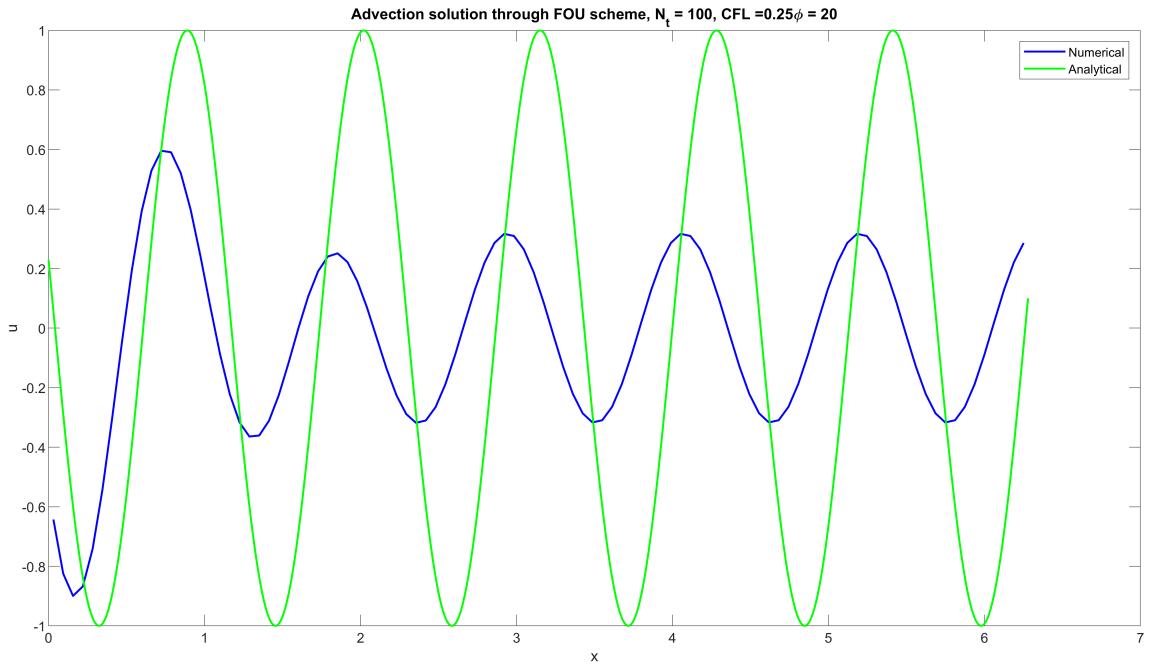
A.5.6 Esquema *FOU* (Método de Euler).

Dado que el valor de ε_D se mantiene constante, es posible calcular de forma sencilla el error acumulado tras un cierto número de pasos de tiempo. Tomando por ejemplo el test 1, si se entra en la figura A.9(a) con los valores pertinentes, se obtiene $(\varepsilon_D)_{FOU,1} = 0.9851$. Mediante una simple potenciación, se obtiene que el error acumulado en cien pasos de tiempo es $(\varepsilon_D)_{FOU,1,total} = 0.222$. Este valor se aproxima razonablemente bien al valor obtenido computacionalmente, que se puede observar en la figura A.11(a), siendo aproximadamente 0.245. En el caso del test 2 (figura A.11(b)), en consonancia con el valor más bajo de error obtenido en la figura A.9(a), se observa una amplitud mayor, aunque igualmente bastante alejada de la original. Nótese que un pequeño incremento en el valor absoluto del error (del orden de centésimas) tiene un impacto enorme en el error final, alcanzando casi el doble de amplitud.

En los test 3 y 4 (figuras A.11(c) y A.11(d)), el error crece de manera muy fuerte, como hacía presagiar la curva del error de difusión. De hecho, la solución llega a ser plana, pasando a considerarse completamente inaceptable. Se mantiene la tendencia favorable al aumentar el CFL. Remarcar que no se muestran resultados con $\sigma > 1$ al volcar soluciones inestables y espúreas, que no merece la pena representar.

A.5.7 Esquema Runge-Kutta de 2 pasos.

En el caso del método de Runge-Kutta de 2 pasos, los comentarios son muy similares a los anteriores, manteniéndose la tendencia errática al aumentar la fase. Sin embargo, en cuanto al CFL, las tendencias se invierten, obteniéndose soluciones más benevolentes al disminuir dicho coeficiente. Esto está en consonancia con las curvas del error de difusión de la figura A.10(a).



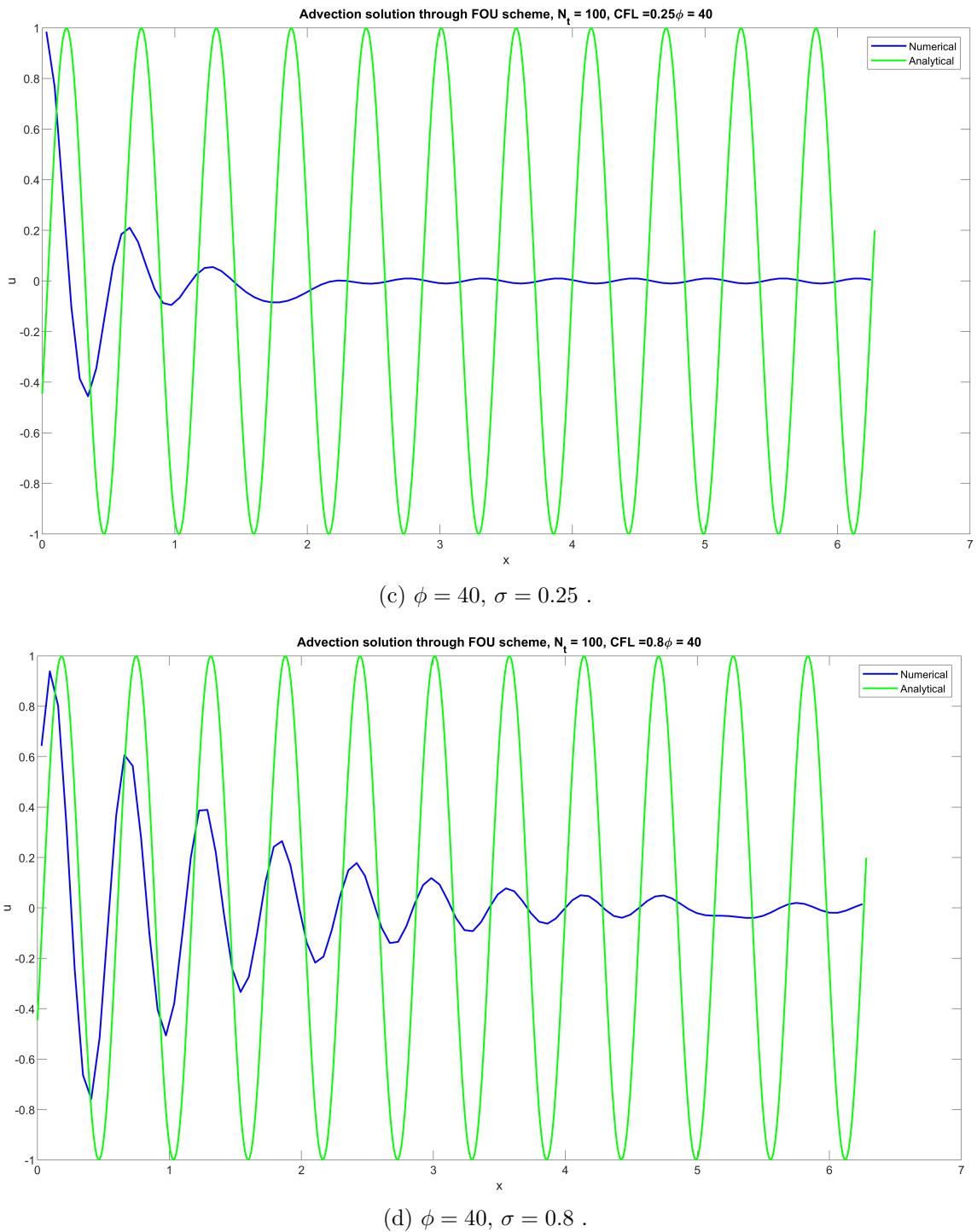
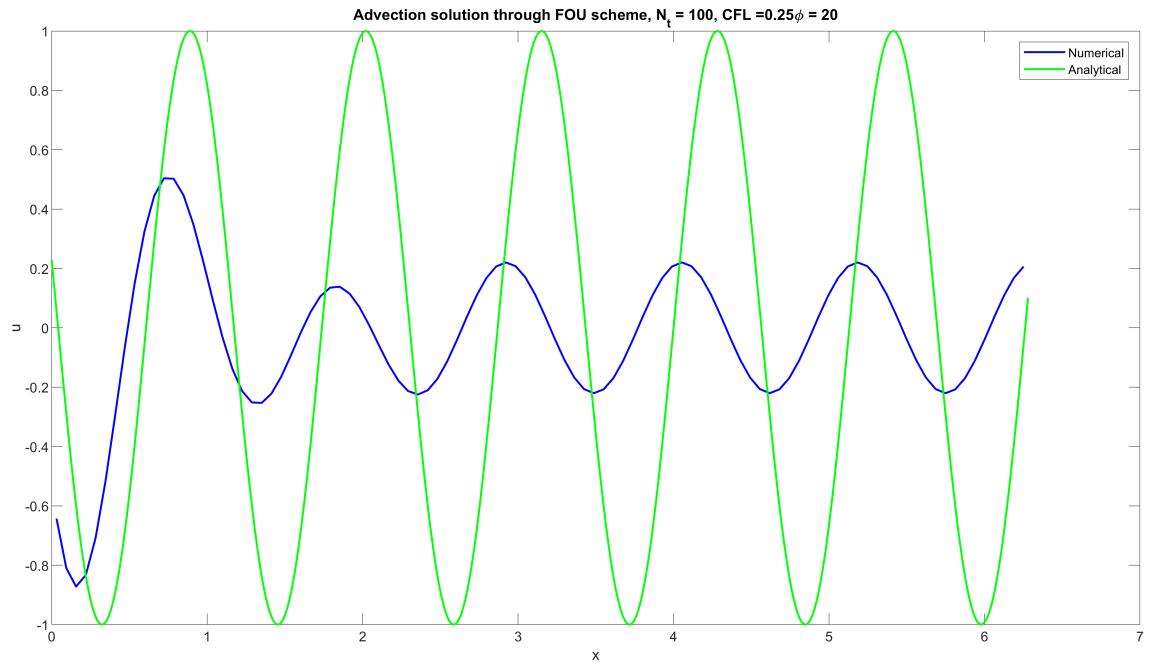
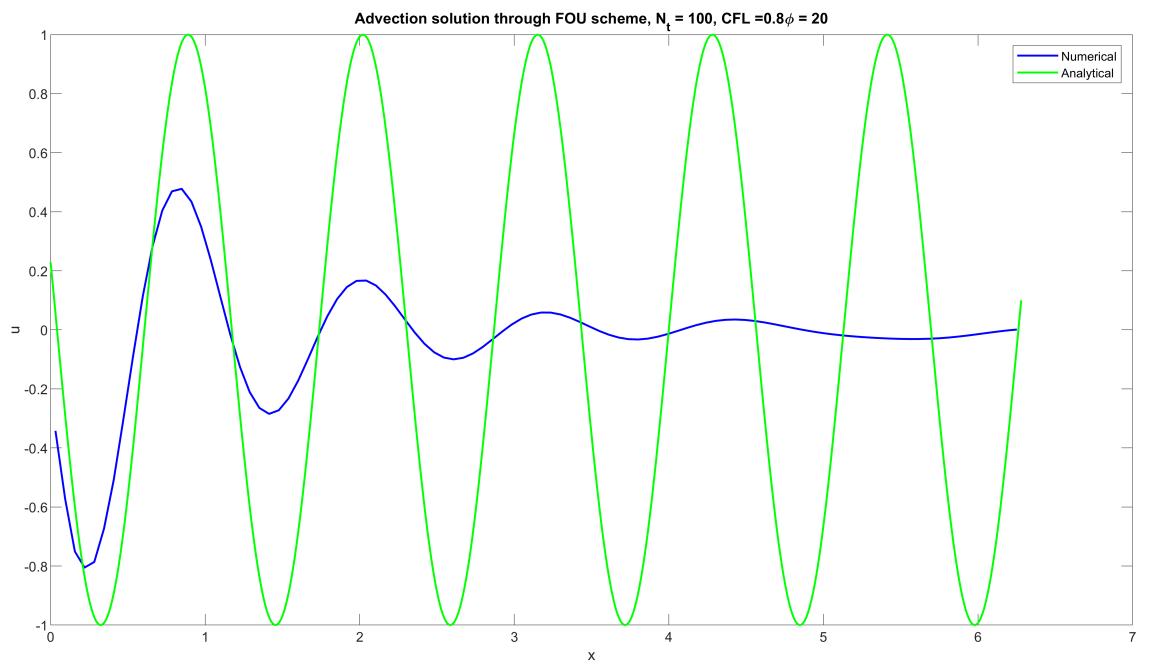


Figura A.11: Soluciones numérica (esquema *FOU*) y analítica de la ecuación de la advección.

(a) $\phi = 20$, $\sigma = 0.25$.(b) $\phi = 20$, $\sigma = 0.8$.

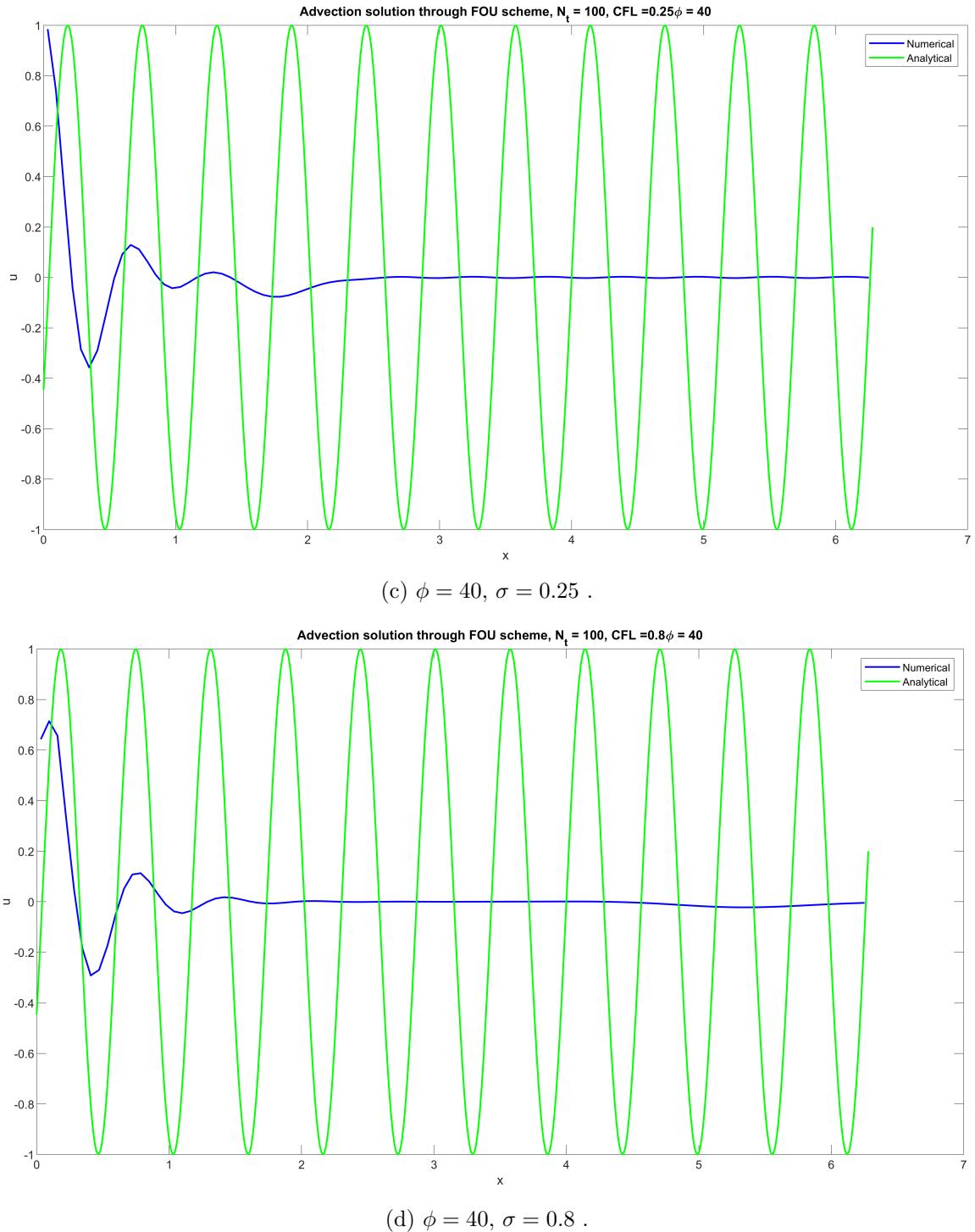


Figura A.12: Soluciones numérica (esquema Runge-Kutta-2) y analítica de la ecuación de la advección.

Solución analítica de las ecuaciones de Euler.

B.1 Introducción.

Las ecuaciones de Euler describen el movimiento de los denominados fluidos ideales, es decir, suponiendo negligibles la viscosidad y la conducción de calor del fluido. Ello estará justificado siempre y cuando se cumplan una serie de condiciones respecto a los números de Reynolds y de Prandtl, y suponen una simplificación radical respecto a las ecuaciones de Navier-Stokes, al desaparecer las derivadas de orden superior y con ello, el carácter parabólico o irreversible de las mismas. Dicha simplificación, pese a ser notoria a nivel matemático, sigue permitiendo obtener unos resultados (bajo ciertas premisas) bastante cercanos a la realidad.

Sin embargo, la solución analítica para estas ecuaciones se reduce a unos pocos casos, como puede ser el flujo unidimensional o en secciones lentamente variables. En el presente informe, se tratará de resolver las ecuaciones de Euler reducidas a una dimensión (eje x), teniendo en cuenta por tanto solamente derivadas en dicha dimensión, pero resolviendo para todas las direcciones del espacio. En particular, se resolverá el problema de Riemann, caracterizado por la estructura de la condición inicial, compuesta por dos estados constantes separados por una discontinuidad. La solución analítica de dicho problema es conocida, y se utilizará para validar soluciones obtenidas por vías distintas.

El objetivo principal de este informe será validar el denominado método de Roe, un método aproximado para resolver problemas de Riemann de forma numérica. Se establecerán las bases y los precedentes de dicho método para finalmente comparar las soluciones obtenidas con la solución analítica, a fin de validar la implementación del método en el código desarrollado y poder aplicarlo con confianza en futuros problemas.

B.2 Ecuaciones de Euler y problema de Riemann.

En general, un problema de Cauchy para un sistema de leyes de conservación hiperbólico en derivadas parciales toma la siguiente forma:

$$[P] \left\{ \begin{array}{l} PDEs : \mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = \mathbf{0} \\ ICs : \mathbf{U}(x, 0) = \mathbf{U}^0(x) \\ BCs : \mathbf{U}(0, t) = \mathbf{U}_l(t), \quad \mathbf{U}(L, t) = \mathbf{U}_r(t) \\ \mathbb{D} : (x, t) \in [0, L] \times [0, \infty[\end{array} \right. \quad (\text{B.1})$$

La ecuación en sí se denomina ley de conservación del sistema, tomando el significado físico que se verá más adelante. En el caso de un problema de Riemann, la condición inicial pasa a ser una combinación de dos estados constantes. Además, suponiendo un dominio espacial infinito, las condiciones de contorno “desaparecen”, de modo que:

$$[P] \left\{ \begin{array}{l} PDEs : \mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = \mathbf{0} \\ ICs : \mathbf{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{si } x < 0 \\ \mathbf{U}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \end{array} \right. \quad (\text{B.2})$$

El objetivo es resolver la anterior ecuación restringiéndola a un cierto dominio abarcable (por ejemplo, desde -1 a 1) y para una ley de conservación particular: las ecuaciones de Euler. Ellas quedan caracterizadas definiendo el vector de variables conservadas \mathbf{U} y la función de flujo $\mathbf{F}(\mathbf{U})$. Es interesante recordar que estas ecuaciones están formuladas en variables conservadas (\mathbf{U}), que no deben ser confundidas con las variables primitivas o termodinámicas (\mathbf{W}). Esto cobrará importancia más adelante, ya que los problemas numéricos se resuelven en variables conservadas, mientras que la solución analítica de esta ecuación se conoce en variables primitivas. En este caso:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ u(E + p) \end{bmatrix} \quad \mathbf{W} = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \\ w \\ p \end{bmatrix}$$

A la hora de relacionar las variables conservadas y primitivas, son de aplicación una serie de definiciones termodinámicas acompañadas de las ecuaciones de estado (EOS). En este caso, suponiendo gases ideales y caloríficamente perfectos, las relaciones son las siguientes:

$$E = \rho e + \frac{1}{2} \rho \mathbf{V}^2, \quad \mathbf{V}^2 = u^2 + v^2 + w^2, \quad e = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho}, \quad a^2 = \gamma \frac{p}{\rho}, \quad H = \frac{E + p}{\rho}$$

B.3 Solución analítica.

B.3.1 Estructura de la solución.

La solución analítica de este problema es ampliamente conocida. Se trata de una generalización del denominado “tubo de choque” (*shock tube*), que modeliza el comportamiento de dos gases estáticos separados por una membrana. La estructura de la solución es un sistema de ondas, formado por tres discontinuidades. La solución más general del problema se compone de una combinación de dos ondas (ondas de choque, rarefacciones o ambas), separadas en todo caso por una discontinuidad de contacto. En la figura B.1 se observa dicha estructura, que divide el dominio (x, t) en, a priori, cuatro subdominios:

- La región izquierda, donde la solución coincide con la solución inicial en $x < 0$ (\mathbf{W}_L),
- La región derecha, donde la solución coincide con la solución inicial en $x > 0$ (\mathbf{W}_R),
- La región estrella (*star region*), encapsulada entre ambas ondas, y subdividida en:
 - Región estrella izquierda, comprendida entre la onda izquierda y la discontinuidad de contacto,
 - Región estrella derecha, comprendida entre la discontinuidad de contacto y la onda derecha.

Las posibles variantes de la solución en función de las ondas presentadas en cada lado se muestran a continuación (B.2), donde las líneas arqueadas representan una rarefacción, la línea gruesa una onda de choque, y la discontinua una discontinuidad de contacto. Conviene remarcar que, en caso de implementar ciertos esquemas numéricos, es necesario un análisis adicional, generándose otras cuatro estructuras en el caso de una rarefacción sónica. Ello tendrá implicaciones discutidas más adelante.

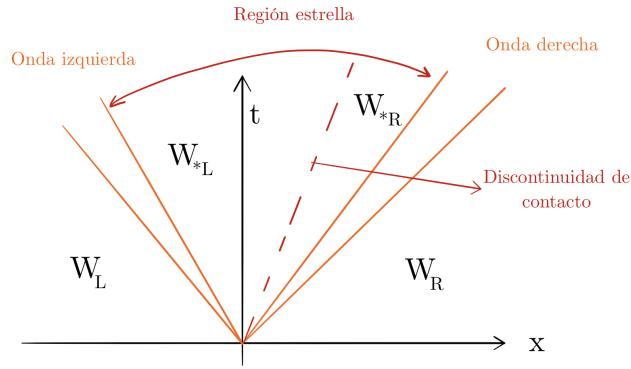


Figura B.1: Estructura genérica de la solución.

B.3.2 Solución en la región estrella.

Un análisis basado en la estructura de las ecuaciones revela que tanto la presión como la velocidad en la región estrella (p_*, u_*) entre ambas ondas son constantes, mientras que la densidad sí varía a ambos lados de la discontinuidad de contacto (ρ_{*L}, ρ_{*R}), de modo que se buscan cuatro magnitudes físicas. El proceso comienza por obtener la presión y la velocidad, tras lo cual y en función de la estructura de la solución, se calculan las densidades.

B.3.2.1 Obtención de la presión y velocidad.

Tras analizar las evoluciones de las magnitudes fluidas en ambos tipos de discontinuidades, se concluye que la presión en la región estrella satisface la siguiente ecuación:

$$f(p, \mathbf{W}_L, \mathbf{W}_R) \equiv f_L(p, \mathbf{W}_L) + f_R(p, \mathbf{W}_R) + \Delta u = 0, \quad \Delta u = u_R - u_L \quad (\text{B.3})$$

Donde las funciones f_L y f_R responden a las siguientes expresiones:

$$f_k(p, \mathbf{W}_k) \begin{cases} (p - p_k) \left[\frac{A_k}{p + B_k} \right]^{1/2} & \text{si } p > p_k \quad (\text{onda de choque}) \\ \frac{2a_k}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p}{p_k} \right)^{\frac{\gamma - 1}{2\gamma}} - 1 \right] & \text{si } p \leq p_k \quad (\text{rarefacción}) \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

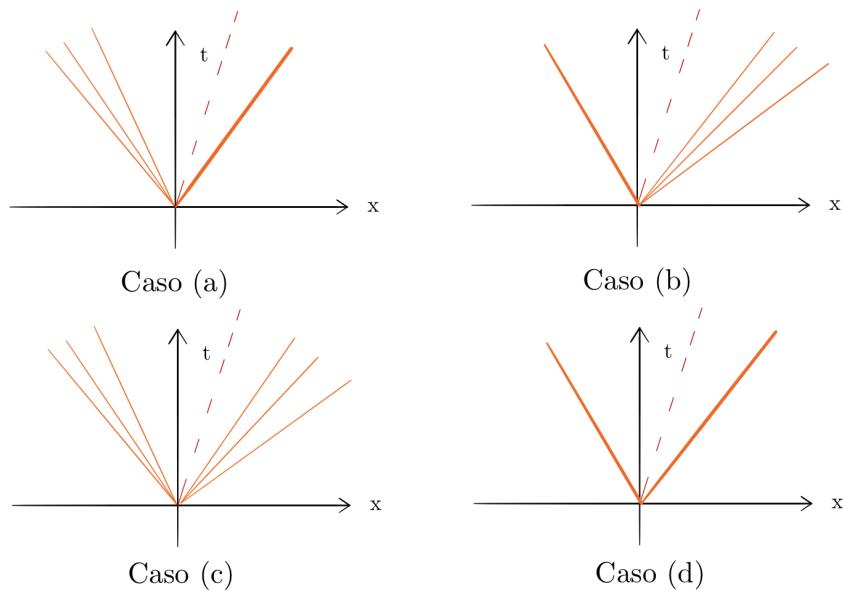


Figura B.2: Estructuras posibles de la solución a efectos de la solución analítica.

Donde el subíndice k hace las veces de L y R. Los coeficientes A_k y B_k se calculan como:

$$A_k = \frac{2}{(\gamma + 1)\rho_k}, \quad B_k = \frac{(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} p_k$$

Para una deducción detallada de ambas funciones así como de los coeficientes, se recomienda acudir a [?], apartado 4.2. La presión, por tanto, se calcula resolviendo de forma numérica la ecuación B.3, en particular con el método de Newton-Raphson, previo análisis de la monotonía y concavidad de la misma. Conocida la presión, la velocidad del fluido se calcula como:

$$u_* = \frac{1}{2} (u_L + u_R) + \frac{1}{2} [f_R(p_*) - f_L(p_*)] \quad (\text{B.5})$$

B.3.2.2 Obtención de las densidades.

Las densidades en ambas regiones se calculan de distinta manera dependiendo del fenómeno que suceda en la discontinuidad adyacente. De todos modos, las expresiones sólo dependen del tipo de discontinuidad y del estado adyacente, de modo que se pueden plantear las expresiones generales ($k = R, L$):

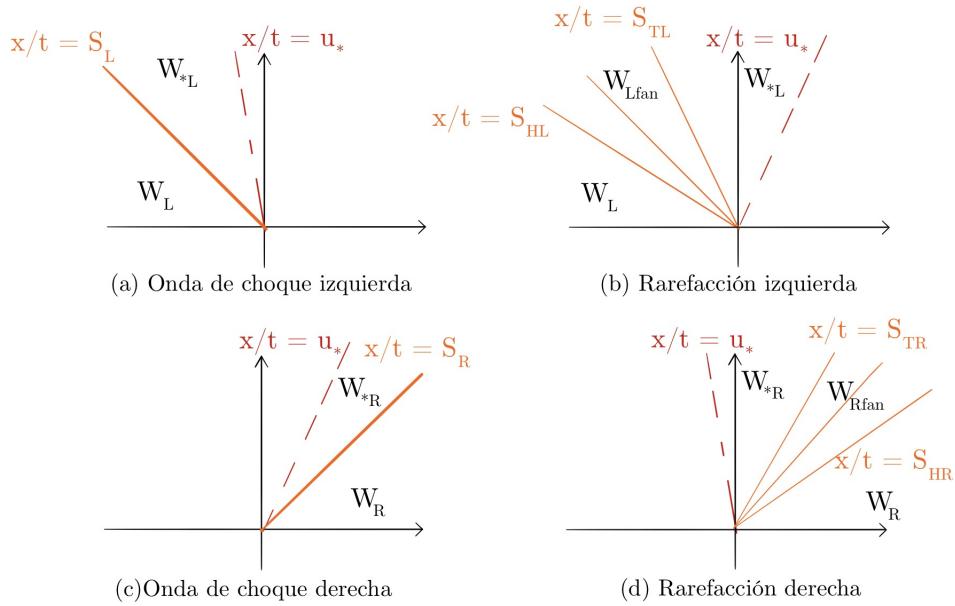


Figura B.3: Esquema de las características de cada una de las posibles discontinuidades.

Onda de choque: Aplicando la relación de Rankine-Hugoniot, se obtiene:

$$\rho_{\star k} = \rho_k \left[\frac{\left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) + \left(\frac{p_{\star}}{p_L} \right)}{\left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) \left(\frac{p_{\star}}{p_L} \right) + 1} \right] \quad (\text{B.6})$$

Rarefacción: Dado el carácter isentrópico de la evolución:

$$\rho_{\star k} = \rho_k \left(\frac{p_{\star}}{p_k} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \quad (\text{B.7})$$

B.3.2.3 Obtención de las características y solución dentro de una rarefacción.

Las últimas magnitudes a obtener para poder muestrear la solución completa del problema son las características de cada discontinuidad, que responden a las siguientes expresiones:

Onda de choque izquierda.

Se corresponde con la figura B.3 (a). Queda completamente caracterizada con el cálculo de la

velocidad de la onda, resultando ser:

$$S_L = u_L - a_L \left[\frac{\gamma+1}{2\gamma} \frac{p_\star}{p_L} + \frac{\gamma-1}{2\gamma} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.8})$$

Rarefacción izquierda.

Representado en la figura B.3 (b), queda definida con el cálculo de las velocidades de las características de cabeza (*head*) y de cola (*tail*):

$$S_{HL} = u_L - a_L, \quad S_{TL} = u_\star - a_{\star L}, \quad a_{\star L} = a_L \left(\frac{p_\star}{p_L} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \quad (\text{B.9})$$

En este caso, la solución entre la cabeza y la cola de la rarefacción difiere de ambas regiones lindantes. La solución en un punto (x, t) responde a:

$$\boldsymbol{W}_{Lfan} = \begin{cases} \rho &= \rho_L \left[\frac{2}{\gamma+1} + \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)a_L} \left(u_L - \frac{x}{t} \right) \right]^{\frac{2}{\gamma-1}} \\ u &= \frac{2}{\gamma+1} \left[a_L + \frac{\gamma-1}{2} u_L + \frac{x}{t} \right] \\ p &= p_L \left[\frac{2}{\gamma+1} + \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)a_L} \left(u_L - \frac{x}{t} \right) \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

Onda de choque derecha

$$S_R = u_R + a_R \left[\frac{\gamma+1}{2\gamma} \frac{p_\star}{p_R} + \frac{\gamma-1}{2\gamma} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.11})$$

Rarefacción derecha

Se calculan la cabeza y la cola de la rarefacción (ver figura B.3 (d)):

$$S_{HL} = u_L - a_L, \quad S_{TL} = u_\star - a_{\star L}, \quad a_{\star L} = a_L \left(\frac{p_\star}{p_L} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} \quad (\text{B.12})$$

Análogamente al caso izquierdo:

$$\mathbf{W}_{Rfan} = \begin{cases} \rho &= \rho_R \left[\frac{2}{\gamma+1} - \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)a_R} \left(u_R - \frac{x}{t} \right) \right] \frac{2}{\gamma-1} \\ u &= \frac{2}{\gamma+1} \left[-a_R + \frac{\gamma-1}{2} u_R + \frac{x}{t} \right] \\ p &= p_R \left[\frac{2}{\gamma+1} - \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)a_R} \left(u_R - \frac{x}{t} \right) \right] \frac{2\gamma}{\gamma-1} \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

B.3.3 Solución completa. Muestreo de la solución.

Supónganse conocidas las variables termodinámicas en la totalidad del espacio de muestreo, es decir, densidades, velocidades y presiones en cada una de las regiones descritas anteriormente; así como las curvas características del problema. El objetivo de este apartado es, dado un punto determinado por (x,t) , calcular la solución en él, es decir, el vector de variables primitivas $\mathbf{W} = (\rho, u, p)^T$. En este momento es importante remarcar que la solución es de tipo auto-semejante, lo que quiere decir que el sistema carece de una longitud característica o escala de tiempo, de modo que la solución es semejante consigo misma se represente en la escala que se represente. Ello permite muestrear la solución en un punto caracterizándolo únicamente con el valor $S = x/t$, comúnmente denominada velocidad del punto.

Se irá localizando el punto con relación a las referencias del espacio solución de manera sucesiva, tomando diversas referencias.

B.3.3.1 Parte izquierda de la discontinuidad de contacto: $x/t < u_*$

Tal y como se muestra en la figura B.3 (a) y (b), existen dos posibles soluciones en función del tipo de discontinuidad:

A: Onda de choque izquierda.

La condición es $p_* > p_L$. Es necesario determinar si está a la derecha o a la izquierda de la discontinuidad:

$$\mathbf{W}(x,t) \begin{cases} \mathbf{W}_{*L}^{OCH} & \text{si } S_L \leq \frac{x}{t} \leq u_* \\ \mathbf{W}_L & \text{si } \frac{x}{t} \leq S_L \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

B: Rarefacción izquierda.

La condición es $p_\star \leq p_L$. En este caso, como se observa en B.3(b), surgen 3 regiones:

$$\mathbf{W}(x, t) \begin{cases} \mathbf{W}_L & \text{si } \frac{x}{t} \leq S_{HL} \\ \mathbf{W}_{L\text{fan}} & \text{si } S_{HL} \leq \frac{x}{t} \leq S_{TL} \\ \mathbf{W}_L^{RF} & \text{si } S_{TL} \leq \frac{x}{t} \leq u_\star \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

B.3.3.2 Parte derecha de la discontinuidad de contacto: $x/t > u_\star$

Análogamente al apartado anterior:

A: Onda de choque derecha.

La condición es $p_{star} > p_R$. Es necesario determinar si está a la derecha o a la izquierda de la discontinuidad:

$$\mathbf{W}(x, t) \begin{cases} \mathbf{W}_{\star R}^{OCH} & \text{si } u_\star \leq \frac{x}{t} \leq S_R \\ \mathbf{W}_R & \text{si } \frac{x}{t} \geq S_R \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

B: Rarefacción derecha.

La condición es $p_{star} \leq p_R$:

$$\mathbf{W}(x, t) \begin{cases} \mathbf{W}_{\star R}^{RF} & \text{si } u_\star \leq \frac{x}{t} \leq S_{TR} \\ \mathbf{W}_{R\text{fan}} & \text{si } S_{TR} \leq \frac{x}{t} \leq S_{HR} \\ \mathbf{W}_{\star L}^{RF} & \text{si } \frac{x}{t} \geq S_{HR} \end{cases} \quad (\text{B.17})$$

A modo de resumen visual y pseudo-código, se adjuntan sendos diagramas de flujo para ambos lados de la discontinuidad de contacto en la figura B.4.

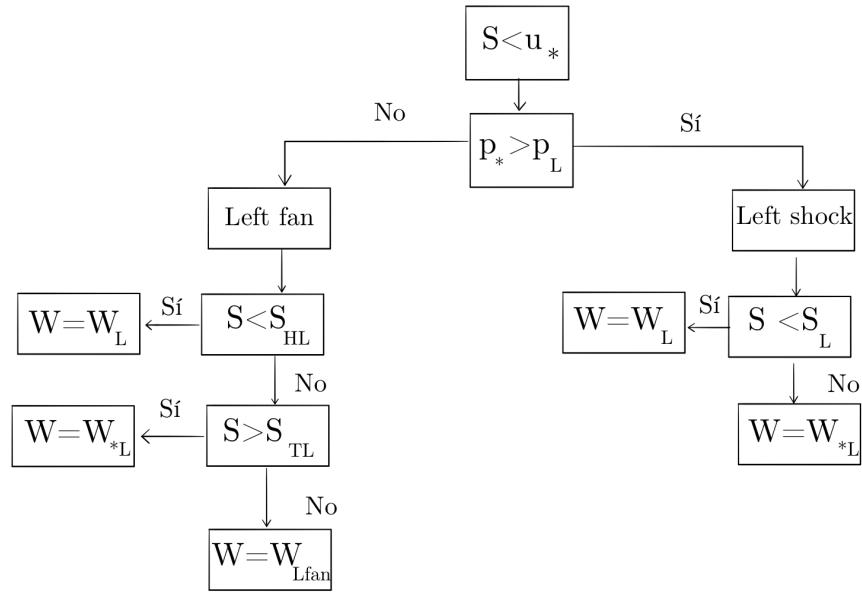
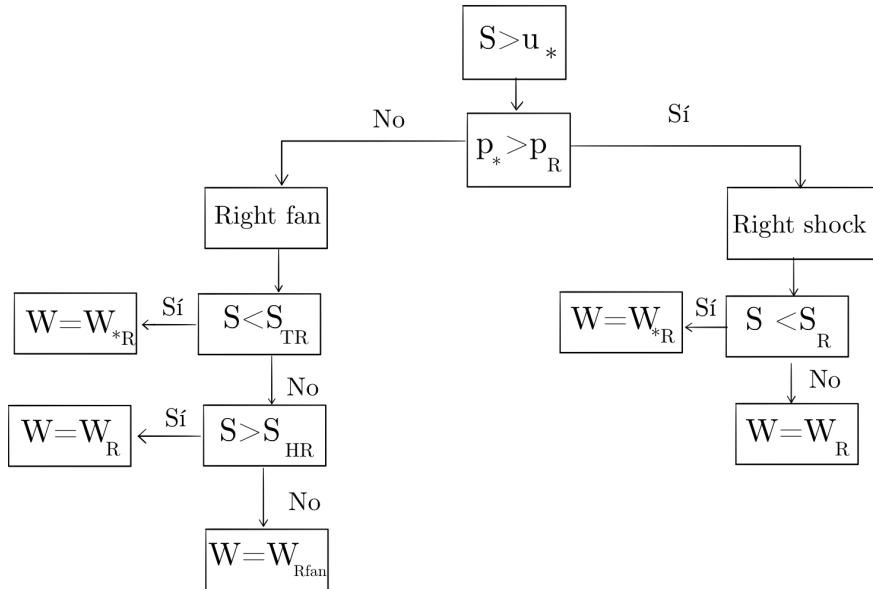
(a) Caso $S < u_*$ (izquierda).(b) Caso $S > u_*$ (derecha).

Figura B.4: Diagramas de flujo para el muestreo de la solución.

B.3.4 Resultados obtenidos.

Para probar el correcto funcionamiento del método de Roe, se utilizarán una serie de tests extraídos de Toro [?], siendo en particular:

Test	ρ_L	u_L	p_L	ρ_R	u_R	p_R
1	1.0	-0.75	1.0	0.125	0.0	0.1
2	1.0	-2.0	0.4	1.0	2.0	0.4
3	1.0	0.0	1000.0	1.0	0.0	0.01
4	5.99924	19.5975	460.894	5.99242	-6.19633	46.0950
5	1.0	-19.5975	1000.0	1.0	-19.5975	0.01

Tabla B.1: Datos para los ensayos.

Es interesante remarcar que la elección del tiempo final en cada caso se realiza de acuerdo a los órdenes de magnitud de las variables fluidas. Dado que en los métodos numéricos el paso temporal es inversamente proporcional al valor máximo de las variables fluidas, con condiciones iniciales de valores superiores al orden unidad (véanse tests 3, 4 o 5), el número de pasos temporales crece de forma exorbitada, proporcionalmente a su orden de magnitud (millares). Es por eso por lo que se opta por tiempos finales cortos en dichos casos.

B.3.4.1 Test 1.

Comúnmente denominado test de *Sod*, supone una prueba bastante permisiva para los métodos numéricos, consistiendo en una rarefacción izquierda acompañada de una onda de choque. Existen dos variantes: El test de Sod original, el cual supone velocidad nula en ambos lados ($u_L = 0$) y el modificado, que es el mostrado en la tabla B.1 como (1).

En la figura B.5 se puede observar en todas las variables un comportamiento coherente, donde se manifiesta la rarefacción a la izquierda mediante un salto progresivo en las variables fluidas, así como un salto brusco en la derecha, correspondiéndose con una onda de choque. Por otra parte, en la figura B.6, los resultados son prácticamente iguales, salvo que la velocidad es mayor en la parte izquierda (lo cual es lógico a la vista de las condiciones iniciales).

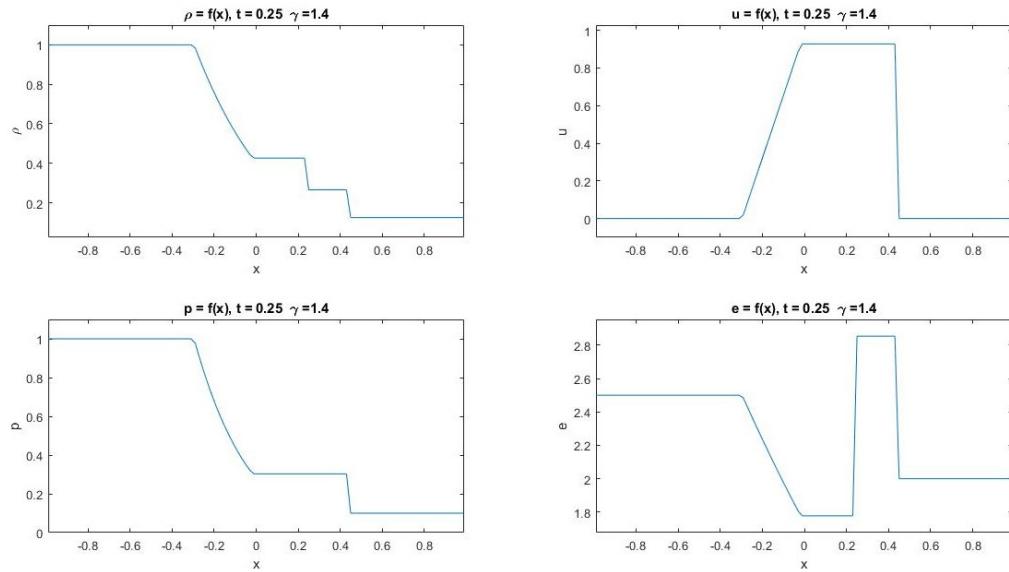


Figura B.5: Solución analítica del test de Sod (sin modificar), con $t_f = 0.25$.

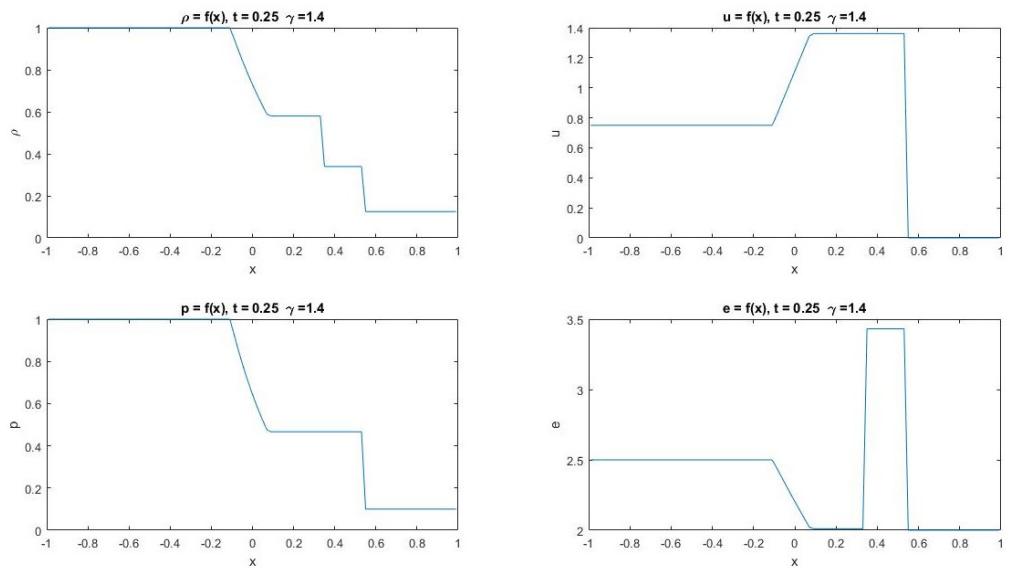


Figura B.6: Solución analítica del test de Sod modificado, con $t_f = 0.25$.

B.3.4.2 Test 2.

Se trata del llamado test 123, exigente dadas las bajas densidades y presiones presentes, existiendo dos rarefacciones realmente fuertes:

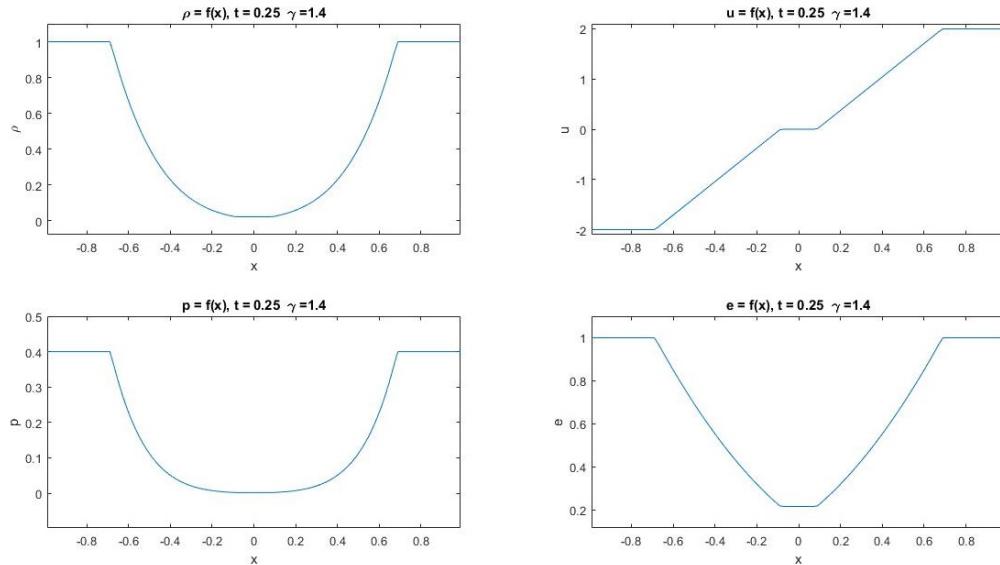
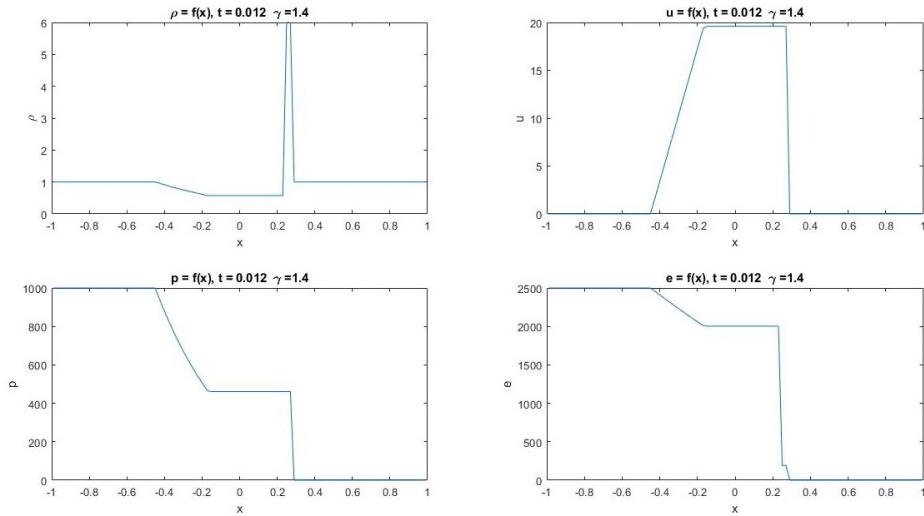


Figura B.7: Solución analítica del test 2, con $t_f = 0.25$.

Los resultados (B.7) muestran de forma clara dicho comportamiento, con evoluciones progresivas en las variables fluidas, como corresponde a rarefacciones. Podría interpretarse como una expansión de una zona central de bajas presiones hacia ambos costados, lo cual es corroborado por la asimetría en la velocidad del fluido.

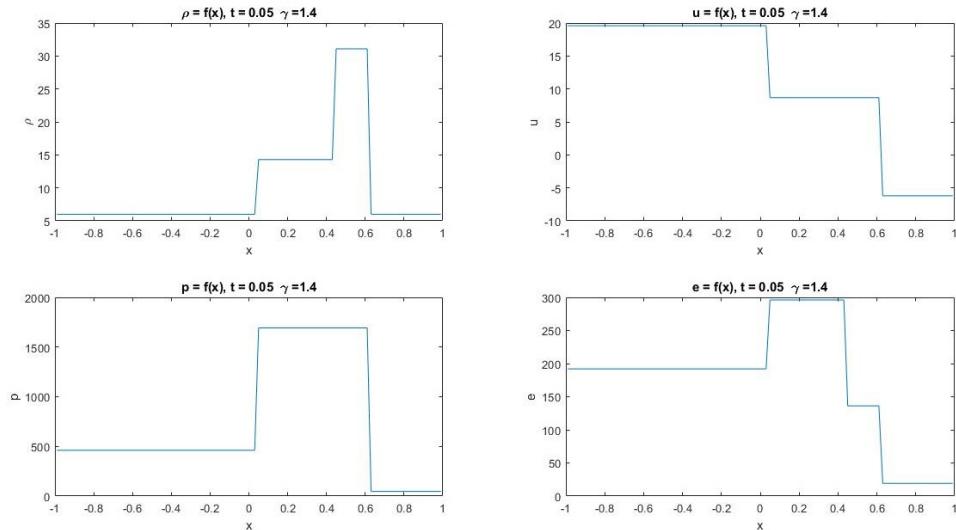
B.3.4.3 Test 3.

Se trata de un test bastante severo con métodos poco adecuados. Tal y como se ve, se compone de una onda de choque derecha muy fuerte ($M = 198$) y una rarefacción izquierda. La solución es en cierto modo similar al test de Sod, pero con gradientes en las variables mucho más notorios, abocando a discontinuidades mucho más salvajes.

Figura B.8: Solución analítica del test 3, con $t_f = 0.012$.

B.3.4.4 Test 4.

Se observa la existencia de dos ondas de choque, correspondiéndose con sendos saltos bruscos en las variables, que además se desplazan en todo caso hacia la derecha del campo fluido (siendo la velocidad consistentemente positiva).

Figura B.9: Solución analítica del test 4, con $t_f = 0.05$.

B.3.4.5 Test 5.

En la figura B.10 se aprecian una rarefacción en la izquierda del campo fluido, acompañada de una onda de choque centrada en el origen. Se trata de un test exigente una vez más dados los gradientes existentes en el problema.

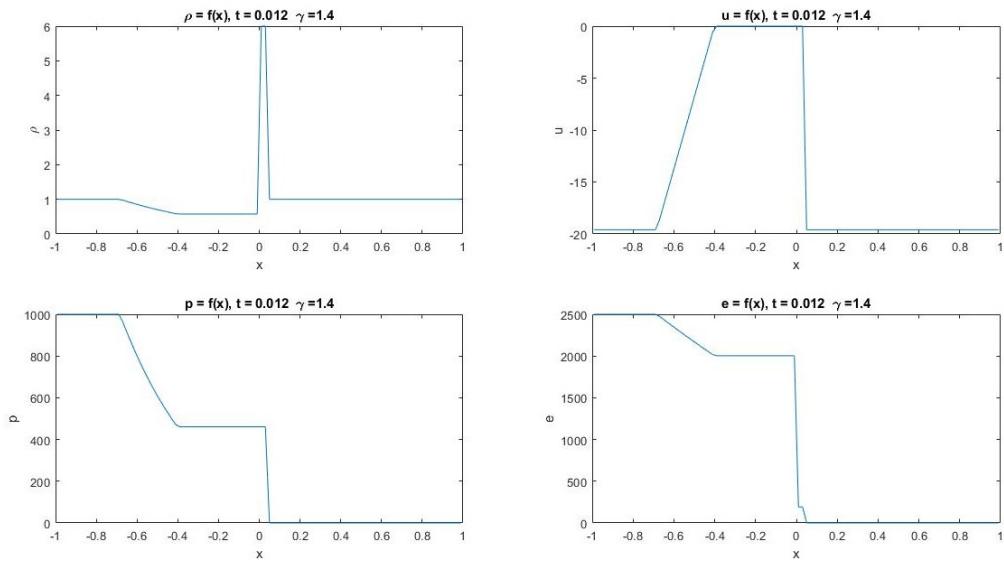


Figura B.10: Solución analítica del test 5, con $t_f = 0.012$.



Desarrollo de software.

C.1 Introducción.

Una parte vital a la hora de realizar análisis y simulaciones numéricas, sean del tipo que sean, es la elección del lenguaje de código para su implementación. El abanico es amplísimo, pero dada su robustez y el conocimiento previo, se decide utilizar FORTRAN 95 para la totalidad de los problemas simulados en el trabajo. Adicionalmente, por su gran adaptabilidad y variedad de opciones con respecto a las representaciones gráficas, se ha trabajado con Matlab, que si bien cuenta con innumerables aplicaciones y herramientas, solamente se ha utilizado a estos efectos.

Por tanto, para la resolución de cualquiera de los problemas desarrollados a lo largo del proyecto, la simulación ha sido realizada con el lenguaje FORTRAN, de la mano con el editor de código Visual Studio. Mediante un conjunto de subrutinas, los datos numéricos obtenidos se exportan a un fichero *.m*, de tipo Matlab. En dicho fichero, además de los propios datos numéricos, se incluyen todas las órdenes necesarias para la representación gráfica de dichos datos (ejes, títulos, leyendas, formato...). Una alternativa, también abordada, es la utilización de ficheros de tipo *tecplot*, aunque no se desarrolló en profundidad en vista de la bondad del programa Matlab.

A continuación se va a dar una visión general sobre el código desarrollado asociado al módulo termodinámico de la formación de hielo, a fin de evaluar su funcionamiento básico.

C.2 Programa prICE_K.

El programa prICE_K constituye el código del módulo termodinámico de la simulación de la formación de hielo. Su objetivo es, por tanto, dados unos datos del campo fluido y otros del impacto de gotas, así como unos ciertos parámetros, la obtención de la masa de hielo formada y su distribución sobre la geometría estudiada (bidimensional en todo caso). A continuación se adjuntan diversos diagramas de flujo que describen su funcionamiento básico.

C.2.1 Diagrama de flujo general.

En la figura C.1 se observa un diagrama de flujo que representa el funcionamiento del programa completo, desde la carga del *setup* hasta la representación de los resultados, distinguiéndose las fase de pre-proceso, computación y post-proceso.

C.2.2 Diagrama de flujo de la actualización de la solución.

Dada la complejidad de la obtención de la solución en este problema, se incluye en la figura C.2 un diagrama de flujo de detalle sobre el proceso de actualización de la solución:

C.2.3 Descripción de los módulos del programa.

Por el mayor orden que confiere al código en su conjunto, se ha optado por una programación de carácter modular. En particular, los módulos de que está compuesto el programa y sus funciones básicas son:

- I. **prICE_K**: Se trata del programa principal (*main*), y sus funciones son, a grandes rasgos, orquestar el funcionamiento global del programa. Corre el *setup*, inicializa las variables del mallado y de la solución, asimila los datos de entrada del GOTA y del TAU, y llama al *solver*, y por último, exporta los datos a un fichero Matlab mediante la llamada a una cierta subrutina.
- II. **Solver_K**: Es el módulo que, dado un mallado, parámetros de la simulación, y unos datos de captación y del campo fluido, obtiene la solución final del problema. Incluye una serie de subroutines, como la principal **prICE_Solver**, que avanza la simulación en el tiempo, el subprograma **Sampling**, que para cada punto, realiza el proceso de estimación de la solución y su validación, la subrutina **System_Solve**, que calcula la solución del sistema de EDPs en función de la región, y por último la subrutina **Compatibility**, que evalúa el cumplimiento de las condiciones termodinámicas de compatibilidad.
- III. **Models**: Incluye toda la modelización termodinámica del problema: modelos de los términos fuente, de presión de vapor, del coeficiente de película...
- IV. **Graphics_utilities**: Contiene las subroutines cuya función es exportar un archivo de Matlab listo para ejecutar, que represente gráficamente la solución del problema.
- V. **Setup**: Su función es correr el archivo *Settings_IA.ini*, cargando todos los parámetros de la simulación así como ciertas constantes termodinámicas.

VI. **Constants:** Incluye constantes de diversas naturalezas, a nivel de programación básica (número π , longitud de *strings*...)

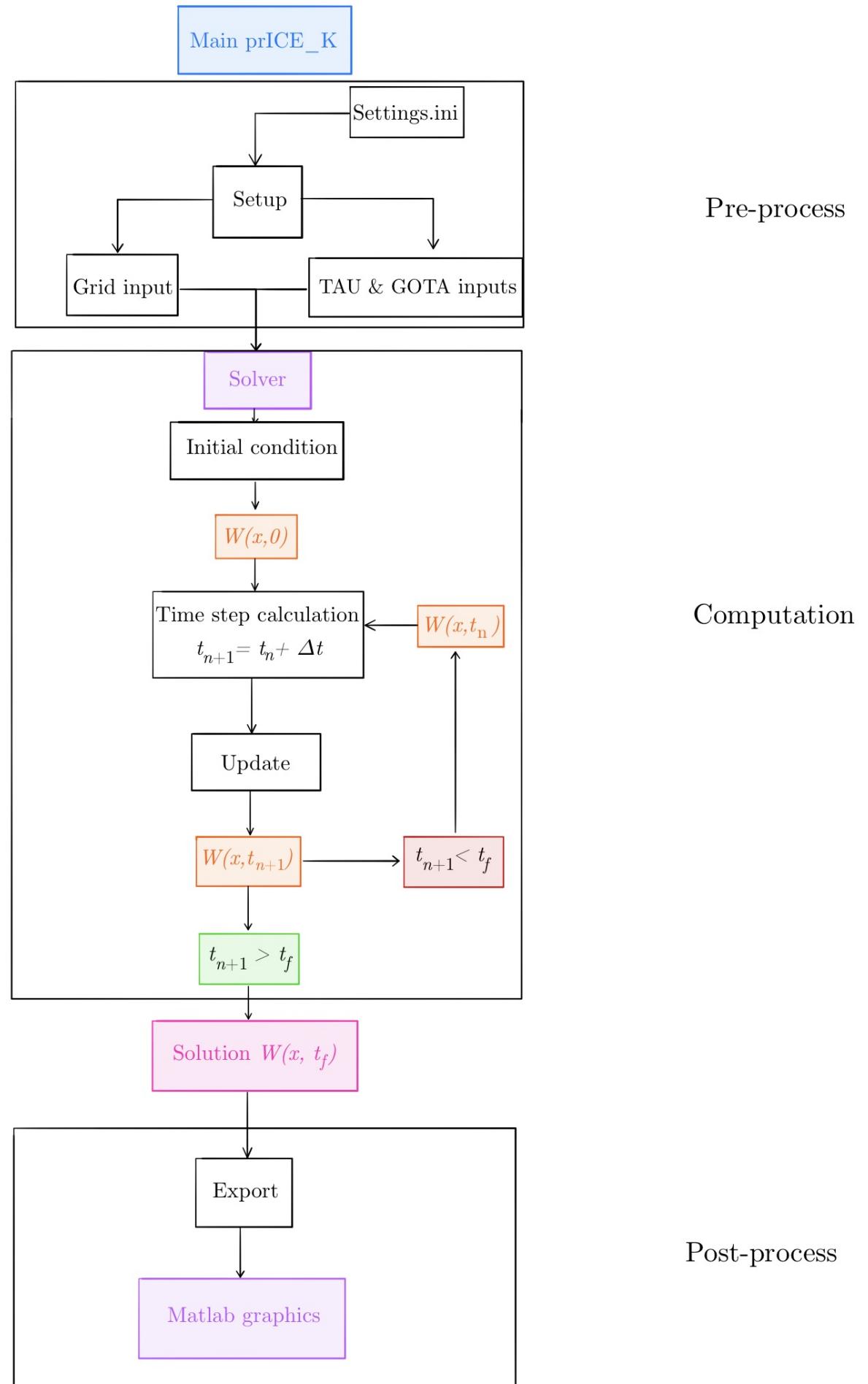


Figura C.1: Diagrama de flujo del funcionamiento global del programa.

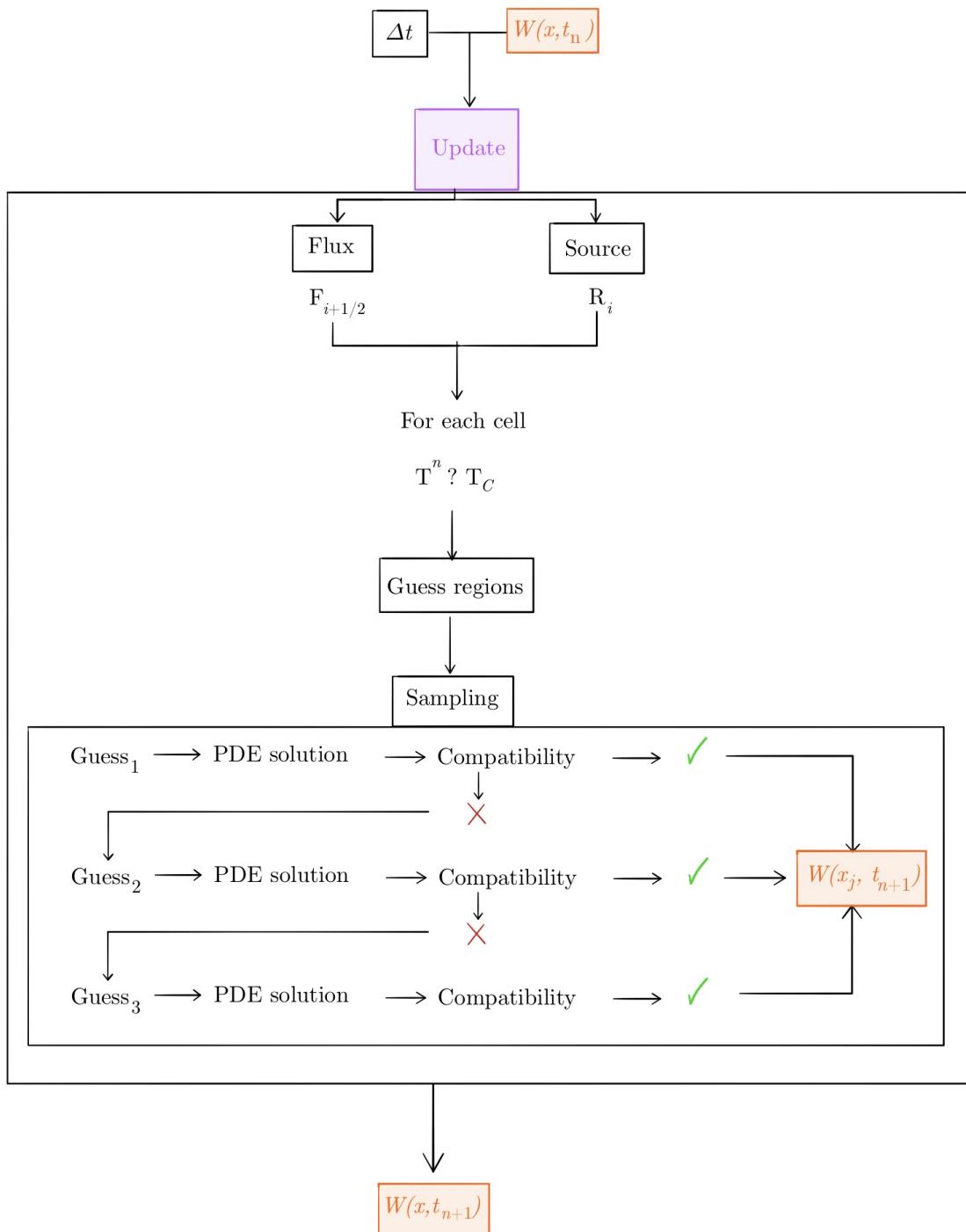


Figura C.2: Diagrama de flujo del proceso de actualización de la solución.